

***МНС***

***2017***

---

**МОДЕЛИРОВАНИЕ  
НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ – 2017**

**Красноярск  
2017**

Министерство образования и науки РФ  
Сибирское отделение РАН  
Сибирский федеральный университет  
Институт вычислительного моделирования СО РАН  
Институт систем энергетики им. Л. А. Мелентьева СО РАН  
Институт физики СО РАН

# **МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ-2017**

МАТЕРИАЛЫ  
ДВАДЦАТОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА  
6 – 8 октября 2017 года

Красноярск 2017

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

**Моделирование неравновесных систем:** Материалы XX Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2017. –173 с.

*В сборнике представлены материалы XX Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем» (МНС–2017), проходившего в городе Красноярске 6–8 октября 2017 г.*

*Проблема моделирования неравновесных систем – одна из важнейших современных научных проблем на стыке математического моделирования, физики, химии, биологии, социальных наук. Важнейшим итогом конференции является обмен последними результатами в различных областях моделирования и исследования неравновесных моделей, описывающих самые различные конкретные системы в области химии, биоинформатики, экологии, генетики, биофизики, социологии, демографии, теории управления сложными системами, теории управления рефлексивными системами, политологии. Среди главных достижений конференции – формирование целостного взгляда на подходы в моделировании неравновесных систем различной природы среди участников этой конференции, распространение опыта и новейших методов моделирования и анализа таких систем на более широкие области применимости.*

*Материалы предназначены для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов соответствующих специальностей.*

**Редакционная коллегия:**

Садовский Михаил Георгиевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2017

© Коллектив авторов, 2017

ISBN 978-5-906455-12-3



9 785906 455123

# АНАЛИЗ ФУНКЦИЙ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФОТОНОВ ПО ЧАСТОТАМ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ РАССЕЯНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ ОПТИЧЕСКИ ПЛОТНЫМИ СРЕДАМИ

М.Н. Арасланова, Н.И. Косарев

Сибирский федеральный университет,  
Институт цветных металлов и материаловедения, кафедра фундаментального  
естественнонаучного образования, [kosarev\\_nikolai@mail.ru](mailto:kosarev_nikolai@mail.ru)

В настоящее время теория радиационного переноса в атмосферах звезд и планет, сформированная благодаря исследованиям, в основном, авторов [1, 2], в своей основе содержит предположение о полном перераспределении по частотам (ППЧ). Модель ППЧ до сих пор используется при моделировании задач радиационной кинетики космической и лабораторной плазмы и газа [3 – 8]. В условиях ППЧ полностью отсутствует какая-либо корреляция между поглощенным и излученным фотонами. В некоторых физических ситуациях возникает необходимость учета частичного перераспределения по частотам (ЧПЧ) для объяснения экспериментальных результатов или оценки его влияния на процесс рассеяния фотонов [9, 10].

В условии ЧПЧ частоты излученных фотонов  $\nu$  коррелируют с частотами поглощенных  $\nu'$ . Вид этой корреляции определяется функцией перераспределения по углам и частотам  $R(\nu', \vec{n}'; \nu, \vec{n})$  [11, 12]. Прежде чем излучится фотон с частотой  $\nu$ , в направлении  $\vec{n}$  внутри телесного угла  $d\omega$ , поглотится фотон, который имел частоту  $\nu'$  и двигался в направлении  $\vec{n}'$  внутри телесного угла  $d\omega'$ . Будем использовать усредненную по телесным углам, изотропную в системе отсчета атома функцию перераспределения по частотам  $R(\nu', \nu)$ , которая удовлетворяет условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\nu \int_{-\infty}^{\infty} d\nu' R(\nu', \nu) = 1.$$

Интегрирование  $R(\nu', \nu)$  по частотам излученных фотонов позволяет получить частотный профиль линии поглощения  $\Phi(\nu')$

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(\nu', \nu) d\nu = \Phi(\nu'),$$

а ее интегрирование по частотам поглощенных фотонов дает контур линии излучения

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(\nu', \nu) d\nu = \Psi^*(\nu).$$

В дальнейшем рассмотрим случай естественного возбуждения, при котором профиль излучения совпадает с профилем поглощения  $\Psi^*(\nu) = \Phi(\nu)$ . Контур, учитывающий совместное действие доплеровского и лоренцевского механизмов уширения будет иметь вид

$$\Phi(x) = a / \pi^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} [(x-y)^2 + a^2]^{-1} dy,$$

Условием нормировки последнего выражения является соотношение  $\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x) dx = 1$ , а параметр  $a = \Delta\nu_{\text{л}} / 2\Delta\nu_{\text{д}}$  с точностью до коэффициента 2 есть отношение лоренцевской ширины линии  $\Delta\nu_{\text{л}}$  к доплеровской  $\Delta\nu_{\text{д}}$ .

Функция перераспределения  $R(v', v)$  имеет особенный вид для различных моделей рассеяния фотонов атомами [11, 12]. Так функция перераспределения  $R_I(v', v)$  соответствует случаю полностью когерентного рассеяния в системе отсчета атома, который для этой модели рассеяния имеет бесконечно тонкие уровни энергии. При этом в лабораторной системе отсчета, учитывая доплеровское распределение атомов по скоростям, для функции  $R_I(v', v)$  получаем выражение [2]

$$R_I(x', x) = \pi^{-1/2} \int_{u_{\min}}^{\infty} \exp(-u^2) du, \quad (1)$$

где  $u'_{\min} = \max(|x'|, |x|)$ .

Функция перераспределения  $R_{II}(v', v)$  соответствует такому идеализированному атому, который имеет бесконечно тонкое нижнее состояние, а верхний его уровень уширен благодаря конечному времени жизни, обусловленному возможностью радиационного перехода на нижний уровень. Такая физическая ситуация, учитывая доплеровское перераспределение в лабораторной системе отсчета, приводит к функции перераспределения  $R_{II}(v', v)$  следующего вида

$$R_{II}(x', x) = \pi^{-3/2} \int_{|x'-x|/2}^{\infty} \exp(-u^2) \left[ \operatorname{arctg} \frac{x+u}{a} - \operatorname{arctg} \frac{\bar{x}-u}{a} \right] du. \quad (2)$$

И, наконец, третья модель рассеяния, представляющая интерес на практике соответствует атому с бесконечно узким нижним уровнем и уширенным верхним состоянием в среде. В этой модели из-за столкновений все возбужденные электроны случайным образом перераспределены по частотам возбужденного состояния до того, как произойдет его спонтанный распад. Для этой физической ситуации функция перераспределения, с учетом доплеровского перераспределения, имеет вид:

$$R_{III}(x', x) = \pi^{-5/2} \int_0^{\infty} \exp(-u^2) \left[ \operatorname{arctg} \frac{x'+u}{a} - \operatorname{arctg} \frac{x'-u}{a} \right] \times \\ \times \left[ \operatorname{arctg} \frac{x+u}{a} - \operatorname{arctg} \frac{x-u}{a} \right] du \quad (3)$$

В выражениях 2, 3  $\bar{x}$  максимальная, а  $x$  минимальная из частот  $x'$  и  $x$ . Функции  $R_I$ ,  $R_{II}$  и  $R_{III}$  отнормированы на единицу и удовлетворяют свойствам симметрии

$$R_i(-x', -x) = R_i(x', x), \quad R_i(x', x) = R_i(x, x'), \quad i = I, II, III.$$

Для функции  $R_I$  в системе отсчета атома не происходит никакого перераспределения. Данные условия не применимы к реальной линии, но этот предельный случай демонстрирует эффекты доплеровского перераспределения, которые видит покоящийся наблюдатель относительно лабораторной системы отсчета. Функция  $R_{II}$  описывает атом, для которого рассеяние фотонов в его собственной системе отсчета остается полностью когерентным. Функция перераспределения  $R_{III}$  предполагает, что за промежуток времени между поглощением и излучением фотона все электроны, из-за соударений, полностью перераспределены по подуровням верхнего состояния. Поэтому модель рассеяния  $R_{III}$  описывает процесс полного перераспределения фотонов в системе отсчета атома.

Чтобы получить случай полного перераспределения по частотам в лабораторной системе отсчета, нужно вместо функции  $R(x', x)$  использовать функцию  $R_{\text{пнч}}(x', x) = \Phi(x') \cdot \Phi(x)$ .

Отношение  $R(x', x)/\Phi(x')$  представляет собой вероятность излучения фотона на частоте  $x$  при условии, что поглощенный фотон имел частоту  $x'$  (в расчете на один акт поглощения).

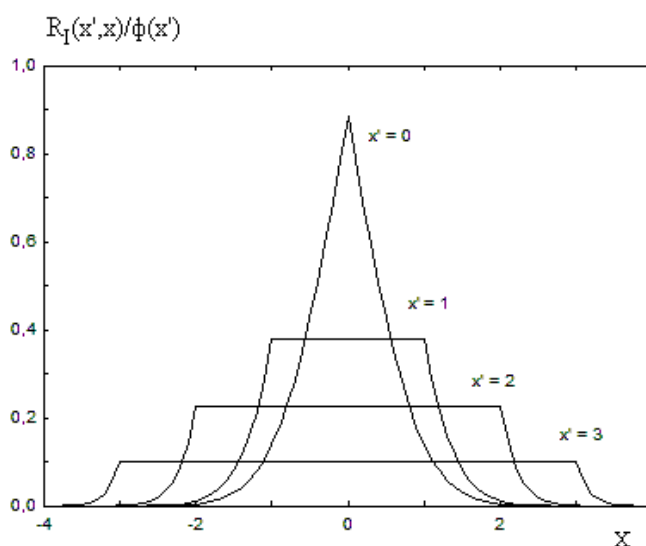


Рис.1. Вероятность излучения фотона с частотой  $x$  для функции  $R_I$ .

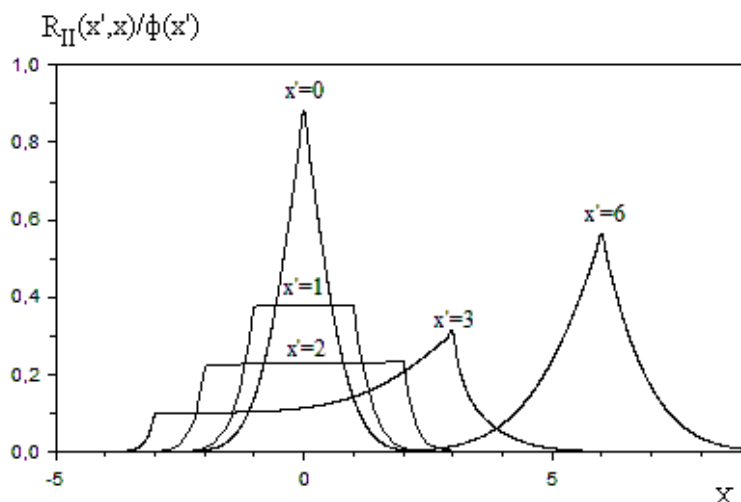


Рис.2. То же, что и на рис.1. только для функции  $R_{II}$  при  $a = 0.005$ .

Исследуем поведение графиков  $R_I(x', x)/\Phi(x')$ ,  $R_{II}(x', x)/\Phi(x')$  и  $R_{III}(x', x)/\Phi(x')$ , показанных на рис. 1, 2, 3. Функции  $R_I$ ,  $R_{II}$  и  $R_{III}$  рассчитаны путем численного интегрирования выражений (1 – 3) по методу Симпсона. Подписи к кривым указывают частоты поглощенных фотонов  $x'$ . По оси абсцисс отложена безразмерная частота  $X = (\nu - \nu_0)/\Delta\nu_d$ , по оси ординат вероятность излучения фотона на частоте  $x$  при условии, что поглощенный фотон имел частоту  $x'$ .

Для модели рассеяния  $R_I(x', x)$  (рис.1) фотон, поглощенный на частоте  $x'$ , для всех  $x$  из интервала  $-|x'| \leq x \leq |x'|$ , будет излучаться с одной и той же вероятностью.

Вне этого промежутка, из-за вида подынтегральной функции в формуле (1), вероятность излучения будет убывать экспоненциально с ростом  $x$ . Следовательно, атомы, поглощающие на частоте  $x'$  имеют в лабораторной системе в доплеровских единицах скорость не менее  $|x'|$ . Так как излучение во всех направлениях равновероятно, фотоны могут перераспределяться по всей области от  $-|x'|$  до  $|x'|$  с равной вероятностью.

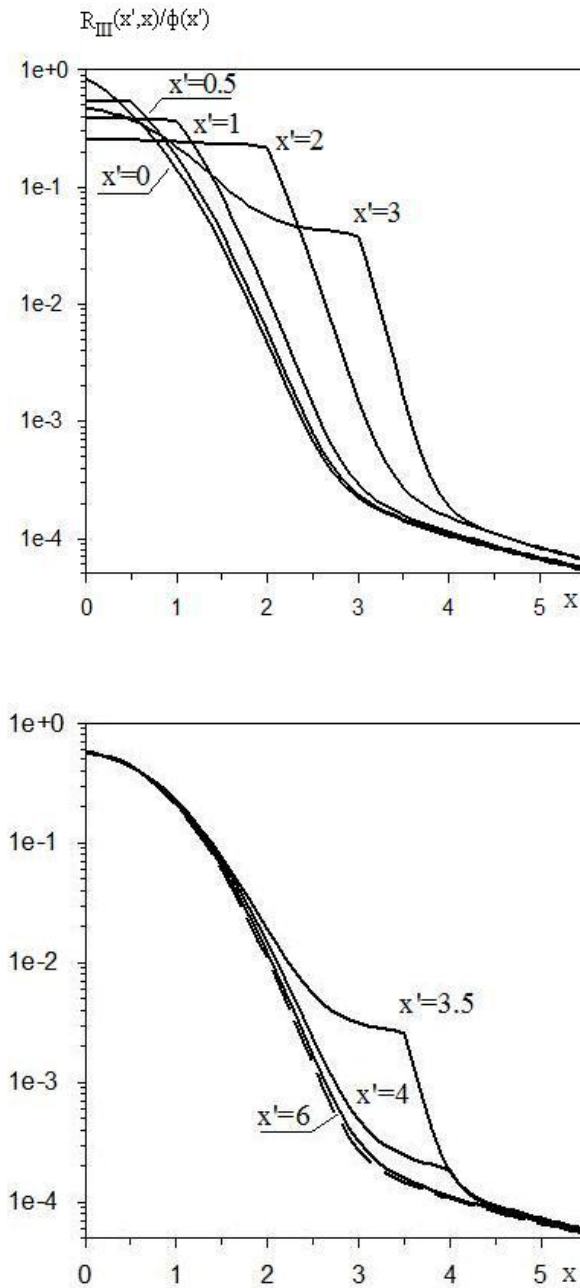


Рис.3. То же, что и на рис.2, только для функции  $R_{III}$  при  $a = 0.005$ . Пунктирная кривая даёт вероятность излучения при естественном возбуждении  $\Phi(\nu)$ . По оси ординат использован логарифмический масштаб.

Для модели рассеяния  $R_{II}(x', x)$  (рис.2) вероятность излучения максимальна при  $x$  близкой к  $x'$ . Для фотонов поглощенных на частотах  $x' \leq 3$  эти кривые напоми-

нают соответствующие кривые для  $R_I$ , так как количество актов излучения больше в ядре контура линии, поскольку здесь всегда больше количество атомов по сравнению с крылом линии. Если  $x' > 3$  эта вероятность резко уменьшается при удалении  $x$  от  $x'$ . Такое поведение графика  $R_{II}(x', x)/\Phi(x')$  является следствием полной когерентности процесса рассеяния в системе отсчета атома для функции  $R_{II}$ .

Для графика  $R_{III}(x', x)/\Phi(x')$  характерно то, что при поглощении фотонов с частотами  $x' \leq 3.5$  переизлученные фотоны попадают в частотный диапазон  $-x' < x < x'$  (функция  $R_{III}$  симметрична относительно оси ординат, рис.3). Для фотонов поглощенных на частотах  $x' > 4$  вероятность излучения близка к случаю полного перераспределения (пунктирная кривая рис.3).

Итак, анализ функций перераспределения фотонов по частотам для некоторых физических ситуаций дает значительное отклонение от случая полного частотного перераспределения. Этот факт необходимо принимать во внимание при моделировании процессов радиационного переноса в оптически плотных газо-плазменных средах.

#### Список литературы

1. Иванов В.В. Перенос излучения и спектры небесных тел. – М.: Наука. 1969.
2. Михалас Д. Звездные атмосферы. М.: Мир, Ч.1,2, 1982.
3. Косарев Н.И. Перенос излучения в искусственном бариевом облаке при его фотоионизации солнечным светом / Н.И. Косарев // Математическое моделирование. – 2006. – Т.18. – №12. С.67 – 87.
4. Косарев Н.И. Распространение широкополосного излучения в бариевом слое / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1991. – Т.4. – №11. С.1172 – 1178.
5. Косарев Н.И. Распространение солнечного излучения в искусственном бариевом облаке / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – Т.6. – №10. С.1298 – 1306.
6. Косарев Н.И. Поглощение лазерного излучения плотными парами натрия / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1995. – Т.8. – №12. С.1752 – 1756.
7. Косарев Н.И. Рассеяние солнечного света ионным бариевым облаком / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1999. – Т.12. – №1. С. 30–35.
8. Косарев Н.И. Компьютерное моделирование радиационных эффектов в бариевых облаках / Н.И. Косарев, Н.Я. Шапарев, И.М. Шкедов // В сборнике: Актуальные проблемы информатики, прикладной математики и механики. Ред. В.В. Шайдуров – Новосибирск–Красноярск. – 1996. – С.82 – 89.
9. Kosarev N.I. Numerical investigation of the escape factor of lithium and sodium vapour at partial frequency redistribution / N. I. Kosarev // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 2008. – Т. 41. – №22. С. 225401 – 1 – 225401 – 5.
10. Косарев Н.И. Формирование контура спектральной линии при частичном перераспределении по частотам / Н.И. Косарев // Оптика и спектроскопия. – 2007. – Т. 102. – №1. С. 13-19.
11. Косарев Н.И. Моделирование переноса излучения при неполном перераспределении по частотам / Н.И. Косарев // Математическое моделирование. – 2008. –Т. 20. – №3. С.87-98.
12. Kosarev N.I. Modeling of the radiation transfer under partial frequency redistribution / N.I. Kosarev // Mathematical Models and Computer Simulations. – 2009. – V. 1. – No2. P. 274-282.

# РАСЧЕТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ПАРАМИ НАТРИЯ ПРИ ЧАСТИЧНОМ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИИ ПО ЧАСТОТАМ

М.Н. Арасланова, Н.И. Косарев

Сибирский федеральный университет,  
Институт цветных металлов и материаловедения, кафедра фундаментального естественнонаучного образования, [kosarev\\_nikolai@mail.ru](mailto:kosarev_nikolai@mail.ru)

В работе представлены результаты численного исследования рассеяния лазерного излучения парами атомарного натрия на переходе с длиной волны  $\lambda = 589.6$  нм при использовании модели частичного перераспределения по частотам (ЧПЧ). Процесс переизлучения фотонов атомами моделировался усредненной по углам функцией перераспределения  $R_1$  [1].

Формирование спектральной линии при частичном перераспределении по частотам описывается функцией перераспределения  $R(v', \vec{n}'; v, \vec{n})$ .

Произведение  $R(v', \vec{n}'; v, \vec{n}) dv' dv (d\omega' / 4\pi) (d\omega / 4\pi)$  представляет собой совместную вероятность излучения фотона, имевшего в лабораторной системе отсчета частоту в интервале  $(v', v' + \Delta v')$  и двигавшегося внутри телесного угла  $d\omega'$  около направления  $\vec{n}'$ , в частотный интервал  $(v, v + \Delta v)$  и в телесный угол  $d\omega$  около направления  $\vec{n}$  [2 – 5].

Обозначим через  $N_1$  заселенность основного состояния. Возбужденное состояние атома разобьем на систему подуровней с заселенностями  $N_2(v)$ , которые соответствуют различным частотам. Эти заселенности  $N_2(v)$  определяют долю возбужденных атомов, которые при радиативном переходе в основное состояние излучают фотоны на частоте  $v$ . Через  $N_2$  обозначим полную заселенность верхнего состояния

$$N_2 = \int_0^\infty N_2(v) dv,$$

суммарную по всем подуровням. Далее вводим вспомогательную переменную  $n_2$  посредством соотношения

$$N_2(v) = n_2(v) \cdot \Phi(v), \quad (1)$$

где функция  $\Phi(v)$  дает частотное распределение атомов по подуровням возбужденного состояния. При естественном возбуждении  $\Phi(v)$  представляет собой контур линии поглощения [1]. Соотношение (1) позволяет из  $N_2(v)$  выделить явную зависимость заселенностей по подуровням верхнего состояния от частоты  $v$ , хотя  $n_2(v)$  будет зависеть от  $v$  неявно.

Теперь для заселенностей  $N_2(v)$  подуровней верхних состояний получим скоростное уравнение баланса

$$\frac{dN_2(v)}{dt} = -N_2(v) (A_{21} + B_{21}J_v) + N_1 B_{12} \int_0^\infty R(v', v) J_{v'} dv' \quad (2)$$

с начальным условием  $N_2(v)|_{t=0} = 0$ , соответствующим тому, что в момент времени  $t = 0$  атомов в возбужденном состоянии не было. Первое и второе слагаемые в правой части выражения (2) представляют собой соответственно скорости ухода атомов с  $v$ -го подуровня под действием спонтанного распада и вынужденного фототушения.

$J_{\nu'}$  и  $J_{\nu}$  - интегральные по углам на частоте  $\nu'$  и  $\nu$  интенсивности, формируемые в любой точке среды под действием всех источников фотонов. Последнее слагаемое в (2) определяет скорость прихода на  $\nu$ -тый подуровень с основного состояния, где  $R(\nu';\nu)$  - усредненная по углам функция перераспределения по частотам. Количество фотовозбуждений зависит от числа актов поглощения фотонов частоты  $\nu'$ , именно,  $N_1 B_{12} J_{\nu'}$ , которое нужно умножить на совместную вероятность  $R(\nu';\nu)$  поглощения на  $\nu'$  и излучения фотона на частоте  $\nu$ . Далее это произведение следует проинтегрировать по частотам  $\nu'$  всех поглощенных фотонов.

Скоростное уравнение баланса для заселенности основного состояния имеет вид

$$\frac{dN_1}{dt} = -N_1 B_{12} J + N_2 (A_{21} + B_{21} J) \quad (3)$$

Начальные условия для него запишем в виде  $N_1|_{t=0} = N_0$ , предполагая, что в начальный момент концентрация атомов в основном состоянии составляет  $N_0$ . В правой части (3) первое слагаемое представляет собой скорость ухода атомов из основного на все подуровни возбужденного состояния под действием излучения. Второе и третье отвечают, соответственно, за скорости прихода атомов с подуровней возбужденного состояния на основной уровень под действием процессов спонтанного распада и вынужденного фототушения.  $J_{\nu}$  и  $J$  в уравнениях (2), (3) определялись из выражений

$$J_{\nu} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin(\vartheta) I(\vec{r}, \vartheta, \varphi, \nu, t) d\vartheta, \quad J = \int_0^{\infty} \Phi_{\nu} J_{\nu} d\nu. \quad (4)$$

Здесь  $\Phi_{\nu}$  есть контур линии поглощения, а  $I(\vec{r}, \vartheta, \varphi, \nu, t)$  - интенсивность излучения в точке среды  $\vec{r}$ , в направлении, определяемом углами  $\vartheta$  и  $\varphi$  на частоте  $\nu$  в момент времени  $t$ . Зависимость интенсивности от пространственной и временной переменных определяет неявную зависимость от этих переменных и заселенностей  $N_1$ ,  $N_2$ . Их запись от переменных  $\vec{r}$  и  $t$  в уравнениях кинетики (2) и (3) была опущена для краткости.

Для стационарного уравнения переноса, учитывая (1), можем написать

$$\frac{dI}{ds} = (h\nu/4\pi) [-N_1 B_{12} \Phi_{\nu} I + n_2(\nu) \Phi_{\nu} (A_{21} + B_{21} I)],$$

из которого получаем

$$\frac{dI}{ds} = \chi_{\nu} [S_{\nu} - I], \quad (5)$$

где  $S_{\nu} = \eta_{\nu}/\chi_{\nu}$  - функция источников, а для коэффициента излучения  $\eta_{\nu}$  и поглощения  $\chi_{\nu}$  имеем

$$\eta_{\nu} = \frac{2h\nu^3}{c^2} \cdot \alpha_{12} \frac{g_1}{g_2} \cdot n_2(\nu) \Phi_{\nu}, \quad \chi_{\nu} = \alpha_{12} \left[ N_1 - \frac{g_1}{g_2} n_2(\nu) \right] \Phi_{\nu}, \quad (6)$$

где  $\alpha_{12} = B_{12} h\nu_0/(4\pi)$ , а  $g_1$  и  $g_2$  - статистические веса уровней 1 и 2.

Лазерное излучение имело симметричное распределение интенсивности в поперечном сечении и падало под прямым углом к левому торцу цилиндра, имеющего высоту  $H_0$  и радиус  $R_0$ . Поэтому граничное условие для (5) на левой границе ( $Z = -H_0/2$ ) для входящего излучения следующее

$$I(r(Z = -H_0/2), \theta, \varphi, \nu, t) = \begin{cases} 0, & \text{если } \theta \neq 0 \\ I_{\lambda}(\nu, t), & \text{если } \theta = 0 \end{cases} \quad (7a)$$

На правой границе цилиндра ( $Z = H_0/2$ ), предполагая отсутствие падающего излучения, имеем

$$I(r(Z = H_0/2), \theta, \varphi, \nu, t) = 0 \quad \text{для } \theta \geq 90^\circ, \quad (7b)$$

где переменная  $\theta$  представляет собой угол между направлением рассеянного фотона и осью симметрии цилиндра  $Z$ .

Частотно-временная форма лазерного импульса моделировалась выражением

$$I_{\lambda}(\nu, t) = I_0 \cdot \frac{(\Delta\nu_{\lambda}/2)^2}{(\nu - \nu_{\lambda})^2 + (\Delta\nu_{\lambda}/2)^2} \cdot (1 - \exp(-t)). \quad (8)$$

Здесь  $I_0$  – максимальная интенсивность импульса,  $\nu_{\lambda}$  – центральная частота лазерного излучения, которая настраивается в центр соответствующей линии атома, а  $\Delta\nu_{\lambda}$  – частотная ширина лазерного излучения, имеющего лоренцовскую зависимость от частоты. Форму контура линии поглощения  $\Phi_{\nu}$ , учитывающую совместное влияние лоренцовского и доплеровского механизмов уширения, описывалась функцией Фойгта  $H(a, x)$

$$\Phi(x) \equiv H(a, x) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2} dy}{(x + y)^2 + a^2}, \quad (9)$$

где введено обозначение  $x = \frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_D}$ , а параметр Фойгта  $a = \frac{\Delta\nu_L}{\Delta\nu_D}$  представляет собой отношение лоренцовской ширины  $\Delta\nu_L$  к доплеровской  $\Delta\nu_D$ . Лоренцовская ширина формируется радиационным и ударным механизмом уширения. Отметим, что модели полного перераспределения по частотам соответствует функция перераспределения  $R_{\text{ппч}}(x', x) = \Phi(x') \cdot \Phi(x)$ .

Численный метод решения задачи о переносе излучения при ЧПЧ подробно описан в работах [3, 4]. Формирование частотных зависимостей рассеянного излучения для усредненных по углам функции перераспределения  $R_{\text{II}}$  и  $R_{\text{III}}$  исследованы в работах [2, 5], а результаты моделирования докладывались на всероссийских и международных симпозиумах [6 – 8].

В представленной работе исследовано численно формирование контура линии излучения паров натрия на переходе с длиной волны  $\lambda = 589.6 \text{ нм}$  при использовании модели рассеяния  $R_I$ . Такая модель рассеяния фотонов атомами соответствует случаю полностью когерентного рассеяния в системе отсчета атома и функции перераспределения

$$R_I(x'; x) = \pi^{-1/2} \int_{u_{\min}}^{\infty} \exp(-u^2) du, \quad (10)$$

где  $u'_{\min} = \max(|x'|, |x|)$ , а  $x', x$  частоты поглощенного и излученного фотонов в относительных единицах.

В численной модели использованы следующие параметры. Пары натрия имели цилиндрическую геометрию с отношением  $H_0/2R_0 = 1$ , концентрация атомов натрия  $N_0 = 1,05 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ , для которой оптическая толщина на центральной частоте резонансного перехода  $\tau_0 = 20$ ,  $I_0 = 5 \text{ Вт} / \text{см}^2$ . Рассматривался момент времени воздействия

лазерным излучением  $t = 100$  нс. К этому времени в среде сформировалось стационарное распределение населенностей основного и возбужденного состояний, так же как и распределение частотного спектра эмиссионного излучения. На это указывает вид зависимости лазерного излучения от времени, (последнее слагаемое в выражение (8)), из которого следует, что за малое время на стационарное значение выходит интенсивность лазерного излучения и все параметры среды.

На рисунке 1 показаны частотные зависимости контура линии излучения, рассеянного парами натрия в направлении противоположном лазерному излучению а) и по направлению его распространения б).

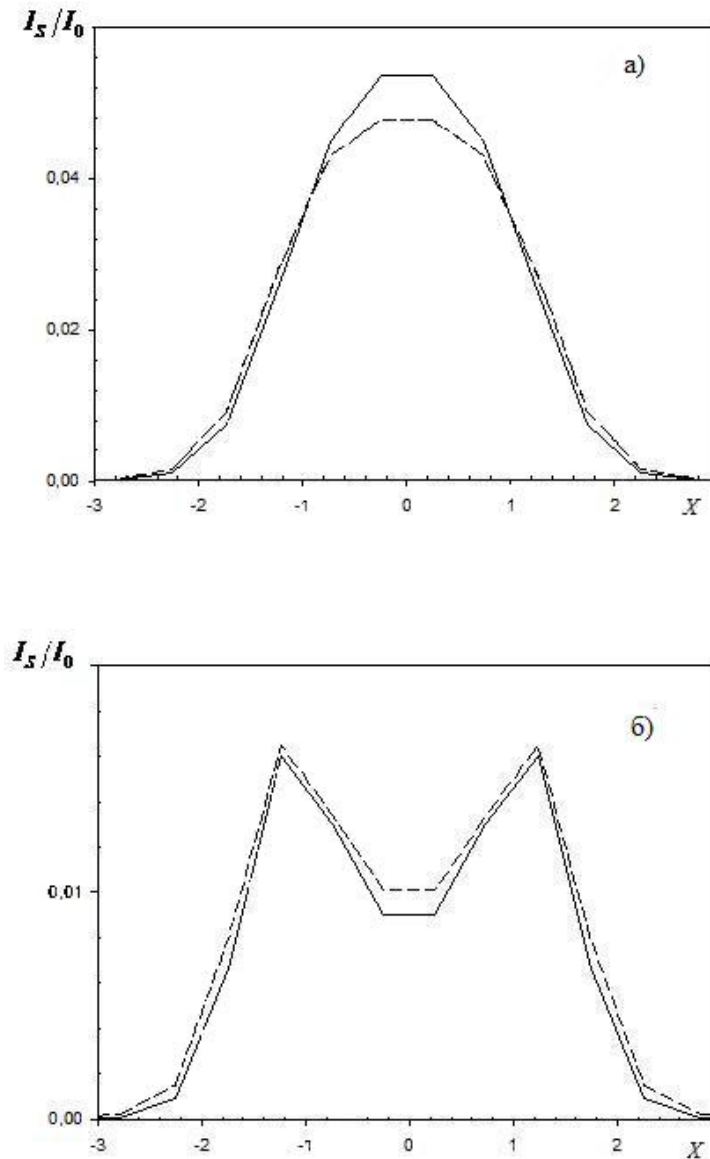


Рис.1 Частотное распределение рассеянного парами натрия излучения в направлении противоположном лазерному а) и по направлению лазерного излучения б). Лучевая трасса проходит по оси симметрии цилиндра. По оси абсцисс отложена безразмерная частота  $X = (\nu - \nu_0)/\Delta\nu_D$  в доплеровских ширинах  $\Delta\nu_D$ .

Вид частотных зависимостей указывает на то, что основное отличие контура линии в модели ЧПЧ (сплошные кривые) от полного частотного перераспределения (пунктирные кривые) происходит в ядре доплеровского контура. Этот факт вызван видом функции перераспределения  $R_1$ , которая для частоты излученного фотона  $x$ , при поглощении фотона на частоте  $x'$ , дает одну и ту же вероятность, при всех таких  $x$ , для которых  $-|x'| \leq x \leq |x'|$ , рис.2. На этом рисунке показано отношение  $R_1(x', x)/\Phi(x')$ , представляющее собой вероятность излучения фотона на частоте  $x$  при условии, что поглощенный фотон имел частоту  $x'$  (в расчете на один акт поглощения). Графики, представленные на рис.2 получены путем численного вычисления интеграла (10) методом Симпсона.

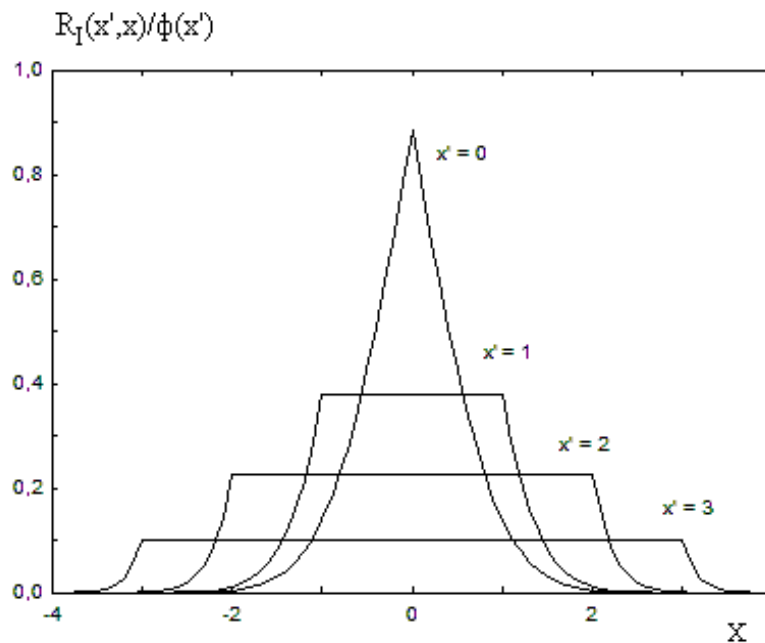


Рис.2. Вероятность излучения фотона с частотой  $x$ , при поглощении фотона на частоте  $x'$  для функции перераспределения  $R_1$ . По оси абсцисс отложена безразмерная частота  $X = (\nu - \nu_0) / \Delta \nu_D$  в доплеровских ширинах  $\Delta \nu_D$ .

Следует отметить еще тот факт, что контур линии для излучения рассеянного с теневой стороны среды, по направлению лазерного излучения, имеет провал на центральных частотах линии, рис.1 б). Это явление реабсорбции частотного контура в плотных средах достаточно хорошо исследовано авторами [9 – 14]. Как показано в вышеупомянутых работах, выход излучения из среды по лучевым направлениям, соответствующим теневой её границе является более затрудненным по отношению к другим направлениям рассеяния. Это вызвано тем фактом, что такие направления рассеяния сопровождаются увеличением коэффициента поглощения, максимальное значение которого достигается на центральных частотах контура линии, выражение (9). Контур спектральной линии в направлении рассеяния противоположном лазерному не имеет реабсорбции, рис.1 а) потому, что такие трассы сопровождаются уменьшением коэффициента поглощения, а выход фотонов из среды в таких направлениях является более облегченным.

В заключении отметим, что эффекты ЧПЧ необходимо принимать во внимание при интерпретации экспериментальных спектроскопических данных по свечению оптически плотных газо–плазменных сред.

#### Список литературы

1. Михалас Д. Звездные атмосферы. М.: Мир, Ч.1,2, 1982.
2. Косарев Н.И. Формирование контура спектральной линии при частичном перераспределении по частотам / Н.И. Косарев // Оптика и спектроскопия. – 2007. – Т.102. – №1. С.13-19.
3. Косарев Н.И. Моделирование переноса излучения при неполном перераспределении по частотам / Н.И. Косарев // Математическое моделирование. – 2008. –Т.20. – №3. С.87-98.
4. Kosarev N.I. Modeling of the radiation transfer under partial frequency redistribution / N.I. Kosarev // Mathematical Models and Computer Simulations. – 2009. – V. 1. – No2. P.274-282.
5. Kosarev N.I. Numerical investigation of the escape factor of lithium and sodium vapour at partial frequency redistribution / N. I. Kosarev // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 2008. – Т.41. – №22. С.225401 – 1 – 225401 – 5.
6. Косарев Н.И. Моделирование рассеяния лазерного излучения атомами натрия при частичном перераспределении по частотам / Н. И. Косарев, И.М. Шкедов // В книге: Моделирование неравновесных систем – 2002. Материалы V Всероссийского семинара. Институт вычислительного моделирования РАН. – 2002. С.191 – 192.
7. Косарев Н.И. Частичное перераспределение по частотам в процессе возбуждения атомов натрия лазерным импульсом / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // В сборнике: Математические модели и методы их исследования. Труды международной конференции. Под редакцией В.К. Андреева и Ю.В. Шанько. – 2001. С.28 – 34.
8. Косарев Н.И. Лазерно-индуцированное возбуждение атомов натрия при неполном частотном перераспределении / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // В книге: Моделирование неравновесных систем – 2001. Материалы IV Всероссийского семинара. Под общей редакцией А.Н. Горбаня. – 2001. С.74 – 75.
9. Косарев Н.И. Перенос излучения в искусственном бариевом облаке при его фотоионизации солнечным светом / Н.И. Косарев // Математическое моделирование. – 2006. – Т.18. – №12. С.67 – 87.
10. Косарев Н.И. Распространение широкополосного излучения в бариевом слое / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1991. – Т.4. – №11. С.1172 – 1178.
11. Косарев Н.И. Распространение солнечного излучения в искусственном бариевом облаке / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – Т.6. – №10. С.1298 –1306.
12. Косарев Н.И. Поглощение лазерного излучения плотными парами натрия / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1995. – Т.8. – №12. С.1752 – 1756.
13. Косарев Н.И. Рассеяние солнечного света ионным бариевым облаком / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1999. – Т.12. – №1. С.30–35.
14. Косарев Н.И. Компьютерное моделирование радиационных эффектов в бариевых облаках / Н.И. Косарев, Н.Я. Шапарев, И.М. Шкедов // В сборнике: Актуальные проблемы информатики, прикладной математики и механики. Ред. В.В. Шайдуров – Новосибирск–Красноярск. – 1996. – С.82 – 89.

# ДИАГРАММЫ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ИЗИНГА ДЛЯ АДСОРБЦИИ НА НАНОКЛАСТЕРАХ

Базуев В.М., Удодов В.Н., Таскин А.Н.

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, институт  
естественных наук и математики, каф. физики и информационных технологий,  
*bazuev.vasilij@yandex.ru*

## Введение

В последнее время в связи с разработкой технологий получения новых материалов с особыми функциональными свойствами много внимания уделяется изучению различных адсорбционных процессов [1-5]. Обычно адсорбция идет на поверхности, но иногда наблюдается одномерная адсорбция. В частности, особое внимание привлекает вопрос о том, как распределяются фазы при адсорбции на атомных цепочках [1]. Данная статья посвящена исследованию адсорбции на атомной цепочке конечного размера при низких температурах в рамках обобщенной модели Изинга. Рассчитаны диаграммы основных состояний (ДОС) – диаграммы стабильности фаз в пространстве энергетических параметров при температуре абсолютного нуля [5]. Это дает возможность определить возможные адсорбционные превращения и фазы при достаточно низких температурах.

## Результаты

С помощью языка программирования Delphi разработана одномерная модель решеточного газа на основе обобщенной модели Изинга [1-3]. Под моделью Изинга понимается жесткая решетка, на узлах которой располагаются объекты двух типов. В рамках данной модели рассматривается адсорбция на атомной цепочке конечного размера. В качестве граничных условий использованы «оборванные концы» атомной цепочки [2], что моделирует адсорбцию на реальной цепочке со свободными концами.

В основу модели легла формула безразмерной энергии [2, 5]:

$$e = \frac{E}{J} = -\frac{h}{J} \sum_{i=1}^N \sigma_i - \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} \sigma_i \sigma_{i+2},$$

где  $e$  – безразмерная энергия модели;  $E$  – энергия системы;  $J_1 = J$  – энергия взаимодействия ближайших соседей;  $J_2$  – энергия взаимодействия вторых соседей;  $h$  – безразмерная напряженность внешнего поля;  $\sigma_i$  – числа заполнения узлов (0 или 1);  $N$  – количество узлов. Число заполнения узла  $\sigma_i = 0$  соответствует пустому узлу.  $\sigma_i = +1$  соответствует заполненному узлу в рамках одномерной модели решеточного газа.

Результатом моделирования адсорбции явились ДОС с учетом взаимодействия ближайших и вторых соседей, а также внешнего поля. Построены диаграммы для цепочек с длиной  $N$  от 4 до 8 узлов.

Далее представлены диаграммы основных состояний при учете только взаимодействия ближайших соседей при  $N = 5$  и при  $N = 6$  (Рис.1).

На диаграммах по горизонтали отложена величина безразмерной напряженности внешнего поля  $h$ , а по вертикали – энергия взаимодействия ближайших соседей  $J$ . Каждая область диаграммы (фаза) отмечена определенным цветом с указанием собственной конфигурации (фазы).

На примере представленных ДОС опишем, как следует трактовать конфигурацию нулей и единиц, приписанной каждой фазе. В фазе, где все нули, отсутствуют адатомы («пустая» фаза, фаза 0), например, 00000 на диаграмме слева. Конфигурация «11111» указывает, что все узлы заполнены адатомами (заполненная фаза, фаза 1). В

фазе «10101» адатомы разделены одним пустым узлом (упорядоченная фаза, фаза 10); «101011» на диаграмме справа – упорядоченная фаза с дефектом. Обратим внимание, что дефектная фаза существует только при ненулевом поле.

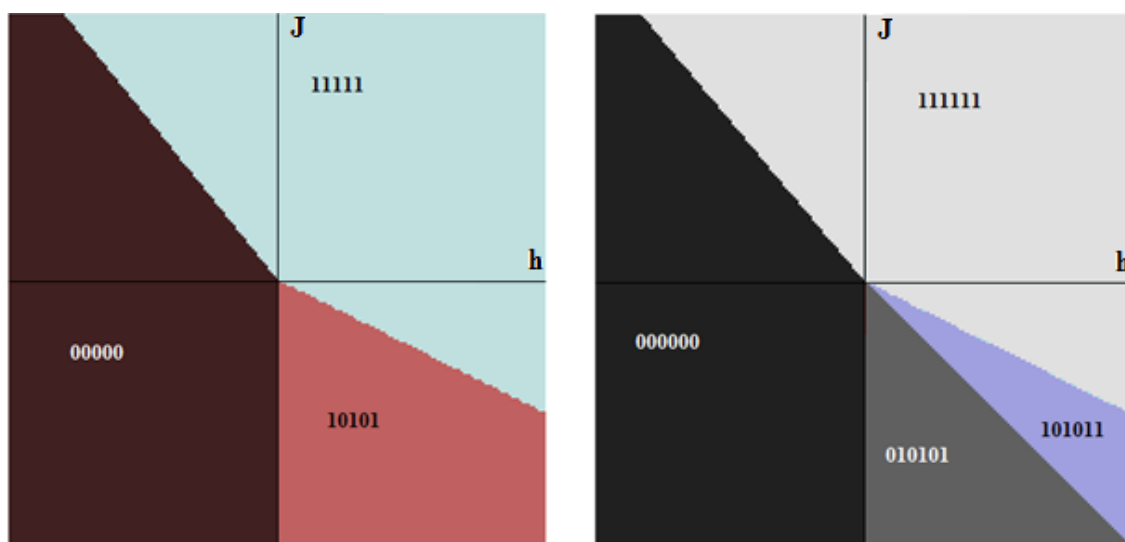


Рис.1. Диаграммы основных состояний при учете взаимодействия ближайших соседей (слева ДОС при  $N = 5$ , справа ДОС при  $N = 6$ ).

При изменении поля происходят превращения: (фаза 0)→(фаза 1), (фаза 0)→(фаза 10)→(фаза 1); (фаза 0)→(фаза 10)→(дефектная фаза)→(фаза 1).

#### Обсуждение

В ДОС при учете взаимодействия ближайших соседей наблюдается постоянное количество фаз при четном  $N$  (их всегда 3) и при нечетном  $N$  (их всегда 4).

Совершенно другая картина наблюдается в ДОС при учете взаимодействия ближайших и вторых соседей, если  $J < 0$  (т.е., когда находятся максимум безразмерной энергии модели); эти ДОС представлены на Рис.2

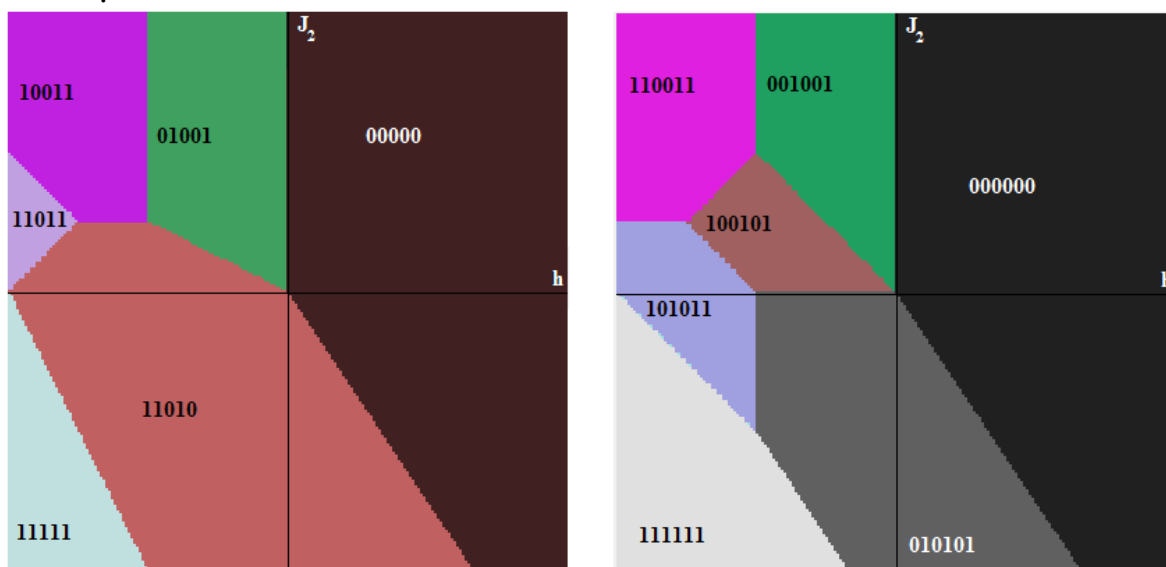


Рис.2. . ДОС при учете взаимодействия ближайших и вторых соседей, если  $J < 0$  (слева ДОС при  $N = 5$ , справа ДОС при  $N = 6$ )

В отличие от предыдущих ДОС в данном случае наблюдается наибольшее количество фаз при одних и тех же  $N$ : при  $N=5$  их 6, а при  $N=6$  наблюдается 7 фаз. Фазы с одинаковыми конфигурациями, где адатомы отсутствуют и где все узлы заполнены адатомами, имеют отличное от ранее представленных ДОС расположение: фаза без адатомов (фаза 0) располагается теперь в верхней правой части диаграммы, а фазы, полностью заполненные адатомами (фаза 1) – в нижней левой части диаграммы. На диаграмме справа (Рис.2) наблюдаются две дефектные фазы, причем обе они стабильны только при ненулевом внешнем поле.

При положительной энергии взаимодействия ближайших соседей всегда возможен непосредственный переход из фазы 0 в фазу 1. При  $J < 0$  такой переход невозможен: превращение «фаза 0 → фаза 1» происходит только через промежуточные фазы. При увеличении параметра  $h$  возможно и более сложное превращение: фаза 1 → фаза с дефектом → фаза 10 → фаза 0.

Изменение химического состава подложки может соответствовать изменению энергетического параметра взаимодействия вторых соседей  $J_2$ , что приводит к новым типам превращений. Например, если двигаться снизу вверх на диаграмме справа (Рис.2), то происходят превращения (ФП): фаза 1 → фаза 10 → (фаза 100101) → (фаза 001001).

К сожалению, пока разработанной номенклатуры одномерных фаз при адсорбции не существует. Видимо, экспериментально такие фазы еще не наблюдались. Однако бурный прогресс экспериментальной техники в области нанотехнологий дает надежду, на то, что одномерные адсорбционные фазы будут доступны эксперименту в сравнительно близком будущем.

### **Заключение**

Построены диаграммы основных состояний (ДОС) для цепочек размера  $N$  от 4 до 8 узлов при учете взаимодействия ближайших соседей и ДОС для тех же значений  $N$  при учете взаимодействия ближайших и вторых соседей. Дано описание и анализ представленных ДОС. Таким образом, перечислены все возможные фазы и превращения при адсорбции на атомной цепочке конечной длины в нанометровом диапазоне при учете взаимодействия первых и вторых соседей. Результаты можно сопоставить с экспериментом при достаточно низких температурах. В рамках развитого подхода возможен учет и более сложного взаимодействия и граничных условий других видов.

Дан анализ возможных адсорбционных фаз при наличии внешнего поля. Ряд дефектных и идеальных фаз существуют (при низких температурах) только при ненулевом поле.

На основе построенных ДОС проанализированы возможные адсорбционные превращения при изменении внешнего поля и концентрации компонент подложки. Изменение концентрации компонент (химического состава) подложки соответствует изменению энергетических параметров  $J$  и  $J_2$ , что приводит к новым сериям превращений, которые получаются при «движении» по ДОС снизу вверх или сверху вниз.

### **Список литературы**

1. Грег С. Адсорбция, удельная поверхность, пористость; пер. с англ./ С. Грег, К Синг. — М.: Мир, 1984. — 306 с.
2. Удодов В.Н. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах / В.Н. Удодов, А.И. Потекаев, А.А. Попов и др.; — Абакан: Издательство Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова, 2008. — 135 с.
3. Тимофеев Д.П. Кинетика адсорбции/ Д.П. Тимофеев — М.: Изд. Академии наук, 1962 — 250 с..
4. Ландау Л.Д. Статистическая физика./ Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — М.: Наука, 1976. — 584 с.
5. Попов, А.А. Влияние размеров модели, дальнего и многочисленного взаимодействия на диаграммы основных состояний для систем с политипными переходами / А.А. Попов, В.Н. Удодов, А.И. Потекаев // Известия вузов. Физика. – Томск, 1998. – С. 37.
6. Гегузин Я.Е. Физика спекания / Я.Е. Гегузин. — 2-е изд., перераб. и доп. — М.: Наука, 1984. — 311 с.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ ПРОТОНАМИ

Н.М. Богатов, М.С. Коваленко

Кубанский государственный университет, [bogatov@phys.kubsu.ru](mailto:bogatov@phys.kubsu.ru)

## Введение

Кремниевые электронные приборы используются в условиях повышенного воздействия ионизирующих излучений. Образование радиационных дефектов влияет на физику и параметры данных приборов и является одной из причин деградации параметров кремния в этих условиях [1].

Радиационные дефекты в кремнии обладают электрической и рекомбинационной активностью. Увеличение их концентрации изменяет концентрацию и время жизни электронов и дырок, поэтому изменяются электрические характеристики  $n$ - $p$  переходов в процессе работы устройства. Изучение процесса формирования радиационных дефектов является актуальной проблемой физики и техники полупроводников [2, 3].

Цель работы – анализ влияния температуры на образование первичных радиационных дефектов в кремнии, облученном низкоэнергетическими протонами.

## Модель образования пар Френкеля

Радиационный дефект – дефект, образовавшийся в материале в результате воздействия на него ионизирующими частицами. В зависимости от механизма образования выделяют простые, первичные и вторичные радиационные дефекты [4, 5]. Пары Френкеля образуются как простой дефект при взаимодействии ионизирующего излучения с кристаллической решёткой кремния. При этом формируются связанные или разделённые пары Френкеля, состоящие из вакансии  $V$  и междоузельного кремния  $Si_i$ .

Сформулируем модель, описывающую процесс радиационного образования и разделения пар Френкеля в кремнии с учетом температуры.

Налетающая частица передаёт атому кремния кинетическую энергию. Чтобы выйти из узельного положения, атом кремния должен преодолеть потенциальный барьер  $T_d$ .

В зависимости от энергии, переданной частицей атому кремния, может образоваться связанная либо разделённая пара Френкеля. Пороговая энергия формирования связанной пары Френкеля составляет  $T_d = 12,9$  эВ, а разделённой  $T_{dm} = 21$  эВ [4, 5].

Связанная пара Френкеля образуется, если при столкновении с налетающей частицей атому  $Si$ , находящемуся в узле кристаллической решетки, передана энергия  $T_d < T_k < T_{dm}$ .

Объемная скорость генерации пар Френкеля [5]

$$G_\phi = N_0 \Phi \int_{T_d}^{T_{dm}} \frac{d\sigma_d}{dT_k} dT_k, \quad (1)$$

где  $N_0$  – концентрация атомов кремния в решетке кристалла,  $\Phi(E)$  – поток частиц с энергией  $E$ , проникающих в твёрдое тело,  $d\sigma_d(E, T_k)$  – дифференциальное сечение рассеяния, характеризующее вероятность передачи узловому атому энергии  $T_k$  от налетающей частицы с энергией  $E$ .

Связанные пары Френкеля могут существовать только при гелиевых температурах [6]. При повышении температуры смещённый атом кремния  $Si_i$  либо возвращается в узельное положение, преодолев энергетический барьер  $E_R$ , и пара аннигилирует, либо преодолевает энергетический барьер  $E_L$ , и образуется разделённая пара Френкеля.

Разделение связанной пары Френкеля описывается различными моделями метастабильных пар [5 – 7]. Различают нейтральные и заряженные связанные пары Френкеля. Вероятность заряженного состояния связанной пары Френкеля описывается формулой

$$\omega_1 = \left[ 1 + g_1 \exp \left\{ \frac{F - E_f}{kT} \right\} \right]^{-1}, \quad (2)$$

где  $F$  – уровень Ферми,  $g_1 = 0,5$ ,  $E_f$  – положение энергетического уровня пары Френкеля в запрещённой зоне кремния,  $E_f = E_c - 0,07$  эВ [6],  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура. Форма потенциального барьера заряженной пары Френкеля изменяется так, что она разделяется с вероятностью 1.

Вероятность разделения нейтральной пары описывается формулой

$$\omega_2 = \left[ 1 + \exp \left\{ -\frac{E_R - E_L}{kT} \right\} \right]^{-1}. \quad (3)$$

Вероятность разделения связанной пары Френкеля с учётом зарядового состояния дефекта определяется величиной  $\omega_f$ :

$$\omega_f = \omega_1 \omega_c + (1 - \omega_1 \omega_c) \omega_2, \quad (4)$$

где  $\omega_c$  – дополнительный параметр, характеризующий вероятность смещения атома кремния в пространственное положение, допускающее заряженное состояние,  $\omega_c = 0.00887$  [8],  $\omega_{fc} = \omega_1 \omega_c$  – вероятность того, что атом кремния, смещённый в междоузельное положение, заряжен (заряженная пара Френкеля разделяется), а  $\omega_{fn} = (1 - \omega_1 \omega_c) \omega_2$  – вероятность разделения связанной пары Френкеля, находящейся в нейтральном зарядовом состоянии.

Расчеты показывают, что в температурном диапазоне [250 К; 607 К] основной вклад в вероятность разделения связанных пар Френкеля вносят заряженные пары, а вклад нейтральных пар пренебрежимо мал.

Разделённая пара Френкеля формируется, если атом кремния, находящийся в узле кристаллической решётки, получает энергию  $T_k \geq T_{dm}$ . Форма потенциального барьера после образования разделённой пары Френкеля изменяется. В результате формирования разделённой пары Френкеля высота энергетического барьера обратного перехода уменьшается, а атом междоузельного кремния находится в пределах сферы реакции радиусом  $r_{iv}$ . Атом  $Si_I$  либо мигрирует от генетически связанной с ним вакансии за счёт активационного механизма миграции, либо аннигилирует с данной вакансией.

Для аннигиляции разделённой пары Френкеля междоузельному атому кремния требуется преодолеть барьер обратного перехода  $E^{iv}$ , высота которого зависит от состояния аннигилирующей пары. Согласно теории примесных реакций, реакции, для которых энергия активации диффузии  $E_m^i$  меньше барьера обратного перехода  $E^{iv}$ , называются барьерно-контролируемыми. Реакции, для которых  $E_m^i$  больше энергии обратного перехода  $E^{iv}$ , называются диффузионно-контролируемыми [7].

С учётом формы потенциального барьера, вероятность избежать аннигиляции для нейтральной разделённой пары Френкеля описывается следующим равенством [7, 9]

$$\omega_3 = \left[ 1 + \exp \left\{ -\frac{E^{iv} - E_m^i}{kT} \right\} \right]^{-1}, \quad (5)$$

где  $E^{iv}$  – энергия барьера обратного перехода,  $E_m^i$  – энергия активации миграции междоузельного кремния ( $E^{iv} = 0$ ,  $E_m^i = 0,13$  эВ согласно [10]).

Величина  $\omega_d$ , характеризующая вероятность избежать аннигиляции  $\text{Si}_i$  с генетически связанной  $V$ , определяется следующим образом. Считаем, что заряженное состояние метастабильной пары  $V$  и  $\text{Si}_i$  образуется в одном из шести симметричных направлений относительно вакансии (например, 3 оси  $S_4$  группы симметрии тетраэдра  $T_d$ ). Тогда

$$\omega_d = 6\omega_1\omega_c + (1 - 6\omega_1\omega_c)\omega_3, \quad (6)$$

где  $\omega_{dc} = 6\omega_1\omega_c$  – вероятность избежать аннигиляции паре  $\text{Si}_i$ ,  $V$ , находящейся в заряженном состоянии,  $\omega_{dn} = (1 - 6\omega_1\omega_c)\omega_3$  – вероятность избежать аннигиляции паре  $\text{Si}_i$ ,  $V$ , находящейся в нейтральном зарядовом состоянии.

Расчеты в диапазоне температур [250 К; 607 К] показывают, что вероятность избежать аннигиляции  $\omega_d$  для разделённых пар Френкеля мало зависит от температуры, если уровень Ферми расположен близко или ниже середины запрещенной зоны, в противном случае этой зависимостью пренебречь нельзя. При снижении положения уровня Ферми или увеличении температуры наблюдается рост вероятности  $\omega_d$ . Для нейтральной пары Френкеля вероятность  $\omega_{dn}$  практически не зависит от положения уровня Ферми.

Для каждого значения положения уровня Ферми  $F_i$  существует значение температуры  $T_i$  такое, что если  $T > T_i$ , преобладает распад нейтральных пар Френкеля для соответствующего положения уровня Ферми, а при  $T < T_i$  – заряженных. Чем ниже положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости, тем выше температура  $T_i$ , при которой вероятности распада нейтральных и заряженных разделённых пар Френкеля равны.

#### **Расчет распределения первичных радиационных дефектов, созданных в кремнии низкоэнергетическими протонами**

Найденные закономерности зависимости вероятности разделения пар Френкеля от положения уровня Ферми и температуры использованы в модели [11] для определения влияния температуры облучения и концентрации доноров на образование первичных радиационных дефектов (ПРД). На рис. 1 показано рассчитанное распределение по глубине среднего числа ПРД:  $G_{\text{Si}}$  – междоузельного кремния,  $G_V$  – вакансий, созданных на единице длины проективного пробега одним протоном с  $E_p = 40$  кэВ в кремнии при температуре 300 К, а на рис. 2 – при температуре 83 К.

При  $T = 300$  К (рис. 1) существует резкий максимум распределения междоузельного кремния и вакансий при  $x \approx 390$  нм. Значения  $G_{\text{Si}}$ ,  $G_V$  в максимуме практически не изменяются с увеличением концентрации фосфора вплоть до  $N_D = 10^{17} \text{ см}^{-3}$  и убывают при  $N_D > 10^{17} \text{ см}^{-3}$ .

При  $T = 83$  К (рис. 2) абсолютный максимум при  $x \approx 390$  нм существует только для  $N_D \leq 10^{15} \text{ см}^{-3}$ , с увеличением  $N_D$  значения  $G_{\text{Si}}$ ,  $G_V$  в максимуме убывают, так что при  $N_D > 10^{17} \text{ см}^{-3}$  максимум при  $x \approx 390$  нм исчезает, следовательно, исчезает область наибольшего повреждения материала.

Таким образом, облучение низкоэнергетическими протонами кремния  $n$ -типа проводимости при температуре  $T = 83$  К позволяет существенно снизить дефектность материала и уменьшить степень повреждения  $n$ - $p$ -перехода.

В кремнии  $n$ -типа с концентрацией доноров  $N_D < 10^{15} \text{ см}^{-3}$ , собственном, а также  $p$ -типа проводимости температура облучения в широком диапазоне значений не влияет на вероятность образования ПРД. В общем случае зависимостью концентрации первичных радиационных дефектов от температуры облучения пренебречь нельзя.

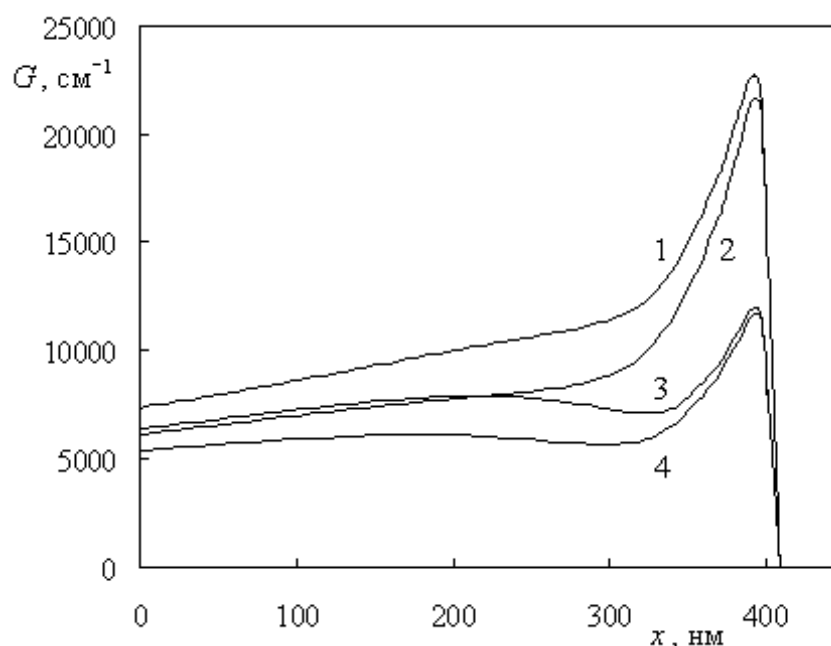


Рис. 1. Распределение ПРД, созданных на единице длины проективного пробега одним протоном с  $E_p = 40$  кэВ при  $T = 300$  К в кремнии с различной концентрацией фосфора  $N_D$ : 1 –  $G_{Si}$ , 2 –  $G_V$  при  $N_D = 10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ; 3 –  $G_{Si}$ , 4 –  $G_V$  при  $N_D = 10^{19} \text{ см}^{-3}$

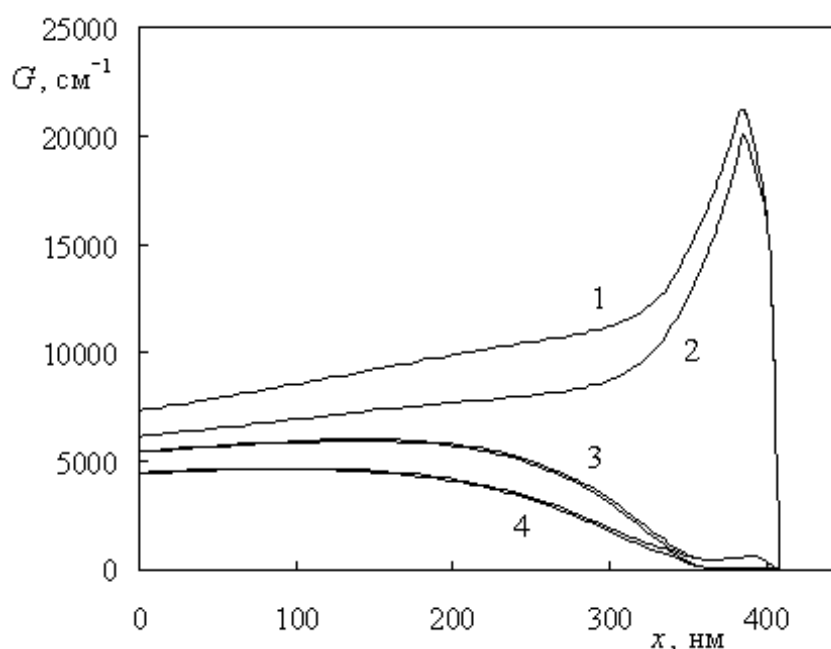


Рис. 2. Распределение ПРД, созданных на единице длины проективного пробега одним протоном с  $E_p = 40$  кэВ при  $T = 83$  К в кремнии с различной концентрацией фосфора  $N_D$ : 1 –  $G_{Si}$ , 2 –  $G_V$  при  $N_D = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ; 3 –  $G_{Si}$ , 4 –  $G_V$  при  $N_D = 10^{17} \div 10^{19} \text{ см}^{-3}$

### Закключение

Предложены формулы вероятности разделения пар Френкеля с учетом нейтрального и заряженного состояния пары. Нейтральные пары дают пренебрежимо малый вклад в вероятность разделения связанных пар Френкеля, в сравнении с заряженными парами. Рассчитана зависимость вероятности разделения от температуры и

положения уровня Ферми в запрещенной зоне. Показано, что вероятность разделения пар Френкеля возрастает при снижении положения уровня Ферми, а также увеличении температуры.

Вероятность разделения нейтральной пары Френкеля не зависит от положения уровня Ферми. Температура  $T_i$ , при которой вероятности избежать аннигиляции для нейтрального и заряженного состояния разделенной пары Френкеля равны, зависит от положения уровня Ферми  $F_i$  в запрещенной зоне. При  $T > T_i$  преобладает вероятность избежать аннигиляции для разделенной пары Френкеля в нейтральном состоянии, а при  $T < T_i$  – в заряженном. Функция  $T_i(E_c - F_i)$  возрастает от  $T_{min} = 296,1$  К при  $F = E_c$  и выходит на постоянное значение  $T_{max} = 533,7$  К при  $E_c - F > 0,15$  эВ.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о более высокой радиационной стойкости кремниевых структур с поверхностным  $n^+p$  переходом по сравнению со структурами с  $p^+n$  переходом при облучении низкоэнергетическими протонами.

#### Список литературы

1. Iles P.A. Evolution of space solar cells / P.A. Iles // Solar Energy Materials & Solar Cells. — 2001. — V.68. — I.1. P.1 – 13.
2. Kozlovski V.V. Effect of the energy of recoil atoms on conductivity compensation in moderately doped n-Si and n-SiC under irradiation with MeV electrons and protons / V.V. Kozlovski, A.A. Lebedev, V.V. Emtsev, G.A. Oganessian // Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2016. — V.384, 1. P. 100 – 105.
3. Kozlovski V.V. Effect of Recoil Atoms on Radiation-Defect Formation in Semiconductors under 1-10-MeV Proton Irradiation / V.V. Kozlovski, A.E. Vasil'ev, A.A. Lebedev // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. — 2016. — V.10. — I.4. P. 693 – 697.
4. Вавилов В.С. Дефекты в кремнии и на его поверхности / В.С. Вавилов, В.Ф. Киселев, Б.Н. Мукашев. — М: Наука, 1990. — 216 с.
5. Кузнецов Н.В. Радиационная стойкость кремния / Н.В. Кузнецов, Г.Г. Соловьев. — М: Энергоатомиздат, 1989. — 96 с.
6. Емцев В.В. Примеси и точечные дефекты в полупроводниках / В.В. Емцев, Т.В. Машовец. — М.: Радио и связь. 1981. — 248 с.
7. Бургуэн Ж. Точечные дефекты в полупроводниках. Экспериментальные аспекты / Ж. Бургуэн, М. Ланно. — М.: Мир, 1985. — 304 с.
8. Богатов Н.М. Моделирование разделения пар Френкеля, образовавшихся в кремнии в результате облучения потоком ионизирующих частиц / Н.М. Богатов, М.С. Коваленко // Коллективная монография. Современные проблемы физики, биофизики и инфокоммуникационных технологий. — Краснодар: Краснодарский ЦНТИ, 2012. — С. 233 – 240.
9. Бургуэн Ж. Точечные дефекты в полупроводниках. Теория / Ж. Бургуэн, М. Ланно. — М.: Мир, 1984. — 264 с.
10. Ершов С.Н., Пантелеев В.А., Нагорных С.Н., Черняховский В.В. Энергия миграции собственных точечных дефектов в различном зарядовом состоянии в кремнии и германии / С.Н. Ершов, В.А. Пантелеев, С.Н. Нагорных, В.В. Черняховский // Физика твёрдого тела. — 1977. — Т. 19. — В. 1. С. 322 – 323.
11. Богатов Н.М. Радиационные дефекты в кремнии, выращенном методом Чохральского / Н.М. Богатов // Поверхность. — 1999. — №3. С. 72 – 78.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Re-Gd

А.В.Бондарев, И.Л.Батаронов

Воронежский государственный технический университет,  
*bondarev\_a\_v@mail.ru*

Экспериментально установлено, что в аморфных сплавах (АС) системы Re-Gd в широкой области концентраций имеет место переход из парамагнитной фазы в состояние спинового стекла [1]. Однако на микроскопическом уровне полного понимания спин-стекольного состояния не достигнуто [2]. В связи с этим для исследования спиновых стекол большое распространение получило компьютерное моделирование методом Монте-Карло [3].

Методом молекулярной динамики построены модели атомной структуры аморфного гадолиния и аморфных сплавов  $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$  ( $x = 4, 5, 7, 8, 10, 12, 37, 61$  и  $93$  ат. %), содержащая 100 000 атомов в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Межатомное взаимодействие описывалось полиномиальным потенциалом [4]. Методом Монте-Карло в рамках модели Гейзенберга исследовались магнитные свойства построенной модели.

В качестве приближения к осциллирующему РККИ-взаимодействию между магнитными моментами атомов Gd выбрана следующая модель [5]: в пределах первой координационной сферы спины взаимодействуют ферромагнитно, в пределах второй координационной сферы – антиферромагнитно, в результате чего в системе возникает конкуренция обменных взаимодействий разного знака [6], приводящая к возникновению состояния спинового стекла. Гамильтониан, описывающий взаимодействие магнитных моментов атомов гадолиния, был записан в следующем виде:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_1 (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - \frac{1}{2} \sum_{i,k} J_2 (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_k), \quad (1)$$

где  $J_1 = 45,7$  К – интеграл обменного взаимодействия между спинами, расстояние между которыми не превышает  $r_1^{\min} = 0,455$  нм – положения первого минимума парной функции распределения  $g(r)$ ;  $J_2 < 0$  – интеграл обменного взаимодействия между спинами, расстояние между которыми находится в интервале между  $r_1^{\min}$  и  $r_2^{\min} = 0,77$  нм – первым и вторым минимумами парной функции распределения  $g(r)$ .

Значение интеграла обменного взаимодействия в первой координационной сфере  $J_1 = 45,7$  К подобрано таким образом, чтобы температуры магнитного фазового перехода  $T_f$  были близки к экспериментальным значениям  $T_f$  для АС Re-Gd. Величина отношения  $J_1/|J_2|$  для АС Re-Gd была принята равной 10, что соответствует спин-стекольному состоянию при низких температурах.

Магнитная восприимчивость  $\chi$  вычислялась численным дифференцированием намагниченности по напряженности внешнего магнитного поля.

Проводилось охлаждение моделей из парамагнитного состояния в интервале температур  $T = 100 - 1$  К с шагом  $\Delta T = 5$  К. В процессе охлаждения рассчитывались температурные зависимости потенциальной энергии системы (1), намагниченности и магнитной восприимчивости.

На рис. 1 приведены температурные зависимости спонтанной намагниченности  $M$ , нормированной на намагниченность насыщения  $M_s$ , при различных значениях константы обменного взаимодействия во второй координационной сфере ( $J_1/|J_2| = 10, 11, 12, 13$  и  $14$ ) для модели аморфного Gd.

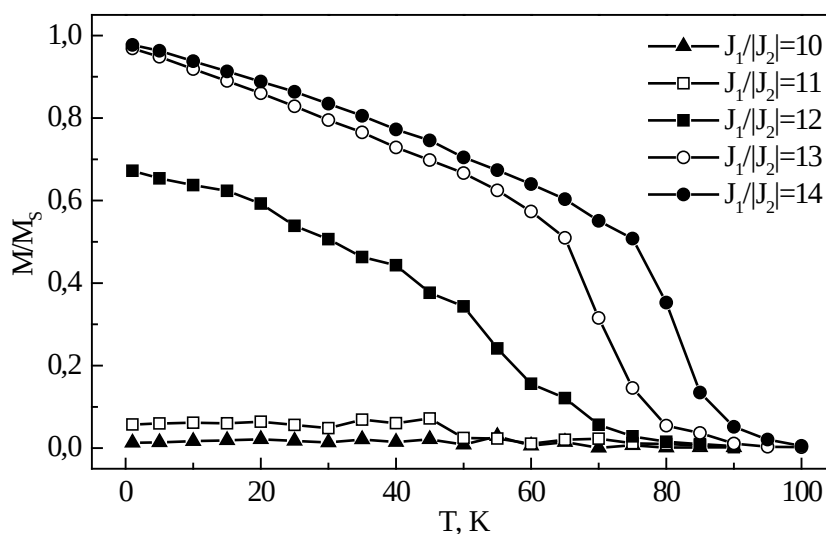


Рис 1. Температурная зависимость спонтанной намагниченности для модели аморфного Gd при различных значениях отношения  $J_1/|J_2|$

На рис. 2 приведена зависимость максимальной спонтанной намагниченности (при  $T = 1$  K) от отношения  $J_1/|J_2|$  для модели аморфного Gd.

При  $J_1/|J_2| \leq 11$  во всем интервале температур спонтанная намагниченность не превышает величины  $0,1M_s$ , где  $M_s$  – намагниченность насыщения. При  $J_1/|J_2| \geq 13$  намагниченность при  $T = 1$  K достигает единицы. Таким образом, при низких температурах при  $J_1/|J_2| \geq 13$  реализуется ферромагнитное состояние, при  $11 < J_1/|J_2| < 13$  – асперомагнитное состояние, а при  $J_1/|J_2| \leq 11$  система переходит в состояние спинового стекла.

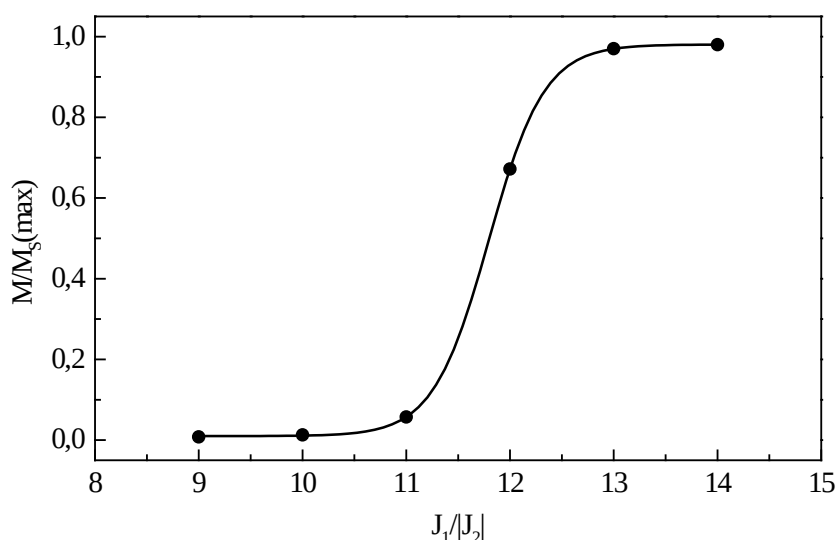


Рис. 2. Зависимость максимальной спонтанной намагниченности (при  $T = 1$  K) от отношения  $J_1/|J_2|$  для модели аморфного Gd

Были рассчитаны температурные зависимости магнитной восприимчивости моделей аморфного гадолиния при различных значениях отношения  $J_1/|J_2|$ , равных 8, 10,

12, 14 и 16. На каждой температуре значения восприимчивости усреднялись по 10 циклам, каждый из которых состоял из  $10^3$  МК-шагов/спин. На всех кривых  $\chi(T)$  наблюдается четко выраженный максимум, свидетельствующий о наличии магнитного фазового перехода. Положение максимума соответствует температуре фазового перехода  $T_f$ .

Таким образом, была получена магнитная фазовая диаграмма аморфного гадолиния в координатах  $J_1/|J_2| - T$  (рис. 3). Рис. 3 можно рассматривать как универсальную карту фазовых состояний аморфного магнетика, описываемого гамильтонианом (1) при  $J_1 = 45,7$  К, позволяющую определить фазовое состояние системы в зависимости от температуры и величины интеграла обменного взаимодействия во второй координационной сфере  $J_2$ .

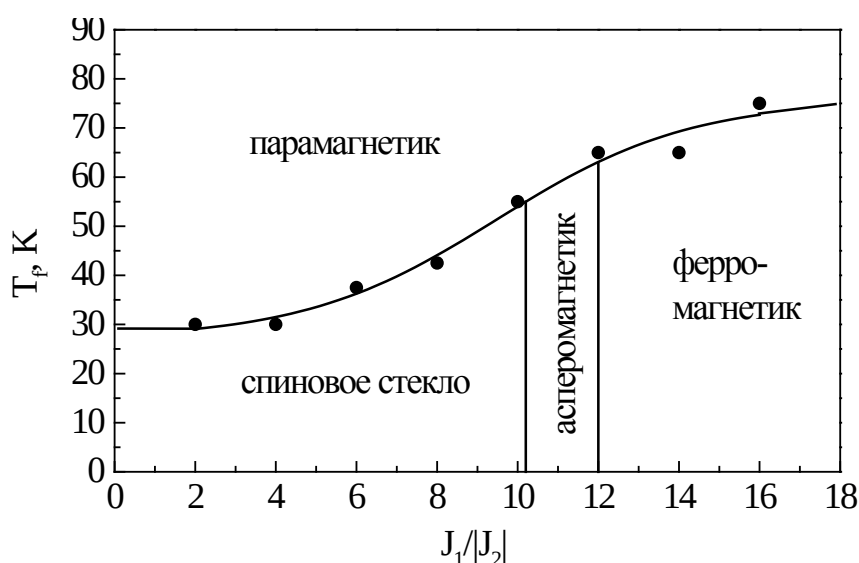


Рис. 3. Магнитная фазовая диаграмма  $T_f (J_1/|J_2|)$  аморфного Gd

Во всех моделях АС  $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$  при  $x > 7$  ат. % наблюдается переход из парамагнитного состояния в состояние спинового стекла. Сплавы с содержанием гадолиния  $x = 4, 5$  и  $7$  ат. % при всех температурах вплоть до  $T = 1$  К остаются в парамагнитной фазе.

Для всех исследованных составов АС  $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$  при  $x > 7$  ат. % Gd на кривых  $\chi(T)$  наблюдаются четко выраженные максимумы, по положению которых определялись температуры фазового перехода в состояние спинового стекла  $T_f$ . При  $x \leq 7$  ат. % Gd максимум на кривых  $\chi(T)$  исчезает, и магнитная восприимчивость монотонно возрастает при понижении температуры, что характерно для парамагнитного состояния.

На рис. 4 приведена зависимость температуры перехода  $T_f$  от концентрации атомов гадолиния в сплаве (магнитная фазовая диаграмма АС Re-Gd). Зависимость  $T_f(x)$  линейная и хорошо согласуется с экспериментальными данными.

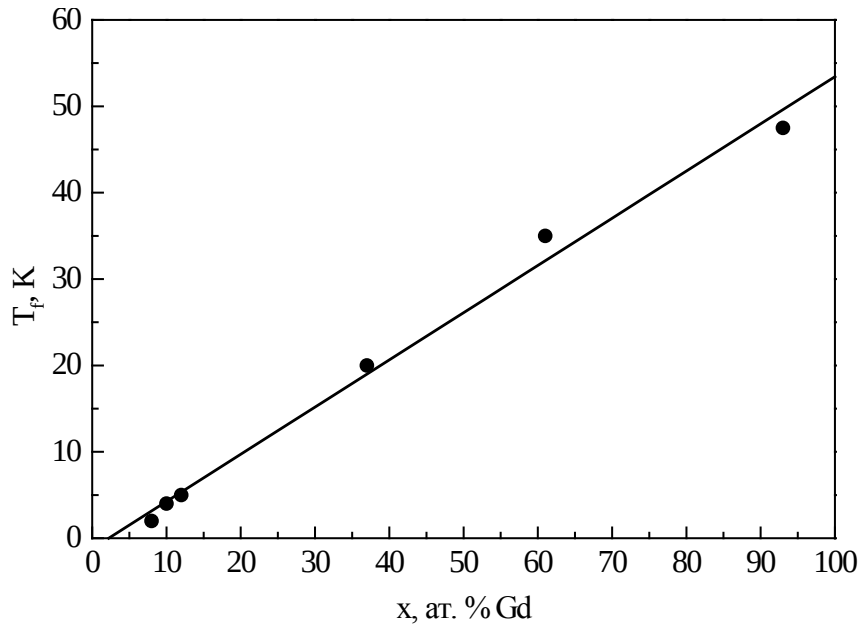


Рис. 4. Зависимости температуры перехода в состояние спинового стекла для моделей AC  $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$  от концентрации атомов гадолиния

Для модели аморфного Gd исследовалась релаксация намагниченности при постоянной температуре  $T=1$  К. Включалось внешнее магнитное поле напряженностью 1000 кЭ, направленное вдоль оси  $Oz$ , после чего система выдерживалась в поле в течение 9–20 циклов по  $10^3$  МК-шагов/спин до выхода намагниченности на постоянное значение, затем поле выключалось и исследовалась зависимость проекции намагниченности на ось  $Oz$  от времени  $M(t)$ .

На рис. 5 приведены зависимости намагниченности от времени после выключения внешнего магнитного поля  $H = 1000$  кЭ для модели аморфного Gd при  $T = 1$  К и значениях  $J_1/|J_2| = 8, 10, 12$ .

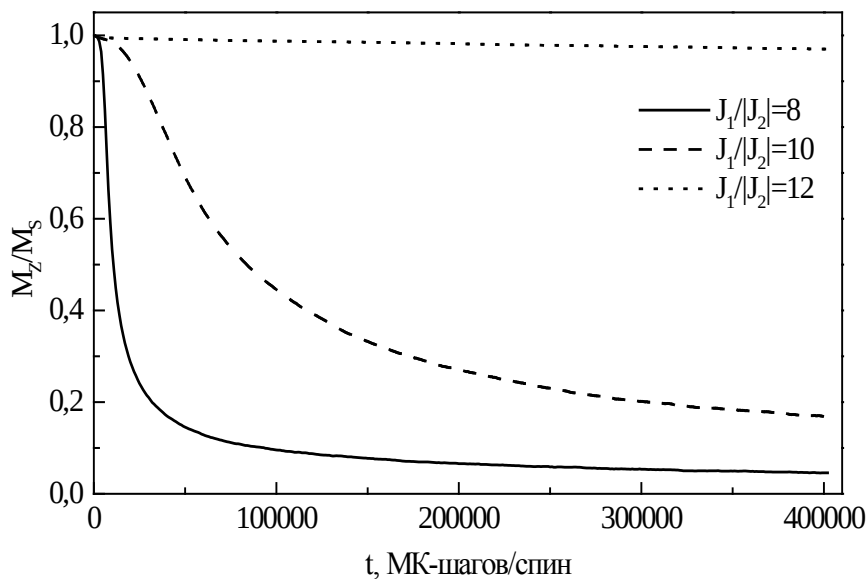


Рис. 5. Зависимость намагниченности от времени после выключения внешнего магнитного поля для модели аморфного Gd при  $T = 1$  К

В данных моделях не наблюдается скачка намагниченности непосредственно после выключения внешнего магнитного поля, т.е. для аморфного Gd релаксация является одностадийной. Зависимость намагниченности от времени описывается линейной комбинацией двух убывающих показательных функций:

$$M(t) = M_0 + A_1 \exp\left(\frac{t-t_0}{\tau_1}\right) + A_2 \exp\left(\frac{t-t_0}{\tau_2}\right), \quad (2)$$

где  $M_0$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  – подгоночные параметры.

На рис. 6 приведены зависимости намагниченности от времени после выключения внешнего магнитного поля  $H = 1000$  кЭ для моделей AC  $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$  ( $x = 12, 37, 61, 93$  ат. %) при  $T = 1$  К. Релаксация намагниченности так же, как и для модели чистого аморфного Gd, является одностадийной и хорошо описывается уравнением (2).

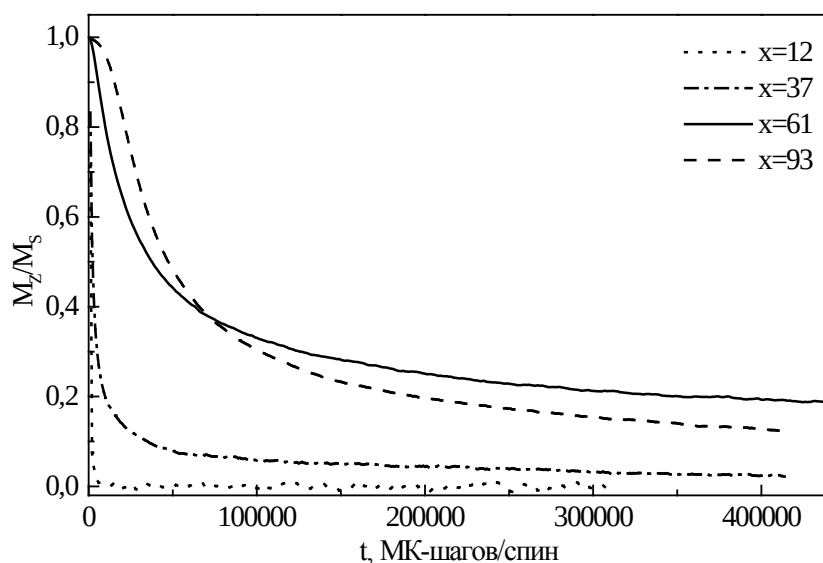


Рис. 6. Зависимость намагниченности от времени после выключения внешнего магнитного поля для моделей AC  $\text{Re}_{100-x}\text{Gd}_x$  при  $T = 1$  К

#### Список литературы

1. Бармин Ю.В. Магнитные фазовые переходы в аморфных сплавах рения с тяжелыми редкоземельными металлами Re-RE (RE = Gd, Tb, Dy, Ho, Er) / Ю.В.Бармин, С.Ю.Балалаев, А.В.Бондарев, И.Л.Батаронов, В.В.Ожерельев // Известия РАН. Серия физическая. – 2006. – Т. 70. – № 8. – С. 1145 – 1147.
2. Доценко В.С. Физика спин-стекольного состояния / В.С.Доценко // УФН. – 1993. – Т. 163. – № 6. – С. 1 – 37.
3. Биндер К. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике / К.Биндер, Д.В.Хеерман. – М.: Наука, 1995. – 144 с.
4. Батаронов И.Л. Компьютерное моделирование атомной структуры аморфных металлических сплавов / И.Л.Батаронов, А.В.Бондарев, Ю.В.Бармин // Известия РАН. Серия физическая. – 2000. – Т. 64. – № 9. – С. 1666 – 1670.
5. Бондарев А.В. Моделирование магнитных фазовых переходов в аморфных сплавах системы Re-Gd / А.В.Бондарев, В.В.Ожерельев, И.Л.Батаронов, Ю.В.Бармин, Д.А.Четкин // Известия РАН. Серия физическая. – 2010. – Т. 74. – № 10. – С. 1534 – 1536.
6. Никитин С.А. Магнитные свойства редкоземельных металлов и их сплавов / С.А.Никитин. – М.: Изд-во МГУ, 1989. – 248 с.

# КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ ЛОКАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ НАВИГАЦИИ НА ОСНОВЕ ПСЕВДОСПУТНИКОВ <sup>1</sup>

А.Б. Гладышев, В.Н. Ратушняк, Е. А. Вейсов, М. А. Голубятников

Сибирский федеральный университет,  
*a-glonass@yandex.ru*

Как известно недостаточная точность навигационного обеспечения спутниковых радионавигационных систем (СРНС), а также низкая помехоустойчивость навигационного оборудования, работающего по сигналам ГЛОНАСС/GPS являются основными причинами отказа от применения сигналов СРНС для обеспечения посадки воздушных судов, навигации при плавании в акваториях портов и выполнении специальных морских и речных работ [1].

Применение для решения указанных задач локальных систем навигации (ЛСН), построенных на основе псевдоспутников (ПС), позволяет решить проблему относительно высокой погрешности навигационных определений, а также повысить помехоустойчивость в условиях активного противодействия [2].

Однако, требования, предъявляемые к ЛНС в процессе их разработки часто меняются. Как правило, технические задания корректируются, так как в процессе проектирования системы постановка задачи постепенно уточняется, что значительно увеличивает сложность как самой системы радионавигации, так и процесса её разработки.

Большой объем и специфика решаемых при проектировании ЛНС на основе ПС задач приводит к необходимости создания специальной техники исследования, использующей аппарат имитации – воспроизведения на ЭВМ комплекса математических моделей функционирования проектируемой технической системы.

Вычислительный эксперимент с использованием компьютерной техники в настоящее время прочно вошёл в процесс проектирования изделия, и занимает промежуточную позицию между конструированием изделия и натурными испытаниями его прототипа.

Целью данной работы является представление общей концепции компьютерного моделирования ЛСН на основе ПС и обзор возможных путей её реализации.

Современные тенденции развития ЛСН на основе ПС требуют проведения комплексного компьютерного моделирования взаимодействия ПС со средой распространения и функционирования навигационной аппаратурой потребителя. Основной целью создания компьютерной модели ЛСН на основе ПС является моделирование вариантов построения системы, влияние конфигурации ПС на точность навигационных определений, оценка эффективности применяемых алгоритмов первичной и вторичной обработки навигационных сигналов. Важным направлением при построении локальной системы навигации на основе ПС является применение ее компьютерной модели для выявления ошибок проектирования основных входящих подсистем на ранних стадиях их создания без применения стендового оборудования, сократив расходы и время дальнейших испытаний.

На первом этапе работы по формированию концепции компьютерного моделирования было проведено исследование структуры локальной систем навигации на основе псевдоспутников, выполнен анализ ее функционирования, а также определён порядок взаимодействия составных частей системы.

---

<sup>1</sup> Исследование выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект №16-19-10089)

В ходе исследования функционирования было выявлено, что компьютерная модель должна содержать компоненты моделирующие физические процессы и технические принципы функционирования аппаратных составных частей системы.

По результатам была разработана структура компьютерной модели, изображенная на рисунке 1.

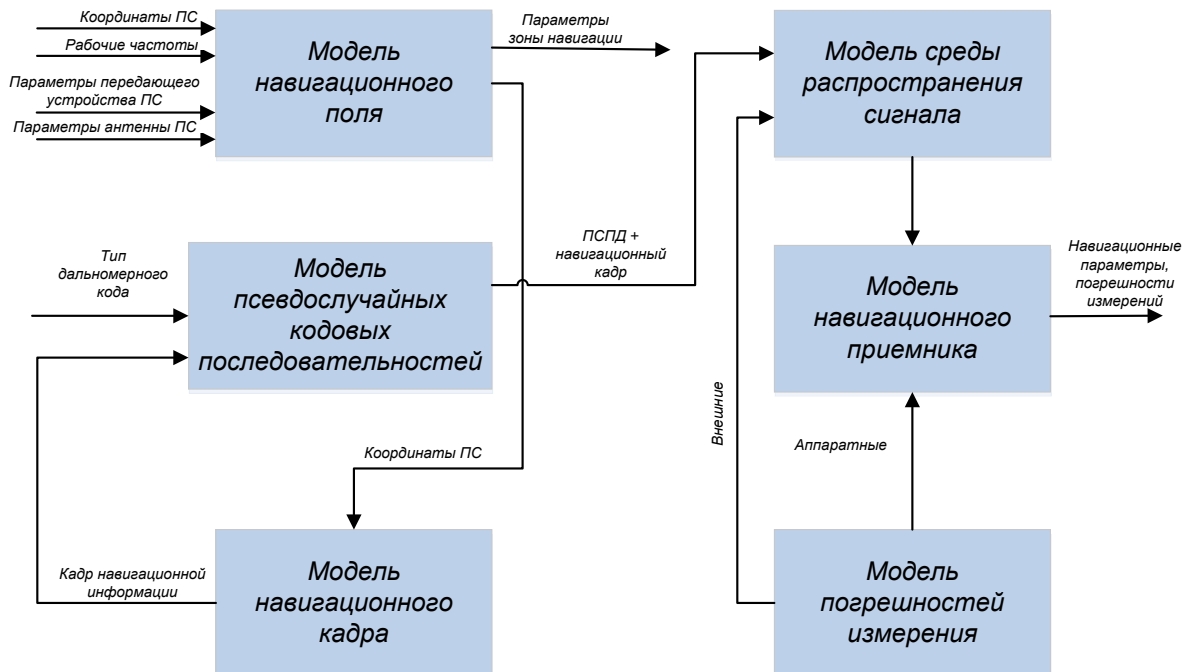


Рис.1. Структурная схема компьютерной модели локальной системы навигации на основе псевдоспутников

С учетом решаемых задач, к функциям компьютерной модели были выдвинуты требования, изложенные ниже.

Модель навигационного поля должна обеспечить численное моделирование (расчет) зоны одновременного уверенного приема сигналов от заданного количества псевдоспутников [3].

Входными данными для модели являются:

- конфигурация локальной системы навигации, определяемая количеством и координатами псевдоспутников;
- технические параметры передающего устройства и антенны каждого псевдоспутника;
- вид диаграммы направленности антенны псевдоспутника;
- диапазон мощностей навигационных сигналов, необходимый в зоне навигации (соответствует динамическому диапазону навигационного приемника).

По входным данным рассчитывается диаграмма направленности антенны каждого псевдоспутника, и общая зона навигации

Результатом моделирования должны являться параметры зоны навигации, в пределах которой одновременно наблюдаются сигналы от заданного количества псевдоспутников с уровнем мощности в заданном диапазоне мощностей навигационных сигналов. На основании данных результатов появится возможность выбрать необходимую конфигурацию псевдоспутников, а также их технические параметры для конкретного предназначения ЛСН и места расположения.

Вариант отображения навигационного поля для ЛСН на основе ПС показан на рисунке 2.

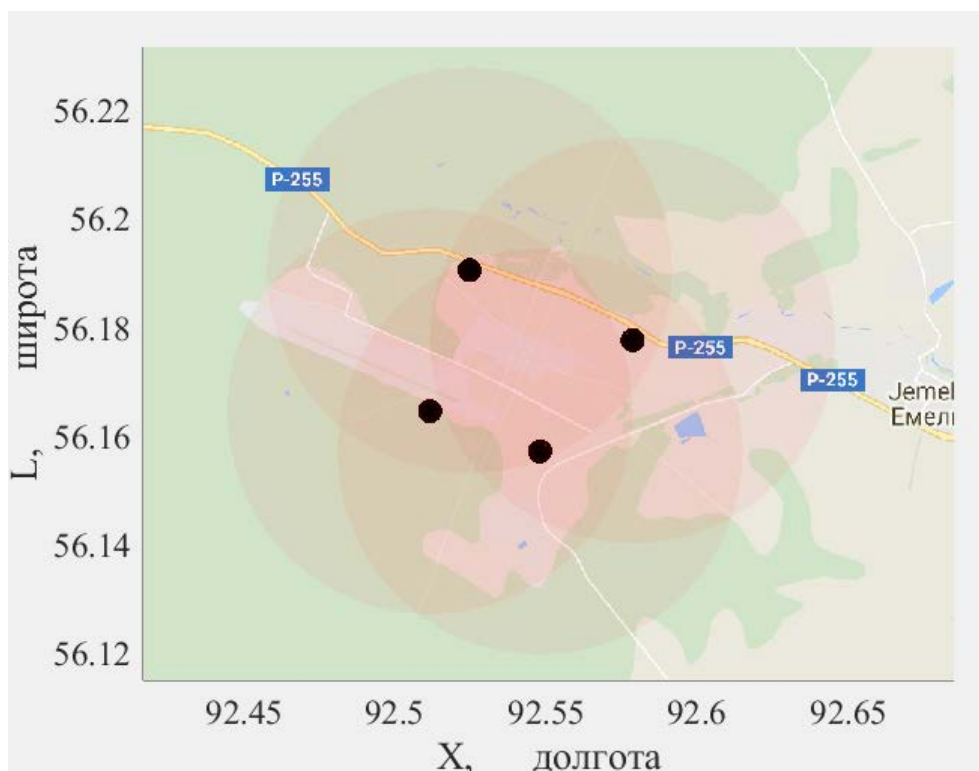


Рис.2. Вариант отображения навигационного поля ЛСН на основе ПС

Модель навигационного кадра на основе данных о местоположении псевдоспутников должна осуществлять формирование структуры кадра навигационной информации в соответствии с разработанным на этапе проектирования форматом данных.

Модель псевдослучайных кодовых последовательностей должна обеспечить моделирование различных типов псевдослучайных последовательностей (ПСП) дальномерного кода, анализа и сравнения их корреляционных свойств, формирования прототипа навигационного сигнала путем наложения на ПСП навигационной информации. В модели должно быть предусмотрено формирование ансамблей ПСП на основе М-кода, кода Голда и кода Касами. По результатам моделирования появиться возможность выбора конкретного типа навигационного сигнала.

Модель среды распространения навигационного сигнала должна моделировать основные физические процессы:

- затухание радиосигнала при распространении в свободном пространстве;
- переотражения радиосигнала от объектов, имеющих размеры, превосходящие длину радиоволны;
- задержка радиосигнал при распространении в тропосфере;
- моделирование эффекта Доплера.

Для реализации данной модели могут быть использованы следующие известные математические модели распространения радиоволн [4]:

- двухлучевая модель распространения радиосигнала;
- модель Окамуры (Okumura Technique);
- модель Хаты (Hata Model);
- модель COST231-Hata;

- заказные модели (модели, основанные на подборе коэффициентов для достижения соответствия результатов теоретических расчетов и измерений для конкретной местности)

Модель навигационного приемника должна реализовывать алгоритмы первичной (поиск и захват навигационного сигнала, а также слежение за ним) и вторичной обработки навигационного сигнала (решение навигационной задачи, определение углов пространственной ориентации объекта).

Модель погрешности измерения должна моделировать погрешности, связанные с задержкой навигационного сигнала в тропосфере, аппаратные погрешности приемника, а также учитывать геометрию расположения псевдоспутников, то есть осуществлять расчет геометрического фактора.

Таким образом, разработанная по такой структуре компьютерная модель позволит:

- рассчитывать параметры навигационного поля в зависимости от характеристик псевдоспутников;
- исследовать корреляционные свойства разных типов навигационных сигналов;
- исследовать зависимость геометрического фактора от конфигурации псевдоспутников;
- исследовать различных факторов на погрешности навигационных определений.

Дальнейшее совершенствование компьютерной модели как технической системы может осуществляться в плоскости перехода от модели к аппаратной реализации составных частей ЛСН [5-7].

Вариант программно-аппаратного комплекса, для проведения полунатурного испытания разработанной ЛСН представлен на рисунке 2.

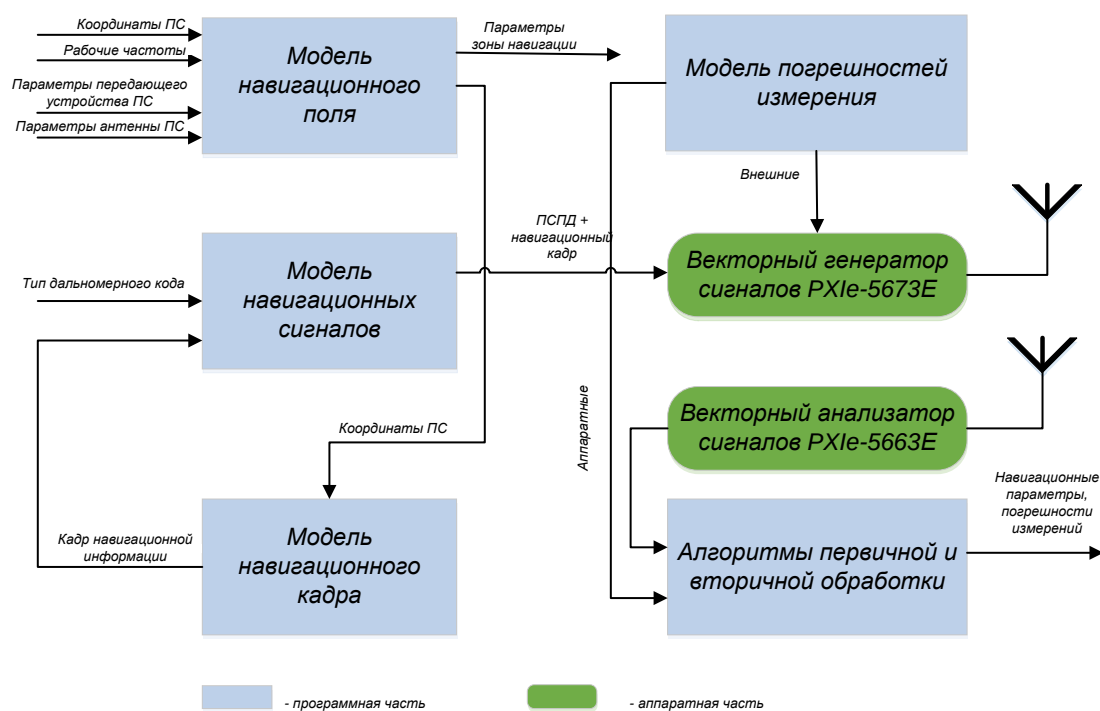


Рис.2. Вариант программно-аппаратного комплекса для проведения полунатурных испытаний ЛСН на основе ПС

В данный программно-аппаратный комплекс предлагается включить аппаратные составные части в виде векторного генератора сигналов PXIe-5673E, предназначенного для генерирования и излучения навигационных сигналов и векторный анализатор сигналов PXIe-5673E, который выполняет функции радиотракта навигационного приемника, тем самым исключается модель среды распространения сигналов.

Такой программно-аппаратный комплекс позволит осуществлять полунатурные испытания ЛСН на основе ПС, учитывать распространение навигационных сигналов в реальных условиях, включая переотражения на конкретной местности, отрабатывать алгоритмы решения навигационной задачи для применения в реальных образцах навигационных приемников.

Таким образом компьютерная модель ЛСН на основе ПС позволит на этапе проектирования основных входящих подсистем ЛСН выявить ошибки, определить конфигурацию и необходимые параметры псевдоспутников, входящих в систему, протестировать разработанные алгоритмы функционирования навигационных приемников, сократив расходы и время дальнейших испытаний.

#### Список литературы

1. Пространственное подавление помех при различных конфигурациях антенной решетки угломерной навигационной аппаратуры / Тяпкин В.Н., Гарин Е.Н., Ратушняк В.Н., Дмитриев Д.Д., Гладышев А.Б. // Научные технологии. 2016. Т. 17. № 8. С. 52-56.
2. Оценка погрешностей измерения навигационных параметров в системе ближней навигации на основе псевдоспутников / Тяпкин В.Н., Гарин Е.Н., Дмитриев Д.Д., Ратушняк В.Н., Фатеев Ю.Л. // В сборнике: Радионавигационные технологии Сер. "Радиосвязь и радионавигация" Москва, 2017. С. 78-84.
3. Свидетельство № 2017619991 РФ. Компьютерная модель системы ближней навигации на основе псевдоспутников / А.Б. Гладышев, В.Н. Ратушняк, Н.С. Кремез, М. А. Голубятников; заявитель и правообладатель ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет». – № 2017616963 ; заявл. 14.07.2017; зарегистр. 13.09.2017.
4. Абилов А.В. Распространение радиоволн в сетях подвижной связи: Теоретический материал и задачи для практических занятий. – Ижевск: Изд-во ИжГТУ, 2001. – 24 с.: ил.
5. Лабораторный комплекс для моделирования системы ближней навигации на основе псевдоспутников / Гладышев А.Б., Ратушняк В.Н., Рыжков Д.Н., Богачук А.А., Голубятников М.А. // В сборнике: Современные проблемы радиоэлектроники Сибирский федеральный университет, Институт инженерной физики и радиоэлектроники. 2017. С. 120-124.
6. A hardware-software complex for modelling and research of near navigation based on pseudolites / Gladyshev A.B., Dmitriev D.D., Veisov E.A., Tyapkin V.N. // Journal of Physics: Conference Series. 2017. Т. 803. № 1. С. 012048.
7. Имитатор сигналов для угломерных ГНСС-приемников на основе современных модульных радиоизмерительных приборов / Гладышев А.Б., Дмитриев Д.Д., Кремез Н.С., Гарин Е.Е. // Решетневские чтения. 2016. Т. 1. № 20. С. 260-262.

# КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ НАВИГАЦИОННОГО ПОЛЯ ЛОКАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ НАВИГАЦИИ НА ОСНОВЕ ПСЕВДОСПУТНИКОВ<sup>2</sup>

М. А. Голубятников

Сибирский федеральный университет,

*GolubiatnikovMaxim@yandex.ru*

**Введение.** В современном мире в связи с возрастанием плотности транспортных потоков на воде и в воздушной среде в системы, отвечающие за управление транспортом повсеместно внедряются радионавигационные технологии. Несмотря на повсеместное использование глобальных навигационных спутниковых систем (ГНСС) не всегда с их помощью возможно обеспечить требуемую точность позиционирования. Острее данная проблема стоит в таких областях деятельности как: обеспечение полетов авиации в приаэродромных зонах; обеспечение полетов беспилотной авиации; судоходство в портовых зонах, узостях, на реках. Слабыми сторонами в ГНСС является: низкая помехоустойчивость; погрешности, связанные с распространением радиоволн в ионосфере, эфемероидная погрешность и т.д. Данным недостатком лишена ближняя навигация на основе псевдоспутников (ПС), которые имеют точную геодезическую привязку к местности и излучают навигационные сигналы [1], известной структуры. Основной их задачей является формирование искусственного навигационного поля в заданной области пространства. При построении навигационного поля полезно разработать компьютерную модель [2], которая даст представление о характеристиках навигационного поля. В данной работе дано описание модуля разработанной программы.

**Описание программы.** Начальными данными для успешного моделирования навигационного поля, являются:

- положение группировки ПС в трехмерной системе координат;
- рабочая частота, МГц, на которой работают ПС;
- значение Мощности, Вт излучаемого антенной ПС;
- коэффициент усиления антенны ПС, дБ;
- коэффициент усиления антенны в навигационной аппаратуре потребителей;
- рабочий динамический диапазон мощности.

На первом этапе программы происходит формирование диаграмм направленностей (рис.1) псевдоспутников (ПС). Таким образом ключевыми величинами по которым составляются диаграммы направленности всенаправленной антенны являются  $R_{\max}$ ,  $R_{\min}$  - максимальное и минимальное расстояние от источника излучения ПС до источника с изотропной излучающей антенной в безвоздушном пространстве.

Данные величины вычисляются исходя из ниже приведенной математической модели. Мощность сигнала  $P_c$ , принимаемого антенной с эффективной площадью  $S_{\text{пр}}$  на расстоянии  $R$  от источника излучения для источника с изотропной излучающей антенной в безвоздушном пространстве, определяется из выражения:

$$P_c = \frac{P_{\text{пер}}}{4\pi R^2} S_{\text{пр}}. \quad (1)$$

---

<sup>2</sup> Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №16-19-10089).

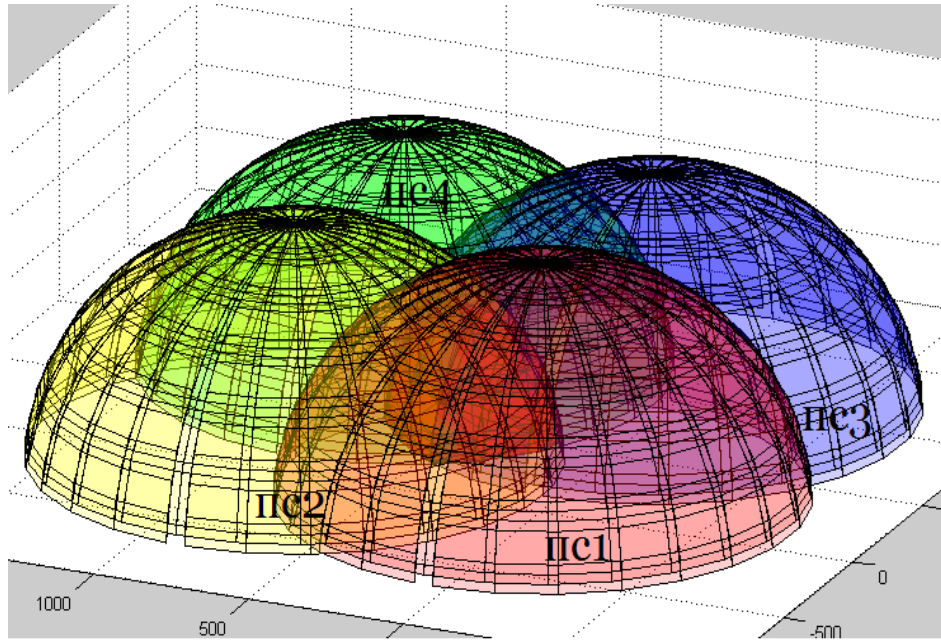


Рис.1. Группировка ПС с диаграммами направленности всенаправленного действия, ограниченные плоскостью Земли.

где  $P_{\text{пер}}$  – мощность передающего устройства, Вт,  $S_{\text{пр}}$  – эффективная площадь приемной антенны,  $\text{м}^2$ .

Для ПС, антенна которого обладает усилением  $G_{\text{пер}}$  в направлении  $R$ :

$$P_c = \frac{P_{\text{пер}} G_{\text{пер}}}{4\pi R^2} S_{\text{пр}}. \quad (2)$$

Эффективная площадь антенны является параметром, характеризующим качество антенн. Чтобы перейти от площади антенны к коэффициенту усиления  $G_{\text{пр}}$ , можно воспользоваться формулой.

$$S_{\text{пр}} = \frac{G_{\text{пр}}}{4\pi} \lambda^2. \quad (3)$$

где  $\lambda$  – длина волны излучаемого сигнала, м. В этом случае с учетом (3) и того, что  $\lambda = \frac{c}{f}$ , где  $f$  – несущая частота излучаемого сигнала, а  $c$  – скорость света ( $c = 299\,792\,458$  м/с), формула (1) запишется в следующем виде:

$$P_c = \frac{P_{\text{пер}} G_{\text{пер}} G_{\text{пр}}}{L}. \quad (4)$$

где  $L = (4\pi)^2 R^2 \left(\frac{f}{c}\right)^2$  – затухание сигнала в свободном пространстве,  $P_c$  – мощность сигнала, Вт,  $G_{\text{пр}}$  – коэффициент усиления антенны,  $G_{\text{пер}}$  – коэффициент усиления передающего устройства,  $f$  – несущая частота излучаемого сигнала,  $c$  – скорость света. Исходя из выше приведённых данных, требуемые параметры можно вычислить из формул (5) и (6):

$$R_{\min} = \sqrt{\frac{P_{\text{пер}} G_{\text{пер}} G_{\text{пр}}}{P_{\max} 4^2 \pi^2 \lambda^2}}. \quad (5)$$

$$R_{\max} = \sqrt{\frac{P_{\text{пер}} G_{\text{пер}} G_{\text{пр}}}{P_{\min} 4^2 \pi^2 \lambda^2}}. \quad (6)$$

где  $P_{\min}$  и  $P_{\max}$  - минимальное и максимальное значение из диапазона мощности в котором сигнал будет успешно принят НАП. Если пользователю необходимо рассчитать тропосферную задержку, то соответствующие формулы будут строиться исходя из того, что трасса распространения сигнала от ПС до НАП включает в себя, тропосферу, которая вносит затухание  $B_{\text{тр}}$ . Учитывая это затухание, перепишем формулу (4)

$$P_c = \frac{P_{\text{пер}} G_{\text{пер}} G_{\text{пр}}}{L}. \quad (4)$$

Поглощение и рассеяние волн в тропосфере ведет к снижению плотности потока мощности радиоволн с расстоянием по экспоненциальному закону. Снижение мощности  $B_{\text{тр}}$  зависит от коэффициента затухания  $\alpha$  [3], измеряемого в дБ/км, и расстояния  $R_{\text{тр}}$ . (в данных расчетах  $R_{\text{тр}} = R_{\max}$ ) проходимого радиоволнами в тропосфере:

$$B_{\text{тр}} = e(0,23\alpha R_{\text{тр}}). \quad (7)$$

Коэффициент  $\alpha$  зависит от длины волны и погодных условий. На волны длиннее 10 см метеорологические условия существенного влияния не оказывают, поэтому будем считать, что коэффициент  $\alpha$  вдоль всей трассы постоянен. По различным источникам, значение коэффициента поглощения в тропосфере колеблется от 0,008 до 0,01 дБ/км. Поэтому:

$$R_{\max}^* = \sqrt{\frac{P_{\text{пер}} G_{\text{пер}} G_{\text{пр}}}{P_{\min} 4^2 \pi^2 \lambda^2 B_{\text{тр}}}}. \quad (8)$$

$$R_{\min}^* = \sqrt{\frac{P_{\text{пер}} G_{\text{пер}} G_{\text{пр}}}{P_{\max} 4^2 \pi^2 \lambda^2 B_{\text{тр}}}}. \quad (9)$$

где  $R_{\max}^*$ ,  $R_{\min}^*$  - максимальное и минимальное расстояние от источника излучения(ПС) до источника с изотропной излучающей антенны с учетом тропосферной задержки. При использовании изотропной антенны передающей системы ПС область навигации при заданных уровнях мощности сигналов на входе приемника показана на рисунке 1 а. Для расчета зоны навигации системы ближней навигации в целом необходимо вычислить область пересечения диаграмм направленности от четырех ПС в диапазоне мощности по уровню -165 дБВт и минус -140 дБВт результат на рисунке 1 б [4].

Данный диапазон мощности является приемлемым для успешной обработкой сигнала НАП. Если уровень сигнала будет выше заданного диапазона, то он будет перегружать НАП, если меньше, то сигнал не будет различим среди помех.

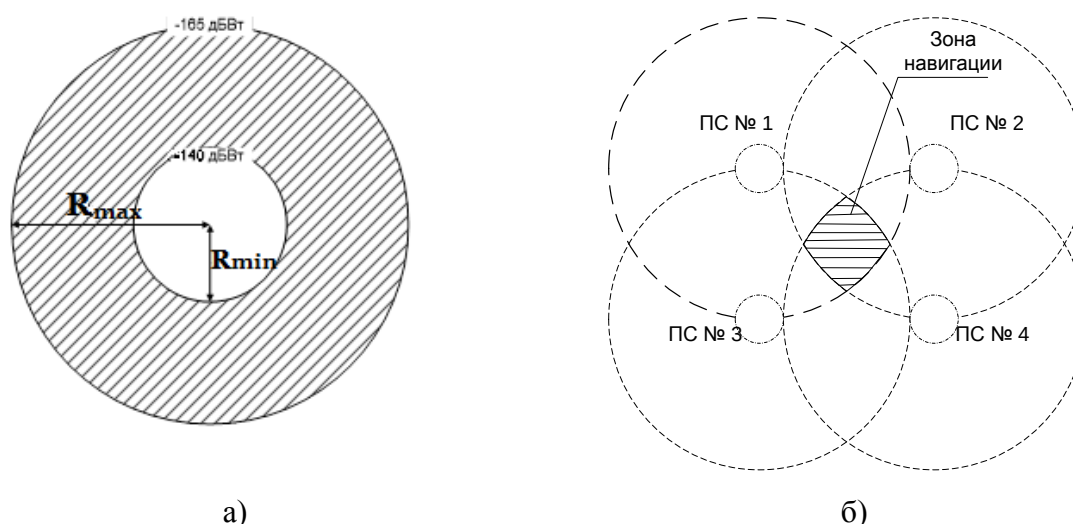


Рис.2. Диаграмма направленности ПС и зона навигации системы

### Моделирование диаграммы направленности антенны ПС всенаправленного действия.

Следует отметить, что аналог диаграммы всенаправленного действия в трехмерном пространстве является сферой, результат построения на рисунке 3. В программе Matlab [5] строится сфера с радиусом  $R_{\max}^*$ , или  $R_{\max}$ .

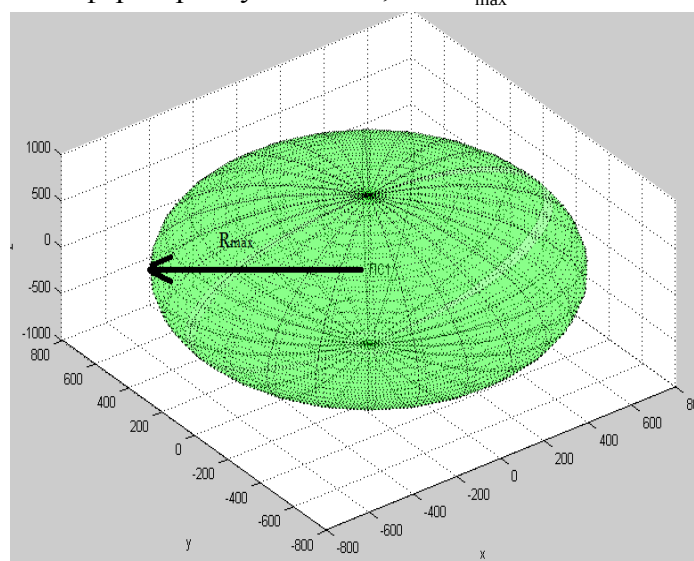


Рис.3. Диаграмма направленности ПС всенаправленной антенны.

На следующем этапе вычисляются области пересечения четырех ПС[6]. Для этого по формуле(10) вычисляется расстояние от каждой из точек первой диаграммы направленности (сферы) до центров других сфер и сравнивает с их радиусами. В случае если расстояние от точки до каждого центра сфер строго меньше их радиуса, то данная точка входит в искомую зону пересечения. В массивы  $X_{ps}, Y_{ps}, Z_{ps}$  добавляются соответствующие координаты точек, подошедших к условию.

$$|AB| = \sqrt{(X_b - X_a)^2 + (Y_b - Y_a)^2 + (Z_b - Z_a)^2} . \quad (10)$$

Далее из  $X_{ps}, Y_{ps}, Z_{ps}$ , в программе строится фигура в пространстве, данная фигура есть общая зона навигации.

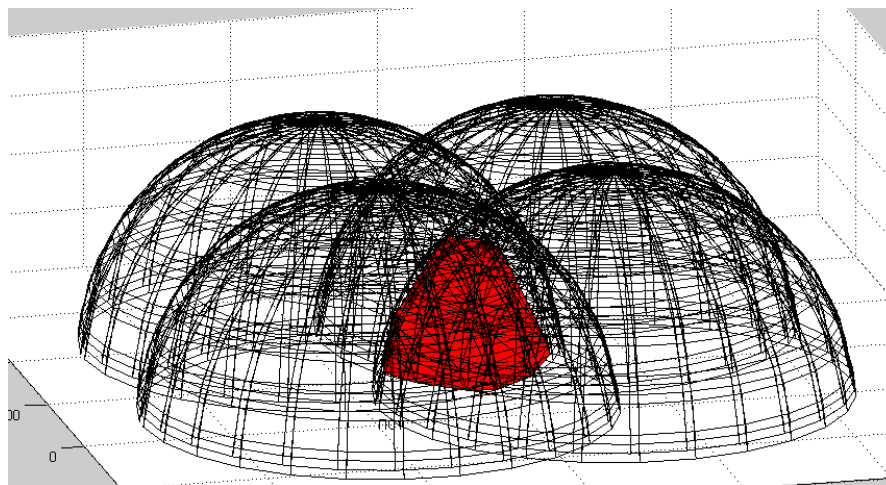


Рис.4. Общая зона навигации для четырех ПС

### Заключение.

Таким образом, программа имеет широкие возможности по исследованию и моделированию систем ближней навигации на основе псевдоспутников. Данные исследования позволяют оценить на этапах проектирования правильность выбора параметров у псевдоспутника, оптимальность геометрического расположения ПС.

### Список литературы

1. Имитатор сигналов для угломерных ГНСС-приемников на основе современных модульных радиоизмерительных приборов / Гладышев А.Б., Дмитриев Д.Д., Кремез Н.С., Гарин Е.Е. // Решетневские чтения. 2016. Т. 1. № 20. С. 260-262.
2. Свидетельство № 2017619991 РФ. Компьютерная модель системы ближней навигации на основе псевдоспутников / А.Б. Гладышев, В.Н. Ратушняк, Н.С. Кремез, М. А. Голубятников; заявитель и правообладатель ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет». – № 2017616963 ; заявл. 14.07.2017; зарегистр. 13.09.2017.
3. Оценка погрешностей измерения навигационных параметров в системе ближней навигации на основе псевдоспутников / Тяпкин В.Н., Гарин Е.Н., Дмитриев Д.Д., Ратушняк В.Н., Фатеев Ю.Л. // В сборнике: Радионавигационные технологии Сер. "Радиосвязь и радионавигация" Москва, 2017. С. 78-84.
4. A hardware-software complex for modelling and research of near navigation based on pseudolites / Gladyshev A.B., Dmitriev D.D., Veisov E.A., Tyapkin V.N. // Journal of Physics: Conference Series. 2017. Т. 803. № 1. С. 012048.
5. Пространственное подавление помех при различных конфигурациях антенной решетки угломерной навигационной аппаратуры / Тяпкин В.Н., Гарин Е.Н., Ратушняк В.Н., Дмитриев Д.Д., Гладышев А.Б. // Научные технологии. 2016. Т. 17. № 8. С. 52-56.
6. Лабораторный комплекс для моделирования системы ближней навигации на основе псевдоспутников / Гладышев А.Б., Ратушняк В.Н., Рыжков Д.Н., Богачук А.А., Голубятников М.А. // В сборнике: Современные проблемы радиоэлектроники Сибирский федеральный университет, Институт инженерной физики и радиоэлектроники. 2017. С. 120-124.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ МАТЕРИАЛЬНЫХ СРЕД В ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫХ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ ПОЛЯХ

Р.Н.Голых

Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ им. И.И. Ползунова,  
*romangl90@gmail.com*

Современное развитие машино-, приборостроения, энергетики, медицины, транспорта, авиации и ракетно-космической техники определяется создаваемыми новыми материалами и веществами с улучшенными механическими, адгезионными, абсорбционными, химическими и др. свойствами [1].

Основная задача сегодняшнего дня – получение материальных сред с заданными свойствами требует решения двух взаимоисключающих задач – одновременного обеспечения низкого содержания паразитных примесей и высокой способности веществ реагировать с другими полезными веществами, выдерживать тепловые, механические и др. нагрузки.

Многообещающим и успешно развивающимся направлением решения этой задачи является создание и применение высокоинтенсивного ультразвукового (УЗ) воздействия, обеспечивающего разрушение и коагуляцию дисперсной фазы в несущей среде, разрушение макромолекул полимерных жидкостей (рис. 1) и т.д.

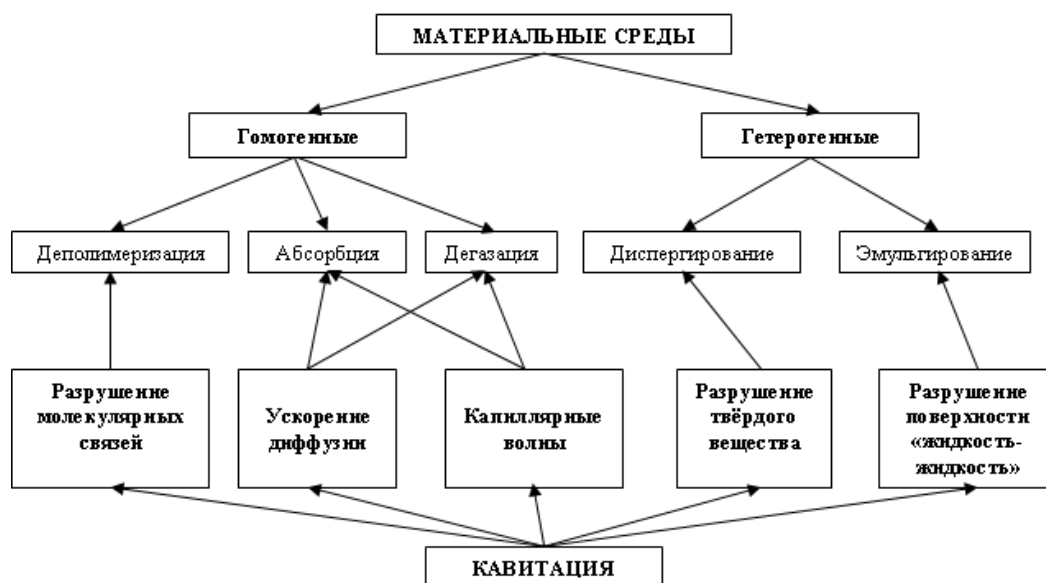


Рис.1. Обобщенная классификация эффектов и явлений, возникающих под действием кавитации, и реализуемых посредством них технологических процессов

Возникающие кавитационные пузырьки в стадии разрежения ультразвуковых колебаний расширяются до размеров 100...150 мкм, тем самым запасая энергию. В стадии сжатия кавитационные пузырьки схлопываются, тем самым мгновенно высвобождая энергию в виде высокоамплитудных ударных волн с амплитудой давления до 100 МПа и скоростью движения жидкой фазы до 1500 м/с.

Ударные волны вызывают изменение структуры и свойств технологических сред, позволяют увеличивать межфазную поверхность взаимодействия несущей и дисперсной фазы в материальной среде, реализовывать процессы растворения, экстрагиро-

вания, эмульгирования (рис. 1) и т. д. На рис. 1 представлена обобщенная классификация физических эффектов и явлений, возникающих под действием кавитации, и способствующих интенсификации технологических процессов.

Целенаправленное получение материальной среды с необходимыми свойствами и характеристиками для определённого применения требует подбора режимов УЗ воздействия. Для выявления оптимальных режимов и условий ультразвукового воздействия необходимо разработать феноменологические модели физических эффектов и явлений, возникающих под действием кавитации, и способствующих интенсификации технологических процессов.

Степень проявления того или иного физического эффекта, формирующего структуру и свойства материальной среды (разрушение молекулярных связей, ускорение массопереноса, разрушение твёрдого вещества, разрушение поверхности «жидкость-жидкость»), очевидно, зависит от характеристик формируемой кавитационной области – концентрация, объёмное содержание и удельная энергия схлопывания пузырьков. Далее описана модель формирования кавитационной области, позволяющая определить её характеристики.

### Модель формирования кавитационной области

Модель формирования кавитационной области включает анализ динамики одиночного пузырька в зависимости от свойств несущей жидкой фазы для выявления зависимости радиуса кавитационного пузырька  $R = f(t, I, \Lambda)$  от времени  $t$ , интенсивности УЗ колебаний  $I$  и реологических свойств жидкости  $\Lambda$  (начальная вязкость  $\mu_0$  (Па·с), показатели консистенции  $K$  (Па·с<sup>N+1</sup>) и нелинейности  $N$ ), и анализ совокупности кавитационных пузырьков в области с характерными размерами  $L$ , много меньшими длины УЗ волны  $\lambda$ , но много большими радиуса кавитационного пузырька  $R$  ( $\lambda \gg L \gg R$ ).

Анализ динамики одиночного пузырька направлен на выявление функциональной зависимости радиуса кавитационного пузырька от времени, которая определяется на основании полученного уравнения динамики одиночного пузырька для стадии расширения (1) и известного уравнения Кирквуда-Бете для стадии схлопывания:

$$\frac{3}{2} \left( \frac{\partial R}{\partial t} \right)^2 + R \frac{\partial^2 R}{\partial t^2} = - \frac{4\mu_0}{\rho_0} \left[ 1 + \left( \frac{K}{2\mu_0} \right) \left( \frac{6 \left( \frac{\partial R}{\partial t} \right)^2}{R^2} \right)^{\frac{|N|}{2}} \right]^{-\text{sgn } N} \frac{\partial R}{\partial t} + \left( \frac{p_0}{\rho_0} + \frac{2\sigma}{\rho_0 R_0} \right) \left( \frac{R_0}{R} \right)^{3\gamma} + \frac{p_{II} - p_0 + \sqrt{2\rho c I \sin(2\pi f t)} + F}{\rho_0} \quad (1)$$

где  $R$  – мгновенный радиус кавитационного пузырька, м;  $\rho_0$  – плотность несущей жидкой фазы, кг/м<sup>3</sup>;  $R_0$  – радиус кавитационного зародыша, м;  $\gamma$  – показатель адиабаты в газовой среде;  $\sigma$  – поверхностное натяжение несущей жидкой фазы, Н/м;  $\rho$  – плотность кавитирующей гетерогенной среды, кг/м<sup>3</sup>;  $c$  – скорость звука в кавитирующей среде, м/с;  $I$  – интенсивность УЗ колебаний в окрестности кавитационного пузырька, Вт/м<sup>2</sup>;  $p_0$  – статическое давление в обрабатываемой среде, Па;  $f$  – частота УЗ колебаний, Гц;  $F$  – функция, характеризующая нелинейно-вязкие свойства жидкой фазы, окружающей кавитационный пузырёк [2], кг/(м·с<sup>2</sup>).

С использованием выявленной функциональной зависимости радиуса пузырька от времени определяются характеристики кавитационной области в целом. Одна из характеристик кавитационной области – это концентрация кавитационных пузырьков (2):

$$n_{\infty} = \frac{j-1}{ik_B T_0}. \quad (2)$$

Концентрация  $n_{\infty}$  зависит от постоянных коалесценции ( $k_B$ ) и дробления ( $j$ ) пузырьков. Постоянная коалесценции определяется скоростью сближения пузырьков при их синфазных колебаниях, а постоянная дробления, зависит от максимального радиуса пузырька, достигаемого в стадии расширения, согласно работе [2].

Найденная концентрация кавитационных пузырьков и функциональная зависимость радиуса отдельного пузырька от времени позволяет определить их объемное содержание согласно выражению:

$$\delta = \frac{4}{3} \pi \overline{R^3(t)} n_{\infty}. \quad (3)$$

Энергию, выделяемую при схлопывании кавитационных пузырьков, и затрачиваемую на изменение структуры свойств и материальной среды определяет коэффициент поглощения колебаний в кавитирующей жидкой среде. Коэффициент поглощения, определяемый согласно выражению (4) – важная характеристика формируемой кавитационной области, поскольку он пропорционален суммарной мощности ударных волн кавитационных пузырьков и служит мерой эффективности кавитационного воздействия:

$$K_* = -\frac{\omega}{c_0} \text{Im} \left( \frac{\rho_0 c_0^2 \overline{\delta_1}}{\sqrt{2\rho c I}} e^{i\varphi} \right); I = \frac{|\overline{p_1}|^2}{2\rho c}; \overline{p_1} = |\overline{p_1}| e^{i\varphi}; \overline{\delta_1} = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \delta(t) e^{-i\omega t} dt \quad (4)$$

где  $I$  – интенсивность УЗ колебаний, Вт/м<sup>2</sup>;  $\rho$  – плотность кавитирующей среды, кг/м<sup>3</sup>;  $c$  – скорость звука в кавитирующей среде, м/с;  $\varphi$  – фазовый сдвиг звукового давления  $\overline{p_1}$ , рад;  $t$  – время, с;  $\rho_0$  – плотность жидкой фазы, кг/м<sup>3</sup>;  $c_0$  – скорость звука в жидкой фазе, м/с;  $\omega$  – круговая частота УЗ колебаний, с<sup>-1</sup>;  $\delta(t)$  – мгновенное значение объемного содержания пузырьков в жидкости.

Зависимости коэффициента поглощения от интенсивности воздействия для жидких сред с различными реологическими свойствами несущих жидких фаз приведены на рис. 2.

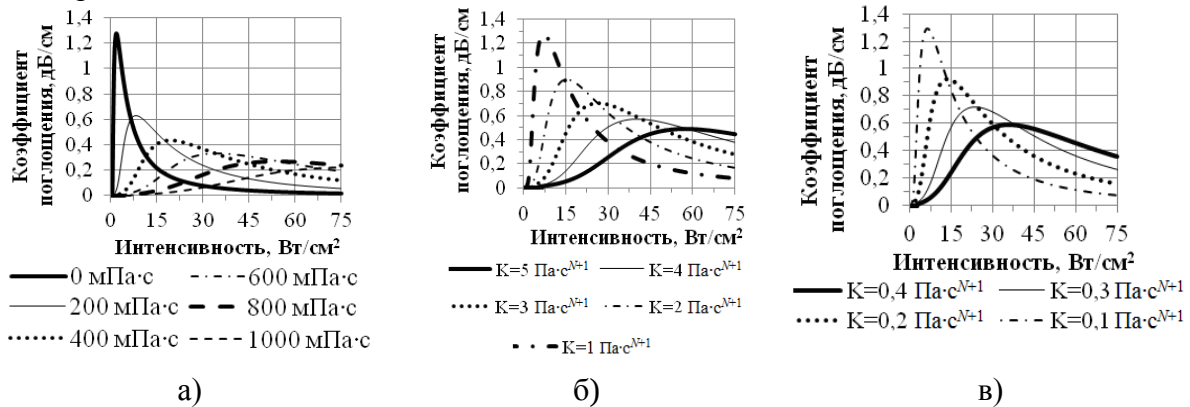


Рис. 2. Зависимости коэффициента поглощения от реологических свойств несущих жидких фаз: линейно-вязких (а); псевдопластических ( $N = -0,1$ ) (б); дилатантных ( $N = 0,1$ ) (в)

Зависимость коэффициента поглощения от интенсивности воздействия имеет экстремальный характер, и положение максимума определяет оптимальную интенсивность УЗ воздействия, поскольку в данном случае достигается максимальная степень трансформации энергии первичной УЗ волны в энергию ударных волн, создаваемых

кавитационными пузырьками. Установлено, что для жидких фаз, наиболее часто используемых на практике в процессах формирования структуры и свойств материальных сред, оптимальные интенсивности составляют от 1,6 до 80 Вт/см<sup>2</sup>.

Для прогнозирования кинетика протекания технологических процессов формирования структуры и свойств материальных сред далее описаны модели, позволяющие определить степень проявления тех или иных физических эффектов, непосредственно влияющих на структуру материальной среды.

### Разрушение молекулярных связей под действием кавитации

Эффективность разрушения молекулярных связей под действием кавитации, очевидно, определяется долей макромолекул, подвергаемых разрушению, от общего количества. В зависимости от характеристик кавитационной области, принимая допущение о равновесном распределении молекул по скоростям, вероятность разрушения неподвижной макромолекулы определяется согласно следующему полученному выражению:

$$P_{br} = \frac{45 \left( \max_t \left| \int_S \frac{\partial p}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{r}, t) dS \right| \right)^3 n_{bub}}{32 \pi^2 \rho^3 v_{th}^6}; \quad (5)$$

$p$  – давление ударной волны в ядре кавитационного пузырька при схлопывании, Па;  $\rho$  – плотность жидкости, кг/м<sup>3</sup>;  $v_{th}$  – пороговая скорость столкновения макромолекул, м/с;  $n_{bub}$  – концентрация кавитационных пузырьков, м<sup>-3</sup>;  $S$  – поверхность стенки кавитационного пузырька.

Входящие в выражение (5) давление ударной волны в ядре кавитационного пузырька при схлопывании  $p$  и концентрация пузырьков  $n_{bub}$  определяются на основании анализа ранее описанной модели формирования кавитационной области.

Пороговая скорость столкновения макромолекул  $v_{th}$  – минимальная скорость при которой происходит распад одной из них определяется на основании 2-го закона Ньютона для системы частиц, взаимодействующих с потенциалом Ридберга [3].

Полученные зависимости вероятности распада макромолекулы представлены на рис. 3, 4.

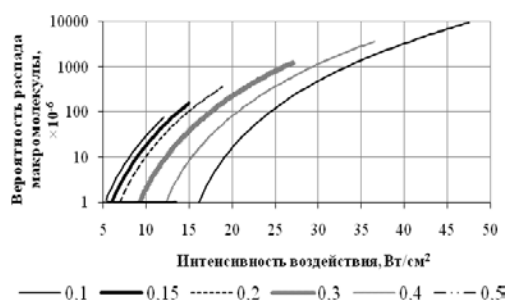


Рис. 3. Зависимости вероятности распада макромолекулы от интенсивности ультразвукового воздействия (частота 22 кГц) при различных вязкостях жидкости (в Па·с)

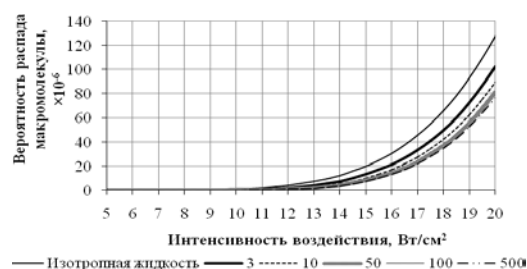


Рис. 4. Зависимости вероятности распада макромолекулы от интенсивности ультразвукового воздействия (частота 22 кГц) при различном количестве структурных звеньев макромолекулы

Как следует из представленных зависимостей, наложение ультразвуковых колебаний позволяет увеличить вероятность распада макромолекул, а, следовательно, ускорить процесс деполимеризации до 1000 раз.

## Образование капиллярных волн и ускорение диффузии

Найденные параметры кавитационной области используются для определения относительного увеличения площади поверхности раздела фаз исходя из полученного выражения (6), учитывающего изменение концентрации пузырьков за счёт их коалесценции и дробления:

$$s = 1 + \frac{4h}{\pi} f \left\langle \frac{j-1}{R_{MAX}^2 U} \right\rangle^{0,5\lambda} \int_0^{0,5\lambda} r \sqrt{1 + \left( \frac{1}{\rho} \int_0^t \int_0^{t_2} \frac{\partial^2 p}{\partial z \partial r} \partial t_1 \partial t_2 \right)^2} \partial r ; \quad (6)$$

$$\int_0^{t_2} \frac{\partial^2 p}{\partial z \partial r} \left( \frac{\lambda}{2}, z, t_1 \right) \partial t_1 \partial t_2 = 0 ; \quad (7)$$

где  $s$  – относительное увеличение площади границы раздела фаз;  $\lambda$  – длина капиллярной волны (м), определяемая из условия (5);  $R_{MAX}$  – максимальный радиус пузырька, м;  $U$  – средняя скорость сближения пузырьков, м/с;  $j$  – количество зародышей, образуемых при дроблении отдельного пузырька,  $\langle \rangle$  – знак усреднения по толщине плёнки жидкости;  $h$  – толщина плёнки, м.

Относительное увеличение площади поверхности раздела определяет эффективный коэффициент концентрационного взаимодействия на свободной поверхности жидкости  $K_s = \frac{S_{US}}{S_{NoUS}} K_{s0}$  ( $S_{US}$  – площадь поверхности раздела фаз при УЗ воздействии, м<sup>2</sup>;  $S_{NoUS}$  – площадь поверхности раздела без УЗ воздействия, м<sup>2</sup>), который входит в уравнения диффузии растворимого газа в жидкости [4]. Эквивалентный коэффициент диффузии определяется акустическими потоками, вызываемыми кавитацией, и объёмным содержанием пузырьков, внутри которых массоперенос газа происходит до 10000 эффективнее, чем в жидкой фазе.

В свою очередь, уравнения диффузии газа в жидкости позволяют рассчитать зависимости производительности поглощения газа от интенсивности воздействия [4].

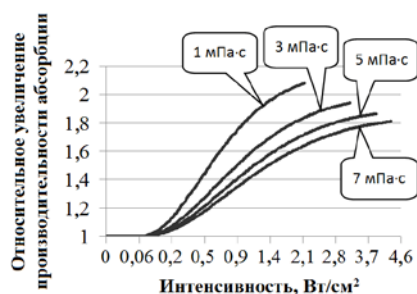


Рис. 5. Зависимости относительного увеличения производительности поглощения газа от интенсивности УЗ воздействия

Из представленных зависимостей следует, что УЗ воздействие позволяет ускорить поглощение газов до 2,2 раз, и интенсивность УЗ воздействия должна составлять от 2 до 4 Вт/см<sup>2</sup> в зависимости от вязкости жидкости-абсорбента (например, 2 Вт/см<sup>2</sup> для жидкости вязкостью 1 мПа·с, 2,9 Вт/см<sup>2</sup> – для 3 мПа·с; 4 Вт/см<sup>2</sup> – для 7 мПа·с).

## Диспергирование

Анализ кинетики диспергирования частиц (как твёрдых частиц, так и капель эмульсии) в гетерогенных системах проводится на основе вероятностного подхода [6], позволяющего рассчитать эволюцию концентраций частиц  $n_k$  каждого размера

$d_k = \frac{d_0}{\sqrt[3]{2^k}}$  с течением времени при известных вероятностях их распада. Для определе-

ния вероятности распада частиц предполагается, что частица распадается тогда и только тогда, когда кавитационный пузырь схлопывается внутри некоторой окрестности объёмом  $V_{bk}$  частицы размером  $d_k$ , именуемой «окрестностью распада» [5]. Согласно данному подходу для концентраций частиц разных размеров справедливо следующее кинетическое уравнение:

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} = f n_{bub} (2V_{b(k-1)} n_{k-1} - V_{bk} n_k).$$

На основании данного уравнения была рассчитана эволюция дисперсного состава частиц алюминия в воде под воздействием ультразвуковых колебаний (интенсивность 10 Вт/см<sup>2</sup>, частота 22 кГц).

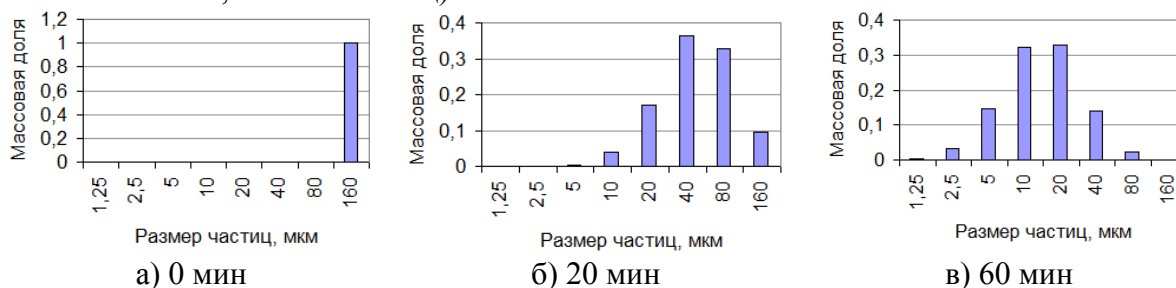


Рис. 6. Распределения концентраций частиц алюминия в воде по размерам в различные моменты времени в ходе ультразвукового диспергирования

Как следует из представленных гистограмм, ультразвуковые колебания позволяют осуществлять диспергирование до частиц размером в 16 раз меньше исходного.

Таким образом, предложенные модели позволили установить высокую эффективность УЗ воздействия для формирования структуры и свойств материальных сред.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 17-48-220053 р\_а.

#### Список литературы

1. Хмелев В.Н. Ультразвуковые multifunctional и специализированные аппараты для интенсификации технологических процессов в промышленности, сельском и домашнем хозяйстве / В.Н. Хмелев, Г.В. Леонов, Р.В. Барсуков, С.Н. Цыганок, А.В. Шалунов // Алт. гос. техн. ун-т, БТИ. – Бийск: Изд-во Алт. гос. техн. ун-та, 2007. – 400 с.
2. Хмелёв В.Н. Выявление режимов ультразвукового воздействия, обеспечивающих формирование кавитационной области в высоковязких и неньютоновских жидкостях / В.Н. Хмелёв, А.В. Шалунов, Р.Н. Голых, С.С. Хмелёв // Южно-Сибирский научный вестник – 2014. – №1. – С. 22-27.
3. Legon A.C. Correction: A reduced radial potential energy function for the halogen bond and the hydrogen bond in complexes B...XY and B...HX, where X and Y are halogen atoms / A.C.Legon // Phys. Chem. Chem. Phys, 2014, Iss. 16, pp. 12415–12421.
4. Khmelev V.N. Determination of requirements and development of experimental setup for studying of ultrasonic absorption / V.N. Khmelev, R.N. Golykh, V.A. Nesterov, D.V. Genne, M.V. Khmelev // 18th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices. EDM'2017: Conference Proceedings. – Novosibirsk: NSTU, 2017. – P. 268–274.
5. Golykh R.N. Theoretical and experimental study of cavitation dispersing in “liquid-solid” system for revelation of optimum influence modes / R.N. Golykh // Americal Journal of Engineering Research, 2016, Iss. 1, pp. 159-168.

# НЕРАВНОВЕСНАЯ НАМАГНИЧЕННОСТЬ СВЕРХПРОВОДНИКОВ ПРИ РАЗНЫХ МАСШТАБАХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

Д.М. Гохфельд

Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН,  
*[gokhfeld@iph.krasn.ru](mailto:gokhfeld@iph.krasn.ru)*

Сверхпроводники являются абсолютными диамагнетиками. При значениях внешнего поля  $H$  меньше первого критического поля  $H_{c1}$ , сверхпроводники выталкивают из себя внешнее магнитное поле. Магнитное поле может проникать при  $H > H_{c1}$  в сверхпроводники второго рода, не уничтожая сверхпроводящее состояние. Поле входит в сверхпроводник в виде отдельных нитей, несущих квант магнитного потока, – вихрей Абрикосова. Вихри Абрикосова закрепляются на различных дефектах (центрах пиннинга), благодаря чему при выключении внешнего поля в образце остаются замороженные вихри. Из-за этого зависимости намагниченности сверхпроводников второго рода от  $H$  демонстрируют гистерезисное поведение. При достаточной плотности центров пиннинга в объемных образцах реализуется неравновесная конфигурация вихревой решетки. В то же время поверхность образцов намагничивается равновесно. Вклад равновесной намагниченности в общую намагниченность образца увеличивается с уменьшением размеров образца, так же как и с ростом температуры.

Метод Монте-Карло используется для исследования поведения решетки вихрей Абрикосова. В работах [1, 2] проводилось моделирование с использованием метода Монте-Карло для большого канонического ансамбля в рамках алгоритма Метрополиса, выполнялась минимизация функционала свободной энергии вихревой решетки и определялись равновесные конфигурации вихревой плотности и намагниченность сверхпроводника. Метод молекулярной динамики также позволяет находить намагниченность сверхпроводника [3, 4], при этом прослеживается полная эволюция вихревых конфигураций. Недостатком использования численных методов моделирования намагниченности сверхпроводников является ресурсозатратность и малопригодность к анализу экспериментальных характеристик.

Модель критического состояния [5] используется для оценки параметров сверхпроводников из экспериментальных петель намагничивания. В модели проникновение вихрей в образец описывается с помощью закона Ампера о циркуляции:  $dB/dr = \pm \mu_0 j_c$ , где  $j_c$  это плотность критического тока в образце,  $\mu_0$  – магнитная постоянная,  $B$  это плотность потока в образце,  $r$  это расстояние от центра образца. Из модели критического состояния следует пропорциональность ширина петли и плотности критического тока. Для цилиндрического образца и для гранулярных образцов:

$$j_c = 3\Delta M / 2R, \quad (1)$$

где  $\Delta M$  это ширина петли намагниченности (неравновесная намагниченность),  $R$  это радиус циркуляции тока. Модель критического состояния качественно описывает лишь

петли намагниченности объемных сверхпроводников с сильным пиннингом, в которых весь образец намагничен неравномерно. Но формулу (1) используют для оценки  $j_c$  любых образцов. Это не обосновано для образцов с равновесным вкладом в намагниченность. Равновесный вклад в намагниченность приводит к асимметрии петли намагниченности относительно оси  $H$ . Для описания образцов с асимметричными петлями была разработана расширенная модель критического состояния, учитывающая равновесный вклад от поверхности образца.

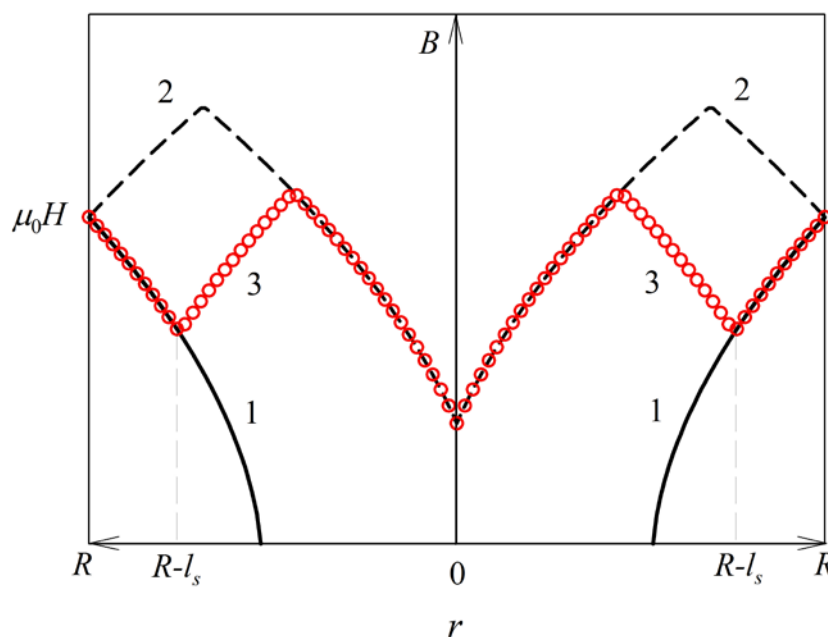


Рис.1. Распределение магнитного потока в цилиндрическом образце во внешнем поле.

В развиваемой версии расширенной модели [6 – 8] асимметрия петли намагниченности определяется отношением глубины поверхностной области с равновесной намагниченностью  $l_s$  к радиусу циркуляции тока  $R$ . Поверхностная область увеличивается с ростом температуры и магнитного поля, ее глубина сравнима с глубиной проникновения магнитного поля в образец,  $\lambda$ . Неравновесная намагниченность центральной области зависит от распределения поля в поверхностной области. Распределение магнитного потока в цилиндрическом образце во внешнем поле показано на рис. 1. Цифрами на рисунке указаны 1) распределение, соответствующее равновесному намагничиванию при увеличении внешнего поля от 0; 2) распределение, соответствующее неравновесному намагничиванию при уменьшении внешнего поля без учета поверхности (модель критического состояния); 3) распределение, соответствующее неравновесному намагничиванию при уменьшении внешнего поля с учетом поверхности (расширенная модель критического состояния).

Некоторые петли намагниченности, рассчитанные по расширенной модели критического состояния для различной глубины поверхностного слоя  $l_s$ , показаны на рис. 2. Синим цветом на рис. 2 выделен участок начального намагничивания. Начальное намагничивание не зависит от поверхностного слоя, так как распределение потока на этом этапе равновесное. При росте температуры и при уменьшении размера  $R$  происходит одинаковое изменение петель намагниченности из-за увеличения отношения  $l_s / R$ .

Из-за особенностей внутренней структуры образца, гранулярности, пористости, многофазности масштаб циркуляции тока  $R$  может быть много меньше размера образца. Точная оценка  $R$  важна, так как этот параметр определяет оцениваемое значение  $j_c$  в формуле 1. Из расширенной модели критического состояния следует, что уменьшение размера образца приводит к уменьшению макроскопической плотности критического тока [7, 8]:

$$j_c = j_{cB}(1 - l_s / R)^n, \quad (2)$$

где  $j_{cB}$  это плотность критического тока образца с  $R \gg l_s$ , параметр  $n$  для гранулярного сверхпроводника равен 3. Петля намагниченности образца с  $R \gg l_s$  симметрична относительно оси  $H$ . Для такой петли выполняется условие  $\Delta M = 2|M_{in}|$ , где  $M_{in}$  это ветвь петли намагниченности при увеличении поля. Из (2) получаем:

$$l_s / R = 1 - (\Delta M / 2|M_{in}|)^{1/n}. \quad (3)$$

При известной глубине проникновения магнитного поля  $\lambda$ , формула (3) позволяет оценить из петли намагниченности масштаб циркуляции тока  $R$ .

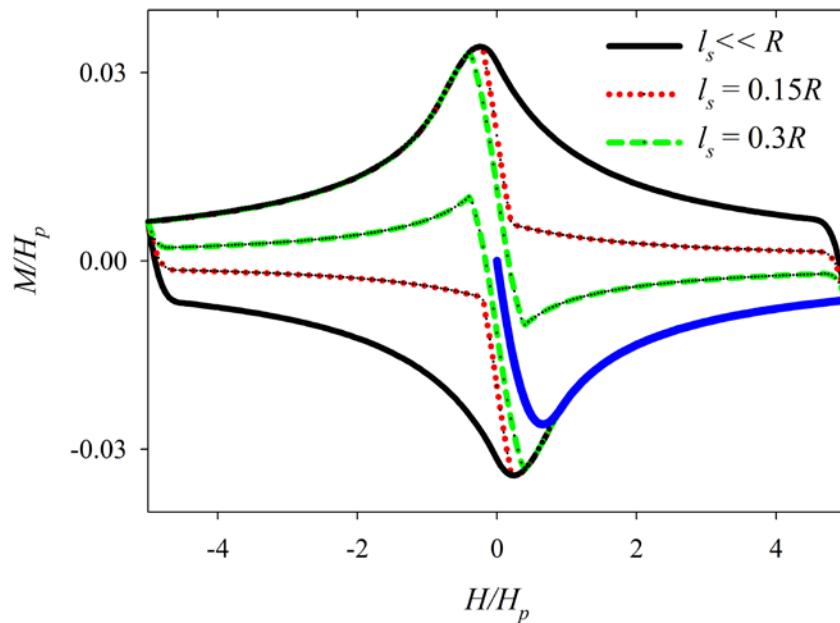


Рис.2. Гистерезисные зависимости намагниченности от магнитного поля при различной глубине поверхностного слоя.

Используя расширенную модель критического состояния, мы провели расчет большого количества петель намагниченности для разных параметров и размеров сверхпроводящих образцов. В полях больше поля полного проникновения  $H_p$  значения  $j_c$ , полученные с помощью выражения (1), описываются аналитическими зависимостями (2) для  $j_c(H)$ , используемыми при расчете петель. Это подтверждает применимость формулы (1) для оценки макроскопической плотности критического тока сверхпроводников с произвольным размером.

#### Список литературы

1. Кашурников В.А. Намагниченность и транспортные характеристики слоистых ВТСП с различным параметром анизотропии / В.А. Кашурников, А.Н. Максимова, И.А. Руднев, Д.С. Одинцов // Физика Твёрдого Тела. — 2016. — Т.58. — № 8. С.1457 – 1464.
2. Moroz A.N. Magnetization of two-dimensional layered HTSCs with defects / A.N. Moroz, A.N. Maksimova, V.A. Kashurnikov, I.A. Rudnev // Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. — 2009. — Т.2. — № 3. С.258 – 270.
3. Fujibayashi D.E. Dynamics of Vortices in Nano-Structured Superconductors with Periodic Arrays of Various Antidots / D.E. Fujibayashi, M. Kato // Journal of Physics: Conference Series. — 2012. — Т.400. С.1 – 4.
4. Reichhardt C., Microscopic derivation of magnetic-flux-density profiles, magnetization hysteresis loops, and critical currents in strongly pinned superconductors / C. Reichhardt, C. J. Olson, J. Groth, S. Field, F. Nori // PHYSICAL REVIEW B. — 1995. — Т.52. — № 14. С.10441 – 10446.
5. Bean C.P. Magnetization of High-Field Superconductors / C. P. Bean // Rev. Mod. Phys. — 1964. — Т.36. С.31 – 39.
6. Gokhfeld D.M. Magnetization asymmetry of type-II superconductors in high magnetic fields / D.M. Gokhfeld, D.A. Balaev, M.I. Petrov, S.I. Popkov, K.A. Shaykhutdinov, V.V. Valkov // J. Appl. Phys. — 2011. — Т.109. — С.033904.
7. Гохфельд Д.М. Расширенная модель критического состояния: асимметричные петли намагниченности и полевые зависимости критического тока сверхпроводников / Д.М. Гохфельд // Физика Твёрдого Тела. — 2014. — Т.56. — № 12. С.2298 – 2304.
8. Gokhfeld D.M. Critical current density and trapped field in HTS with asymmetric magnetization loops / D.M. Gokhfeld // Journal of Physics: Conference Series. — 2016. — Т.695. С.012008.

# РЕДУКЦИЯ НЕКОТОРЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ К СИСТЕМАМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

Г.В.Дружинин, Н.М.Бодунов

Казанский национальный исследовательский технический  
университет им. А.Н. Туполева-КАИ, [bodunov\\_nm@mail.ru](mailto:bodunov_nm@mail.ru)

Приведем алгоритмы решения краевых задач для определенного класса нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных и их систем путем редукции (преобразования) этих задач к системам линейных алгебраических уравнений. Все рассмотренные ниже краевые задачи могут быть решены методом взвешенных невязок (МВН) (в частности методом коллокаций) [1].

1. Алгоритм приближенного решения уравнения Гельмгольца для нестационарного течения. Это уравнение запишем в виде [2]

$$\frac{\partial \Delta F}{\partial \tau} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial \Delta F}{\partial \xi} - \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \Delta F}{\partial \eta} = \Delta^2 F, \quad (1)$$

где  $\psi(x, y, t) = vF(\xi, \eta, \tau)$ ;  $\xi = xu_\infty / v$ ;  $\eta = yu_\infty / v$ ;  $\tau = tu_\infty / v$  [3].

Выберем решение уравнения (1) в виде

$$F(\eta, \xi, \tau) = \sum_{\alpha=0}^{-N} A_\alpha \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^\alpha + \eta \varphi(\tau, \xi), \quad (2)$$

тогда продольная и поперечная компоненты скорости потока жидкости (газа) равны

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y} = \sum_{\alpha=0}^{-N} A_\alpha \alpha \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-1} \frac{c_0 u_\infty}{\sqrt{\tau}} + u_\infty \varphi(\tau, \xi);$$

$$v = -\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\sum_{\alpha=0}^{-N} A_\alpha \alpha \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-1} \frac{c_1 u_\infty}{\sqrt{\tau}}.$$

Отметим, что функция  $\varphi(\tau, \xi)$  задана.

Проведем в области  $G$  линеаризацию относительно неизвестных коэффициентов  $A_\alpha$  с учетом следующих выражений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial \Delta F}{\partial \xi} &= \left[ \frac{c_0}{\sqrt{\tau}} \sum_{\alpha} A_\alpha \alpha \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-1} + \varphi \right] \times \\ &\times \left[ c_1 \left( \frac{c_1^2 + c_0^2}{\tau \sqrt{\tau}} \right) \sum_{\alpha} A_\alpha \alpha (\alpha-1) (\alpha-2) \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-3} + \eta \frac{\partial^3 \varphi}{\partial \xi^3} \right]; \\ \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \Delta F}{\partial \eta} &= \left[ \frac{c_1}{\sqrt{\tau}} \sum_{\alpha} A_\alpha \alpha \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-1} + \eta \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right] \times \\ &\times \left[ c_0 \left( \frac{c_0^2 + c_1^2}{\tau \sqrt{\tau}} \right) \sum_{\alpha} A_\alpha (\alpha-1) (\alpha-2) \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-3} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} \right]. \end{aligned}$$

Вычитая второе выражение из первого и подставляя решение (2) в исходное уравнение (1), получим после ряда преобразований линейаризованное уравнение относительно неизвестных коэффициентов  $A_\alpha$ :

$$\begin{aligned} & \left[ \left( \frac{c_0^2 + c_1^2}{\tau \sqrt{\tau}} \right) \left( c_1 \varphi - c_0 \eta \frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \right) - \left( \frac{c_0^2 + c_1^2}{2\tau} \right) \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau^3}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau^3}} \right) \right] \times \\ & \times \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha (\alpha-1) (\alpha-2) \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-3} - \\ & - \left( \frac{c_0^2 + c_1^2}{\tau^2} \right) \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha (\alpha-1) \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-2} + \eta \frac{\partial^3 \varphi}{\partial \tau \partial \xi^2} + \\ & + \eta \varphi \frac{\partial^3 \varphi}{\partial \xi^3} + \left( \frac{c_0}{\sqrt{\tau}} \eta \frac{\partial^3 \varphi}{\partial \xi^3} - \frac{c_1}{\sqrt{\tau}} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} \right) \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-1} = \\ & = \eta \frac{\partial^4 \varphi}{\partial \xi^4} + \left( \frac{c_0^4 + 2c_0^2 c_1^2 + c_1^4}{\tau^2} \right) \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha (\alpha-1) (\alpha-2) (\alpha-3) \times \left( \frac{c_0 \eta}{\sqrt{\tau}} + \frac{c_1 \xi}{\sqrt{\tau}} + d \right)^{\alpha-4}. \end{aligned}$$

Решение (2) можно выбрать в другом виде

$$F = \sum_{\alpha=0}^N A_{\alpha} \frac{\tau^{m_{\alpha}}}{(c_0 \eta + c_1 \xi + d)^{\alpha}} + \eta \varphi(\xi, \tau),$$

где  $m_{\alpha} \geq 0, m_{\alpha} \in R$ . Если функция  $F$  не зависит от  $\tau$ , то  $\partial \Delta F / \partial \tau = 0$ . Это соответствует стационарному режиму.

2. *Задача Плато и алгоритм ее решения.* Рассмотрим нелинейное уравнение

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[ m(|\text{gradu}|^2) \frac{\partial u}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ m(|\text{gradu}|^2) \frac{\partial u}{\partial y} \right] = f(x, y) \text{ в } G \quad (3)$$

где  $m = m(t)$  – заданная функция одной переменной  $t \geq 0$  и, которая, достаточно часто встречается на практике. Это уравнение описывает, например, упруго–пластическую деформацию плоского тела, имеющего форму  $G$ , функция  $m$  характеризует свойства материала, из которого сделано тело, функция  $f$  – нагрузку. Если, кроме того, задать на границе условие вида  $u|_{\Gamma} = 0$  то будем иметь дело с пластиной, закрепленной вдоль границы [4]. То же самое уравнение (3) описывает стационарное магнитное поле, в котором функция  $u(x, y)$  – магнитный потенциал, а функция  $m$  – проницаемость среды. Если разделить границу на две части  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  и задать условия

$$u|_{\Gamma_1} = g, \quad m(|\text{gradu}|^2) \frac{\partial u}{\partial \nu} = h,$$

где  $g = g(x, y)$  и  $h = h(x, y)$  заданные функции, определенные на  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  соответственно, то это означает, что заданы потенциал на  $\Gamma_1$  и плотность потока индукции на  $\Gamma_2$ .

Рассмотрим уравнение (3) при задании функции  $m$  специального вида:  $m(t) = (1+t)^{1/2}$  Тогда вместо (3) в области  $G$  имеем уравнение

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \left[ 1 + \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\partial u}{\partial x} \right\} - \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \left[ 1 + \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\partial u}{\partial y} \right\} = \bar{f}(x, y), \quad (4)$$

которое в случае  $f = 0$  может быть приведено к следующему виду:

$$\left[1+\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2\right]\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}-2\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+\left[1+\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right]\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0 \text{ в } G. \quad (5)$$

Последнее уравнение с граничным условием  $u|_{\Gamma} = g(s)$  представляет собой задачу о минимальной поверхности (задачу Плато). Функция  $u = u(x, y)$  описывает такую поверхность в  $R^3$ . Ее проекцией на плоскость  $(x, y)$  является область  $G$ , над границей  $\Gamma$  она имеет форму, определяемую функцией  $g$ , и обладает наименьшей площадью среди всех поверхностей такого типа. Заметим, что уравнения типа (4) описывают также, например, течение жидкостей или газов и задачи из теории упруго-пластических деформаций.

При решении задачи Плато проведем линеаризацию относительно неизвестных коэффициентов  $A_{\alpha}$  аналогично процедуре, изложенной в предыдущих пунктах. Решение задачи ищем в виде

$$u = \sum_{\alpha} A_{\alpha} (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha}. \quad (6)$$

Подставив (6) в (5) с учетом выражений

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \left[ c_1 \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-1} \right]^2 c_0^2 \sum_{\alpha} A_{\alpha} (-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2}; \\ \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} &= \left[ c_0 \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-1} \right]^2 c_1^2 \sum_{\alpha} A_{\alpha} (\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2}; \\ -2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} &= -2 c_0 \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-1} \times \\ &\times c_1 \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-1} c_0 c_1 \sum_{\alpha} A_{\alpha} (\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2}, \end{aligned}$$

получим после некоторых преобразований при условии  $c_0 \equiv c_1$  линеаризованное уравнение (невязку в области  $G$ ) относительно неизвестных коэффициентов  $A_{\alpha}$  следующего вида  $\Delta u = 0$ .

3. *Алгоритм приближенного решения уравнения Монжа-Ампера.* Задача отыскания поверхности, задаваемой функцией  $u = u(x, y)$  для  $(x, y) \in \bar{G} = G \cup \Gamma$  и имеющей заданную форму на границе и заданную кривизну, является типично нелинейной задачей, которая сводится к уравнению Монжа-Ампера [4,5]:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right)^2 = f(x, y) \text{ в } G \quad (7)$$

и условию на границе  $u|_{\Gamma} = g(s)$ .

Линеаризацию относительно неизвестных коэффициентов  $A_{\alpha}$  проведем аналогично случаю, соответствующему решению задачи Плато. Пусть

$$u = \sum_{\alpha} A_{\alpha} (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha} + kxy. \quad (8)$$

Тогда, подставив (8) в (7), получим с учетом выражений

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = c_0^2 \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha (\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2} c_1^2 \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha (\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2};$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}\right)^2 = \left[\sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha(\alpha-1)(c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2} c_0 c_1 + k\right]^2,$$

систему линейных неоднородных алгебраических уравнений относительно неизвестных коэффициентов  $A_{\alpha}$ :

$$-2k \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha(\alpha-1)(c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2} c_0 c_1 - k^2 = f(x, y).$$

4. В химии и ядерной физике встречаются задачи, описываемые уравнениями типа [4,6]

$$\Delta u + e^u = f \quad \text{в } G, \quad (9)$$

где имеются нелинейности экспоненциального вида. Исследование уравнений с такими нелинейностями является чрезвычайно сложной задачей. Однако, если использовать полиномиальные решения уравнения Лапласа  $\Delta u = 0$ , приведенные в работе [3], то невязку уравнения (9) в области  $G$  можно записать в виде  $u = \ln f(x, y)$ .

5. Алгоритм приближенного решения уравнений Кармана. Рассмотрим плоскую область  $G$  и введем следующее обозначение [4]:

$$[u, v] = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - 2 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}.$$

Система уравнений, относительно неизвестных функций  $u = u(x, y)$  и  $v = v(x, y)$

$$\Delta^2 u = [u, v] + f(x, y); \quad \Delta^2 v = -[u, v] \quad \text{в } G, \quad (10)$$

описывает деформацию упругой тонкой пластины, подвергающейся вертикальной нагрузке. Здесь  $\Delta^2$  – бигармонический оператор. Нагрузка характеризуется функцией  $f(x, y)$ , функция  $u$  представляет собой смещение в направлении, перпендикулярном пластине (прогиб пластины), а  $v$  – это функция Эри, характеризующая распределение напряжений в плоскости пластины. Система уравнений (10) называется системой уравнений Кармана. Разделим границу  $G$  на три части  $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$  и наложим следующие условия  $u$  и  $v$  на границе

$$v|_{\Gamma} = g_0, \quad \frac{\partial v}{\partial \nu} = g_1,$$

где  $g_1, g_2$  – заданные функции. Кроме того, задаются различные условия закрепления вдоль границ, которые имеют вид

$$u|_{\Gamma_1} = \frac{\partial u}{\partial \nu}|_{\Gamma_1} = 0; \quad u|_{\Gamma_2} = 0; \quad Mu|_{\Gamma_2} + \eta_0 \frac{\partial u}{\partial \nu} = \eta_1; \quad Mu|_{\Gamma_3} = 0, \quad Nu|_{\Gamma_3} = 0.$$

Здесь  $\eta_0, \eta_1$  – заданные функции;  $\nu = (\nu_x, \nu_y)$  – вектор внешней нормали;

$$Mu = \mu \Delta u + (1 - \mu) \frac{\partial^2 u}{\partial \nu^2};$$

$$Nu = -\frac{\partial}{\partial \nu} (\Delta u) + (1 - \mu) \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \nu_x \nu_y - \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} (\nu_x^2 - \nu_y^2) - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \nu_x \nu_y \right];$$

$\mu$  – коэффициент Пуассона;  $\tau$  – вектор внешней касательной.

Эти условия означают, что пластина жестко закреплена вдоль  $\Gamma_1$ , упруго закреплена вдоль  $\Gamma_2$  и свободна (не закреплена) вдоль  $\Gamma_3$ . Линеаризация относительно неизвестных коэффициентов  $A_{\alpha}$  проводится аналогично процедуре, изложенной в предыдущих пунктах. Пусть

$$u = \sum_{\alpha} A_{\alpha} (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha}; \quad v = \sum_{\alpha} B_{\alpha} (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha},$$

тогда с учетом выражений

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= c_0^2 \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha(\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2}; \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = c_1^2 \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha(\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2}; \\ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} &= c_0^2 \sum_{\alpha} B_{\alpha} \alpha(\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2}; \quad \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} = c_1^2 \sum_{\alpha} B_{\alpha} \alpha(\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2}; \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} &= c_0 c_1 \sum_{\alpha} A_{\alpha} \alpha(\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2}; \quad \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} = c_0 c_1 \sum_{\alpha} B_{\alpha} \alpha(\alpha-1) (c_0 x + c_1 y + d)^{\alpha-2} \end{aligned}$$

и ввиду того, что выражения в квадратных скобках исходных уравнений (10) обращаются в нуль, то вместо системы уравнений (10) получим линеаризованную систему (невязку в области  $G$  относительно неизвестных коэффициентов  $A_{\alpha}$  следующего вида:

$$\Delta^2 u = f(x, y); \quad \Delta^2 v = 0.$$

Отметим, что после подстановки базисных функций в нелинейные дифференциальные уравнения, последние редуцируются к системам линейных алгебраических уравнений без применения промежуточных традиционных методов линеаризации (метод квазилинеаризации, метод теории возмущений и др.) и без применения традиционного ньютоновского метода линеаризации применительно к системам нелинейных алгебраических уравнений; линеаризация происходит на этапе выбора базисных функций, которые являются решениями канонических уравнений математической физики. Сказанное выше можно изобразить в виде следующей последовательности действий:

*нелинейное дифференциальное уравнение*  $\Rightarrow$  *система линейных алгебраических уравнений*

Данная последовательность существенно отличается от двух других возможных (традиционных) подходов к решению нелинейных дифференциальных уравнений, которые можно изобразить следующим образом:

|                                                      |               |                                                            |               |                                                          |
|------------------------------------------------------|---------------|------------------------------------------------------------|---------------|----------------------------------------------------------|
| <i>нелинейное<br/>дифференциальное<br/>уравнение</i> | $\Rightarrow$ | <i>линейное<br/>дифференциальное<br/>уравнение</i>         | $\Rightarrow$ | <i>система линейных<br/>алгебраических<br/>уравнений</i> |
| <i>нелинейное<br/>дифференциальное<br/>уравнение</i> | $\Rightarrow$ | <i>система нелинейных<br/>алгебраических<br/>уравнений</i> | $\Rightarrow$ | <i>система линейных<br/>алгебраических<br/>уравнений</i> |

#### Список литературы

1. Вержбицкий В.М. Основы численных методов / В.М. Вержбицкий. – М.: Высшая школа, 2005. – 840 с.
2. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя / Г. Шлихтинг. – М.: Наука. – 1974. – 711 с.
3. Дружинин Г.В. Базисные функции в приближенных решениях краевых задач / Г.В. Дружинин, И.М. Закиров, Н.М. Бодунов. – Казань: Изд-во Фэн. – 2000. – 376 с.
4. Куфнер А. Нелинейные дифференциальные уравнения / А. Куфнер, С. Фучик. – М.: Наука. – 1988. – 304 с.
5. Курант Р. Уравнения с частными производными / Р. Курант. – М.: Мир. – 1964. – 368 с.
6. На Ц. Вычислительные методы решения прикладных граничных задач / Ц. На. – М.: Мир. – 1982. – 296 с.

# АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОБТЕКАНИЯ ТЕЛ ВЯЗКИМ ПОТОКОМ ЖИДКОСТИ С УЧЕТОМ ВИХРЕВОЙ НАПРЯЖЕННОСТИ

Г.В.Дружинин, Н.М.Бодунов

Казанский национальный исследовательский технический  
университет им. А.Н. Туполева-КАИ, [bodunov\\_nm@mail.ru](mailto:bodunov_nm@mail.ru)

Для определения аэродинамических сил и моментов необходимо знать распределение нормального давления и касательного напряжения на поверхности обтекаемого тела. Теоретически это возможно сделать, если решить уравнения Навье-Стокса [1] с соответствующими начальными и граничными условиями. Отметим, что треть этого сопротивления возникает вследствие разностей давления, а две трети – вследствие сил трения. Определение нормального давления и касательного напряжения на поверхности летательного аппарата необходимо знать также и для расчета его конструкции на прочность. Ниже дадим алгоритм приближенного решения уравнений Навье-Стокса для плоского случая с использованием базисных функций. Новые аналитические решения этих уравнений способствуют лучшему пониманию качественных особенностей течений жидкости, а также служат для тестирования соответствующих численных методов

Систему уравнений Навье-Стокса без учета массовых сил в безразмерном виде можно записать так [2,3]:

$$u\bar{u}_\xi + v\bar{u}_\eta + \bar{P}_\xi = \Delta\bar{u}(\xi, \eta), \quad u\bar{v}_\xi + v\bar{v}_\eta + \bar{P}_\eta = \Delta\bar{v}(\xi, \eta), \quad \bar{u}_\xi + \bar{v}_\eta = 0. \quad (1)$$

Здесь  $\bar{u} = u/u_\infty$ ,  $\bar{v} = v/u_\infty$ ,  $\bar{P} = P/\rho u_\infty^2$ ,  $\xi = xu_\infty/v$ ,  $\eta = yu_\infty/v$  – обобщенные координаты;  $u, v$  – проекции скоростей на оси выбранной прямоугольной системы координат,  $u_\infty$  – скорость потока на бесконечном расстоянии от тела, имеющая постоянное численное значение и направление,  $\rho$  – плотность,  $P$  – давление.

После исключения давления и учитывая  $\bar{u} = F_\eta$ ,  $\bar{v} = -F_\xi$ ,  $F = \Psi/v$ , ( $\Psi$  – функция тока,  $v$  – кинематическая вязкость) система (1) в области  $G = \{(\xi, \eta) : |\xi| \leq \infty, |\eta| \leq \infty\}$  сводится к уравнению Гельмгольца:

$$F_\eta(\Delta F)_\xi - F_\xi(\Delta F)_\eta = \Delta\Delta F. \quad (2)$$

Введем в рассмотрение безразмерную вихревую напряженность. При плоском течении остается только составляющая вихревой напряженности вдоль оси  $z$ , равная  $\bar{\omega} = 0,5(\bar{v}_\xi - \bar{u}_\eta)$ . Учитывая, что  $\bar{u} = F_\eta$ ,  $\bar{v} = -F_\xi$ ,  $\Delta F = -\bar{\omega}$  уравнение (2), с добавлением уравнения неразрывности, запишется в безразмерном виде

$$u\bar{\omega}_\xi + v\bar{\omega}_\eta = \Delta\bar{\omega}, \quad \bar{u}_\xi + \bar{v}_\eta = 0. \quad (3)$$

Здесь  $\bar{\omega} = \omega/\omega_0$ ,  $\omega_0 = u_\infty^2/v$ ,  $\omega_0$  – какой-либо характерный постоянный вихрь. Уравнение (3) называется уравнением переноса вихрей.

Приближенное обобщенное решение ищем в следующем виде (независимые переменные  $\xi$  и  $\eta$  представляют собой местные числа Рейнольдса):

$$\tilde{F} = \sum_{\alpha=1}^N \left[ A_\alpha / \alpha (c_1|\xi| + c_0|\eta| + d)^\alpha + B_\alpha / \alpha (c_0|\xi| + c_1|\eta| + d)^\alpha \right] + |\eta|, \quad (4)$$

отсюда

$$\bar{u} = - \sum_{\alpha=1}^N \left[ A_\alpha c_0 \operatorname{sgn} \eta / (c_1|\xi| + c_0|\eta| + d)^{\alpha+1} + B_\alpha c_1 \operatorname{sgn} \eta / (c_0|\xi| + c_1|\eta| + d)^{\alpha+1} \right] + \operatorname{sgn} \eta;$$

$$\bar{v} = \sum_{\alpha=1}^N \left[ A_{\alpha} c_1 \operatorname{sgn} \xi / (c_1 |\xi| + c_0 |\eta| + d)^{\alpha+1} + B_{\alpha} c_0 \operatorname{sgn} \xi / (c_0 |\xi| + c_1 |\eta| + d)^{\alpha+1} \right].$$

Здесь  $c_0, c_1$  – действительные или комплексные числа, которые выбираются из физических, математических и геометрических соображений ( $c_0 \neq c_1$ ).

$$\operatorname{sgn} \eta = \begin{cases} 1, & \text{если } \eta > 0, \\ 0, & \text{если } \eta = 0, \\ -1, & \text{если } \eta < 0, \end{cases} \quad \operatorname{sgn} \xi = \begin{cases} 1, & \text{если } \xi > 0, \\ 0, & \text{если } \xi = 0, \\ -1, & \text{если } \xi < 0. \end{cases}$$

Параметры  $c_0, c_1$  и  $d$  задаются таким образом, чтобы при  $N \rightarrow \infty$  ряд (4) равномерно сходил. Для усиления сходимости ряда (4) при  $N \rightarrow \infty$  вместо  $A_{\alpha} / \alpha$  и  $B_{\alpha} / \alpha$  можно взять  $A_{\alpha} / \alpha^{\alpha}$  и  $B_{\alpha} / \alpha^{\alpha}$ .

Из решения для величин  $\bar{u}$  и  $\bar{v}$  следует, что  $\xi = 0$  и  $\eta = 0$  ( $\operatorname{sgn} 0 = 0$ ) критическая точка, где  $\bar{u}$  и  $\bar{v}$  обращаются в нуль [4]. Поэтому начало декартовой системы координат располагаем в этой критической точке (здесь происходит разветвление набегающего потока жидкости или газа). Ось  $\xi$  направляем вдоль рассматриваемого тела по потоку (см. рисунок). Полученные решения должны удовлетворять следующим граничным условиям при обтекании произвольных плоских тел:  $\bar{u}|_{\Gamma} = 0, \bar{v}|_{\Gamma} = 0, \bar{u}|_{\eta \rightarrow \infty} = 1, \bar{v}|_{\eta \rightarrow \infty} = 0$ .

Отметим, что на бесконечности граничные условия удовлетворяются тождественно.

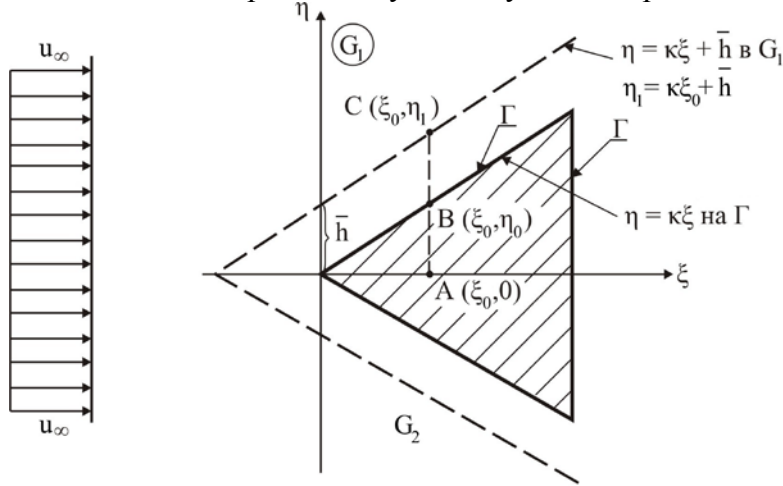


Рис.1. Обтекание клина потоком жидкости (газа) со скоростью  $u_{\infty}$

Легко показать, что при  $N \rightarrow \infty$  ряды для  $\bar{u}$  и  $\bar{v}$  сходятся, например, по Даламберу при  $d > 1$  и ограниченных  $|A_{\alpha}| \leq M, |B_{\alpha}| \leq M$ . Особо отметим, что найденные выражения для  $\bar{u}$  и  $\bar{v}$  тождественно удовлетворяют уравнению неразрывности.

Задачу обтекания произвольных плоских тел вязким потоком жидкости, занимающих замкнутую область  $\tilde{G}$  будем решать методом взвешенных невязок, в частности, методом коллокаций [5,6]. Для этого составим невязки в области  $G_1 = G \setminus \tilde{G}$ , так и на границе обтекаемого тела  $\Gamma$ , например, заданную параметрически  $\Gamma = \{(\xi, \eta) : \xi = \xi(t), \eta = \eta(t)\}$ :

$$-Q_{\tilde{F}} \equiv \tilde{F}_{\eta}(\Delta \tilde{F})_{\xi} - \tilde{F}_{\xi}(\Delta \tilde{F})_{\eta} - \Delta \Delta \tilde{F} \quad \text{в } G_1, \quad (5)$$

$$Q_{\tilde{u}} \equiv \tilde{F}_{\eta} \quad \text{на } \Gamma, \quad (6)$$

$$Q_{\tilde{v}} \equiv \tilde{F}_{\xi} \quad \text{на } \Gamma. \quad (7)$$

В МВН предполагается, что невязки можно устремить к нулю в смысле взвешенного среднего значения:

$$\iint_{G_1} Q_{\tilde{F}} W_{\alpha} d\xi d\eta + \int_{\Gamma} Q_{\tilde{U}} W_{\alpha} ds + \int_{\Gamma} Q_{\tilde{V}} W_{\alpha} ds = 0, \quad (8)$$

где  $W_{\alpha}(\xi, \eta)$ ,  $\alpha = (-1, -N)$  – весовые функции.

Весовые функции надо выбирать надлежащим образом. Например, в методе Галеркина весовые функции выбираются совпадающими с базисными функциями. После определения коэффициентов  $A_{\alpha}$  из системы (8) найдем вихревую напряженность  $\overline{\omega} = 0,5(\overline{u}_{\xi} - \overline{v}_{\eta})$ . Если весовая функция имеет вид дельта-функции  $W_{\alpha} = \delta(\xi - \xi_{\alpha}, \eta - \eta_{\alpha})$ ,  $\alpha = (-1, -N)$ , где  $\delta$  – дельта-функция, а  $\xi_{\alpha}, \eta_{\alpha}$  – координаты точек, лежащие в  $G_1$  и на  $\Gamma$ , то получается формулировка метода коллокаций. При решении этим методом невязки в  $G_1$  и на  $\Gamma$  приравниваются к нулю.

Подставим обобщенное решение (4) в уравнение (2), далее после сокращения нелинейных членов и упрощений получим (с учетом, что  $\text{sgn}^2 \eta = \text{sgn}^2 \xi = 1$  при  $\xi \neq 0, \eta \neq 0$ ):

$$\begin{aligned} & \text{sgn} \eta \cdot \text{sgn} \xi \left\{ (c_1^4 - c_0^4) \left[ \sum_{\alpha=1}^N \frac{B_{\alpha}}{g^{\alpha+1}} \cdot \sum_{\alpha=1}^N \frac{A_{\alpha}(\alpha+1)(\alpha+2)}{f^{\alpha+3}} - \sum_{\alpha=1}^N \frac{A_{\alpha}}{f^{\alpha+1}} \cdot \sum_{\alpha=1}^N \frac{B_{\alpha}(\alpha+1)(\alpha+2)}{g^{\alpha+3}} \right] - \right. \\ & \quad \left. - \left[ (c_1^3 + c_0^2 c_1) \sum_{\alpha=1}^N \frac{A_{\alpha}(\alpha+1)(\alpha+2)}{f^{\alpha+3}} + (c_0^3 + c_1^2 c_0) \sum_{\alpha=1}^N \frac{B_{\alpha}(\alpha+1)(\alpha+2)}{g^{\alpha+3}} \right] \right\} = \\ & = (c_1^2 + c_0^2)^2 \left[ \sum_{\alpha=1}^N \frac{A_{\alpha}(\alpha+1)(\alpha+2)(\alpha+3)}{f^{\alpha+4}} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{B_{\alpha}(\alpha+1)(\alpha+2)(\alpha+3)}{g^{\alpha+4}} \right] \quad \text{в } G_1, \end{aligned} \quad (9)$$

где  $f = c_1|\xi| + c_0|\eta| + d$ ,  $g = c_0|\xi| + c_1|\eta| + d$ ,  $A_{\alpha}, B_{\alpha}$  – коэффициенты, подлежащие определению.

*Пример 1.* Рассмотрим плоское с учетом вязкости вихревое ( $\omega_0 \neq 0$ ) обтекание клина (рисунок). Решим задачу методом коллокаций. Система уравнений для трех неизвестных коэффициентов  $A_1, B_1, A_2$  с условием прилипания жидкости на  $\Gamma$ :  $\overline{u} = 0, \overline{v} = 0$  и уравнения (9) в  $G_1$  в локальных точках  $B_0(\xi_0, \eta_0)$  и  $C_0(\xi_0, \eta_1)$  при следующих данных:  $c_0 = 1, c_1 = 2, d = 10, \eta_0 = k\xi_0 = 1, k = 1, \xi_0 = 1, \bar{h} = hu_{\infty}/v = 2, \eta_1 = k\xi_0 + \bar{h} = 3, f|_{\Gamma} = 13, g|_{\Gamma} = 13, f|_{G_1} = 15, g|_{G_1} = 17$  запишется при  $\xi > 0, \eta > 0$ ):

$$A_1 c_0 / f^2 + B_1 c_1 / g^2 + A_2 c_0 / f^3 = 1 \quad \text{на } \Gamma, \quad (10)$$

$$A_1 c_1 / f^2 + B_1 c_0 / g^2 + A_2 c_1 / f^3 = 0, \quad \text{на } \Gamma \quad (11)$$

$$\begin{aligned} & (c_1^4 - c_0^4) \left[ 6A_1 B_1 \frac{(g^2 - f^2)}{g^4 f^4} + 6A_2 B_1 \frac{(2g^2 - f^2)}{g^4 f^5} \right] - \\ & - (c_1^3 + c_0^2 c_1) 6(A_1 / f^4 + 2A_2 / f^5) - (c_0^3 + c_1^2 c_0) 6B_1 / g^4 = \\ & = (c_1^2 + c_0^2)^2 (24A_1 / f^5 + 60A_2 / f^6 + 24B_1 / g^5) \quad \text{в } G_1. \end{aligned} \quad (12)$$

Из уравнений (10), (11) в виду их структуры легко находим  $B_1 = c_1 g^2 / (c_1^2 - c_0^2)$ . Подставив  $B_1$  в уравнения (10) и (11), получим два одинаковых уравнения относительно неизвестных  $A_1$  и  $A_2$ . Объединяя одно из уравнений с уравнением (12), предварительно подставив  $B_1$  в уравнение (12), получим линейную систему относительно неиз-

вестных  $A_1$  и  $A_2$ , которая единственным образом разрешается аналитически. Важно отметить, что при большем числе неизвестных  $A_\alpha$  и  $B_\alpha$  система линейаризуется и также имеет единственное решение. Отсюда следует: решение системы (10)–(12) существует и единственно.

Таким образом,  $A_1 = -48,0125$ ,  $B_1 = 112,6667$ ,  $A_2 = -108,1708$ . Тогда решение уравнение Гельмгольца (2) запишется:

$$\tilde{F} = \frac{A_1}{(2|\xi| + |\eta| + 10)} + \frac{B_1}{(|\xi| + 2|\eta| + 10)} + \frac{A_2}{2(2|\xi| + |\eta| + 10)^2} + |\eta|.$$

При  $\xi \geq 0$  (т.е. течение жидкости рассматриваем вниз по потоку от критической точки  $\xi = 0$ ,  $\eta = 0$ ), найдем:

$$\bar{u} = \tilde{F}_\eta = -\frac{A_1 \cdot \operatorname{sgn} \eta}{(2|\xi| + |\eta| + 10)^2} - \frac{2B_1 \cdot \operatorname{sgn} \eta}{(|\xi| + 2|\eta| + 10)^2} - \frac{A_2 \cdot \operatorname{sgn} \eta}{(2|\xi| + |\eta| + 10)^3} + \operatorname{sgn} \eta; \quad (13)$$

$$\bar{v} = -\tilde{F}_\xi = \frac{2A_1 \cdot \operatorname{sgn} \xi}{(2|\xi| + |\eta| + 10)^2} + \frac{B_1 \cdot \operatorname{sgn} \xi}{(|\xi| + 2|\eta| + 10)^2} + \frac{2A_2 \cdot \operatorname{sgn} \xi}{(2|\xi| + |\eta| + 10)^3}. \quad (14)$$

Проверка показывает  $\bar{u}|_\Gamma = \bar{v}|_\Gamma = 0$  с точностью до четырех знаков после запятой в точке  $\xi_0 = 1$ ,  $\eta_0 = k\xi_0 = 1$ . Зная  $\bar{u}$  и  $\bar{v}$ , можно локально найти вихревую напряженность, местный коэффициент сопротивления. Подставим (13), (14) в уравнение Навье-Стокса и после интегрирования найдем давление  $P$ .

*Пример 2.* Пусть  $k \rightarrow 0$ , тогда  $\eta = k\xi \rightarrow 0$  ( $\xi \in [0, \bar{L}]$ , где  $\bar{L} = Lu_\infty / \nu$ ,  $L$  – длина пластины) и клин (рисунок) можно приближенно принять за тонкую пластинку, так как при  $\eta = 0$  решение вдоль пластины для  $\bar{u}$  вырождается, так как  $\operatorname{sgn} 0 = 0$ . Из системы уравнений (10)–(12) найдем неизвестные коэффициенты  $A_1, B_1, A_2$  при следующих данных:  $c_0 = 0,2$ ;  $c_1 = 0,01$ ;  $d = 10$ ;  $\xi_0 = (x_0 u_\infty / \nu) = 500$ ;  $\eta_0 = k\xi_0 \rightarrow 0$  ( $x_0 = 0,0931$  м;  $\nu = (\mu / \rho) = 14,9 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с;  $u_\infty = 0,08$  м/с). В области  $G_1$ :  $\eta_1 = k\xi_0 + \bar{h}$ ;  $\bar{h} = (hu_\infty / \nu) = 100$ ;  $h = 0,018625$  м.

Геометрические и физические параметры близки к параметрам, которые брал Ханзен при постановке эксперимента [7]. Итак, при значениях  $g|_\Gamma = 110$ ,  $f|_\Gamma = 15$ ;  $g|_{G_1} = 111$ ;  $f|_{G_1} = 35$ :  $A_1 = 533,23559$ ;  $A_2 = 24876,77777$ ;  $B_1 = -3025,58115$  решение уравнения Гельмгольца в  $G_1 \cup \Gamma$  запишется следующим образом:

$$\tilde{F} = \frac{A_1}{(0,01|\xi| + 0,2|\eta| + 10)} + \frac{B_1}{(0,2|\xi| + 0,01|\eta| + 10)} + \frac{A_2}{2(0,01|\xi| + 0,2|\eta| + 10)^2} + |\eta|.$$

Решение для продольной  $\bar{u}$  и поперечной составляющей скорости  $\bar{v}$  примут вид при  $\xi \geq 0$  и  $\eta \geq 0$ :

$$\bar{u} = \frac{-0,2A_1 \cdot \operatorname{sgn} \eta}{(0,01|\xi| + 0,2|\eta| + 10)^2} - \frac{0,01B_1 \cdot \operatorname{sgn} \eta}{(0,2|\xi| + 0,01|\eta| + 10)^2} - \frac{0,2A_2 \cdot \operatorname{sgn} \eta}{(0,01|\xi| + 0,2|\eta| + 10)^3} + \operatorname{sgn} \eta;$$

$$\bar{v} = \frac{0,01A_1 \cdot \operatorname{sgn} \xi}{(0,01|\xi| + 0,2|\eta| + 10)^2} + \frac{0,2B_1 \cdot \operatorname{sgn} \xi}{(0,2|\xi| + 0,01|\eta| + 10)^2} + \frac{0,01A_2 \cdot \operatorname{sgn} \xi}{(0,01|\xi| + 0,2|\eta| + 10)^3}.$$

Проверка показывает, что  $\bar{u}|_\Gamma$  и  $\bar{v}|_\Gamma$  близки к нулю в точке  $\xi_0 = 500$ ,  $\eta_0 \rightarrow 0$  ( $\operatorname{sgn} \eta = 1$  при  $\eta > 0$ ;  $\operatorname{sgn} \eta = 0$  при  $\eta = 0$ ). Найдем при значении  $\eta \geq 0$ :

$$\tau = \tau_\eta = \frac{0,08A_1 \cdot \operatorname{sgn}^2 \eta}{(0,01|\xi| + 0,2|\eta| + 10)^3} + \frac{0,0002B_1 \cdot \operatorname{sgn}^2 \eta}{(0,2|\xi| + 0,01|\eta| + 10)^3} + \frac{0,12A_2 \cdot \operatorname{sgn}^2 \eta}{(0,01|\xi| + 0,2|\eta| + 10)^4},$$

где  $\tau = \tau / \rho u_\infty^2$ . Тогда на пластинке в точке  $\xi_0 = 500$  ( $x_0 = 0,0931$  м), местный коэффициент трения равен  $c_f = \tau / \frac{\rho u_\infty^2}{2} = 2\tau_\eta = 0,09266$ .

Местный коэффициент давления в этой точке найдется из интегрирования первых двух уравнений Навье-Стокса (1). Об этом было сказано ранее. В работе [7] приведены экспериментальные результаты Ханзена и теоретические результаты Блазиуса профиля скоростей  $u = u / u_\infty$  обтекания пластинки вязким ламинарным потоком воздуха в продольном направлении, которые прекрасно совпадают при  $x_0 \geq 0,03$  м ( $x_0$  – расстояние от переднего края пластинки).

В таблице сравним экспериментальные результаты Ханзена и теоретические результаты Блазиуса при обтекании пластинки с результатами, полученными в данной работе при значении  $\xi_0 = (x_0 u_\infty / \nu) = 500$  ( $x_0 = 0,0931$  м;  $u_\infty = 0,08$  м/с;  $\nu = 14,9 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с).

Таблица

|                                                         |             |                           |                           |     |          |
|---------------------------------------------------------|-------------|---------------------------|---------------------------|-----|----------|
| $y = \zeta \sqrt{\frac{x_0 \nu}{u_\infty}}, (\text{м})$ | $\zeta = 0$ | $\zeta = 1$               | $\zeta = 4,3850$          | ... | $\infty$ |
|                                                         | $y = 0$     | $y = 9,125 \cdot 10^{-3}$ | $y = 1,825 \cdot 10^{-2}$ |     |          |
| $u(\zeta)$                                              | 0           | 0,32979                   | 0,97120                   |     | 1        |
| $y = \frac{\eta \nu}{u_\infty}, (\text{м})$             | $\eta = 0$  | $\eta = 50$               | $\eta = 100$              | ... | $\infty$ |
|                                                         | $y = 0$     | $y = 9,125 \cdot 10^{-3}$ | $y = 1,825 \cdot 10^{-2}$ |     |          |
| $u(\eta, \xi_0)$                                        | 0           | 0,37584                   | 0,97412                   |     | 1        |

Из таблицы видно, что полученные результаты хорошо совпадают с результатами Ханзена, Блазиуса.

#### Список литературы

1. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя / Г. Шлихтинг. – М.: Наука. – 1974. – 711 с.
2. Дружинин Г.В. Базисные функции в приближенных решениях краевых задач / Г.В. Дружинин, И.М. Закиров, Н.М. Бодунов. – Казань: Изд-во Фэн. – 2000. – 376 с.
3. Дружинин Г.В. Применение базисных функций для решения задачи плоского безвихревого обтекания произвольного профиля вязким потоком жидкости / Г.В. Дружинин, Н.М. Бодунов // Моделирование неравновесных систем: Материалы IX Всероссийского семинара / Ред. В.В. Слабко. Красноярск: ИВМ СО РАН. – 2006. С. 71–72.
4. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т.1 / Л.И. Седов. – М.: Наука. – 1983. – 528 с.
5. Вержбицкий В.М. Основы численных методов / В.М. Вержбицкий. – М.: Высшая школа, 2005. – 840 с.
6. Бодунов Н.М. Моделирование в задачах производства летательных аппаратов / Н.М. Бодунов, Г.В. Дружинин. Казань: Изд-во КНИТУ-КАИ. – 2015. – 328 с.
7. Лойцянский Л.Г. Ламинарный пограничный слой / Л.Г. Лойцянский. Наука – 1962. – 480 с.

## ВОПРОСЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛООБМЕНА В НАСАДКАХ РЕГЕНЕРАТОРОВ

В.С. Казаков, В.А. Шмиголь

Брянский государственный технический университет,

*[pvk\\_mail@list.ru](mailto:pvk_mail@list.ru)*

Анализ современных путей повышения энергетической эффективности агрегатов металлургического производства показывает перспективность использования контактных теплообменных аппаратов, обеспечивающих более глубокую утилизацию тепла. Эффективность создания или модернизации новых схем и конструкций теплообменников на практике должна подтверждаться экспериментальными исследованиями, которые являются экономически затратными. Поэтому актуальной технической задачей становится использование различных методов моделирования при изучении теплоаэродинамических процессов в сложных теплоэнергетических системах.

В существующих конструкциях теплообменников-рекуператоров возможно передать до 40 % теплоты воздуху от дымовых газов, выходящих из рабочей камеры печи. Для более глубокой утилизации необходима развитая поверхность теплообмена, которая может обеспечить возврат в печь до 85% теплоты уходящих газов [1].

Традиционно, в классических системах утилизации тепла металлургических печей, используется кирпичная насадка, массогабаритные показатели которой в настоящее время не удовлетворяют техническим условиям, предъявляемым к современным компактным теплообменным аппаратам рекуперативного действия [2].

Применение других видов насадок требует предварительного исследования, обоснования и увязки с особенностями технологического процесса. Так при работе шаровых и сотовых насадок происходят увеличение потерь давления, загрязнение каналов запыленной средой и снижение механической прочности. Значительно перспективнее в этом отношении использование трубчатой насадки, которая позволяет глубоко утилизировать теплоту дымовых газов и не имеет вышеперечисленных недостатков. Однако внедрение систем регенерации на основе трубчатых поверхностей ограничивается рабочей температурой жаропрочного материала труб.

Ниже представлено изучение нестационарных процессов переноса тепла в насадках регенераторов на основе математического моделирования режимов нагрева и охлаждения кускового слоя при заданных краевых условиях и условиях однозначности, что позволяет исследовать их тепловую работу и давать оценку эффективности использования конструкции и выбранного режима функционирования теплообменника.

Существующие описания процессов нагрева и охлаждения неподвижного дисперсного слоя насадки продуктами сгорания топливно-воздушной смеси могут базироваться на различных подходах к решению задачи нестационарного теплообмена. При этом, учитывая такие факторы как массивность насадки, тепловые потери через ограждения камеры, продольный перенос теплоты теплопроводностью, влияние теплообмена в наднасадочном пространстве, можно существенно приблизить результаты исследования математической модели к практическим материалам эксперимента.

Объектом исследования является система регенерации тепла нагревательной печи металлургического производства, заполненная корундовой насадкой из шаров малого диаметра (около 20 мм). Насадка укладывается в камеру регенератора на газораспределительную решетку. Актуальность и перспективность использования данного огнеупорного материала в системе утилизации нагревательного отделения газохода подтверждается эксплуатационными и тепловыми показателями [2]:

- увеличение коэффициента использования теплоты топлива - с 0,55 до 0,75;
- экономия топлива, в среднем, - до 30%;

- высокая стойкость насадки к циклическим изменениям температур в дымовой (газовый) и воздушный периоды;
- высокотемпературный нагрев воздуха - около  $1000^{\circ}\text{C}$ ;
- повышение эксплуатационной стойкости и надежности системы регенерации металлургической печи;
- уменьшение материальных затрат на «холодный» ремонт газохода.

Математическое моделирование задачи нагрева неподвижного слоя кускового материала, имеющего сложную структуру каналов, при продувании его высокотемпературными газами базируется на расчетных методах [3]. При описании теплообмена в слое насыпного материала принимаются следующие допущения:

- процесс теплопереноса в монодисперсном слое частиц в периоды нагрева и охлаждения подчиняется закону Ньютона-Рихмана, а передача тепла между элементами слоя теплопроводностью отсутствует;
- коэффициент теплоотдачи в период теплосмен изменяется по сечению и высоте насыпного слоя, при этом теплофизические свойства материала насадки и газов зависят от их средней температуры в слое;
- поток теплоносителя равномерно распределен по сечению насадки, а передача тепла через ограждения камеры при его движении не происходит (адиабатная система).

Сложность моделирования тепловой работы циклического теплообменника заключается в выборе переменных граничных условиях, которые связаны с периодом томления заготовок в рабочей камере, а именно, вследствие применения импульсного энергоснабжения (отопления) металлургической печи.

На рисунке 1 представлена физическая модель расчетной схемы нагрева (а) и охлаждения (б) неподвижного монодисперсного насыпного слоя, характеризующегося величинами порозности слоя  $\varepsilon$  и насыпной плотности  $\rho_{\text{нас}}$ .

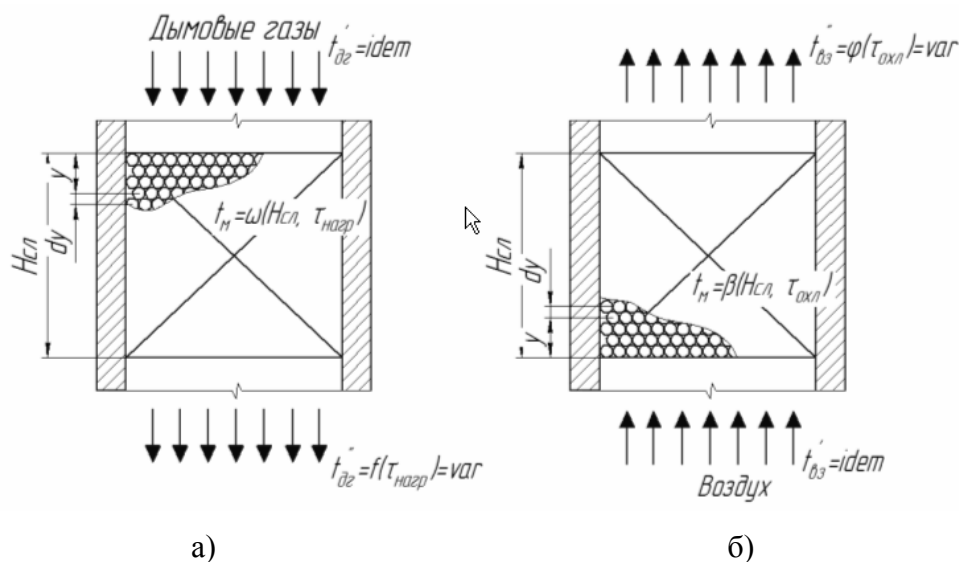


Рис. 1. Расчетная схема нагрева (а) и охлаждения (б) неподвижного кускового слоя из шаров одинакового диаметра

Передача тепловой энергии в подогревателе воздуха регенеративного типа осуществляется путем конвекции и излучения от среды с более высокой температурой к нагреваемой среде с помощью заполненной материалом неподвижной насадки с заданным тактом теплосмен. Экспериментальные исследования тепловой работы систем с зернистым слоем [4] показывают важную роль влияния на теплоперенос таких факторов как структура засыпки слоя, диаметр элементов насадки, концентрация излучаю-

щих газов. При этом необходимое условие учета переноса тепла лучеиспусканием в насыпном слое определяется областью температур газовой среды выше  $400^{\circ}\text{C}$ . Например, в результате расчетного исследования регенератора нагревательной печи, отапливаемой доменным газом, получено, что доля радиационной составляющей, при сравнительно высокой средней температуре дымовых газов ( $1200^{\circ}\text{C}$ ) и диаметре корундовых шаров 20 мм, не превышает 3..5%.

Математическая модель нестационарных циклических процессов теплообмена в насадке регенератора с учетом принятых допущений включает следующее описание.

А. В период аккумуляции тепла насадкой происходит снижение теплосодержания дымовых газов и передача части тепловой энергии неподвижному слою шаров. Для этих условий система дифференциальных уравнений теплообмена имеет вид:

$$-\alpha_{V.нагр} \cdot (t_{\partial z} - t_{м.нагр}) = c_{\partial z} \cdot \rho_{\partial z} \cdot \left[ w_{\partial z} \cdot \left( \frac{\partial t_{\partial z}}{\partial y} \right) + \varepsilon \cdot \left( \frac{\partial t_{\partial z}}{\partial \tau_{нагр}} \right) \right] \quad (1)$$

$$\alpha_{V.нагр} \cdot (t_{\partial z} - t_{м.нагр}) = c_{м.нагр} \cdot \rho_{нас} \cdot \left( \frac{\partial t_{м.нагр}}{\partial \tau_{нагр}} \right), \quad (2)$$

где  $t_{\partial z}, t_{м.нагр}$  – средние температуры дымовых газов и материала слоя в период его нагрева,  $^{\circ}\text{C}$ ;

$\alpha_{V.нагр}$  – объемный коэффициент теплоотдачи в период нагрева насадки,  $\text{кВт}/(\text{м}^3 \cdot ^{\circ}\text{C})$ ;

$c_{\partial z}$  – удельная (массовая) теплоемкость дымовых газов,  $\text{кДж}/(\text{кг} \cdot \text{м}^3)$ ;

$\rho_{\partial z}$  – плотность дымовых газов,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;

$c_{м.нагр}$  – удельная теплоемкость материала насадки в период нагрева,  $\text{кДж}/(\text{кг} \cdot \text{м}^3)$ ;

$\rho_{нас} = \rho_m \cdot (1 - \varepsilon)$  – насыпная плотность слоя из шаров,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;

$\varepsilon$  – порозность слоя;

$\rho_m$  – плотность материала насадки,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;

$w_{\partial z} = \varepsilon \cdot v_{\partial z}$  – скорость дымовых газов, отнесенная к свободному сечению слоя,  $\text{м}/\text{с}$ ;

$v_{\partial z}$  – скорость дымовых газов в поровых каналах слоя,  $\text{м}/\text{с}$ ;

$y$  – координата, взятая от места входа газа до рассматриваемого элементарного слоя,  $\text{м}$ ;

$\tau_{нагр}$  – период нагрева насадки,  $\text{с}$ .

Б. Система дифференциальных уравнений, описывающих теплообмен в период охлаждения насадки, имеет вид:

$$\alpha_{V.охл} \cdot (t_{м.охл} - t_{\partial z}) = c_{\partial z} \cdot \rho_{\partial z} \cdot \left[ w_{\partial z} \cdot \left( \frac{\partial t_{\partial z}}{\partial y} \right) + \varepsilon \cdot \left( \frac{\partial t_{\partial z}}{\partial \tau_{охл}} \right) \right] \quad (3)$$

$$\alpha_{V.охл} \cdot (t_{м.охл} - t_{\partial z}) = -c_{м.охл} \cdot \rho_{нас} \cdot \left( \frac{\partial t_{м.охл}}{\partial \tau_{охл}} \right), \quad (4)$$

где  $t_{вз}$ ,  $t_{м.охл}$  – средняя температура воздуха и материала слоя в период охлаждения, °C;

$\alpha_{V.охл}$  – объемный коэффициент теплоотдачи в период охлаждения насадки,  $кВт/(м^3 \cdot °C)$ ;

$c_{вз}$  – удельная (массовая) теплоемкость воздуха,  $кДж/(кг \cdot м^3)$ ;

$\rho_{вз}$  – плотность воздуха,  $кг/м^3$ ;

$c_{м.охл}$  – удельная теплоемкость материала в период охлаждения,  $кДж/(кг \cdot м^3)$ ;

$w_{вз} = \varepsilon \cdot v_{вз}$  – скорость воздуха, отнесенная к свободному сечению, м/с;

$v_{вз}$  – скорость воздуха в поровых каналах слоя, м/с;

$\tau_{охл}$  – период охлаждения насадки, с.

Коэффициенты теплоотдачи конвекцией при течении газа (воздуха) через плотный слой шаров рассчитываются по критериальным зависимостям [3]:

$$Nu_{сл} = 0,106 \cdot Re_z \quad \text{при } Re_z \leq 200; \quad Nu_{сл} = 0,61 \cdot Re_z^{2/3} \quad \text{при } Re_z > 200,$$

где  $Nu_{сл}$  и  $Re_z$  – критерии подобия Нуссельта и Рейнольдса для среды, контактирующей с насадкой.

Для упрощения записи и решения системы дифференциальных уравнений (1 - 4) целесообразно использовать следующие относительные переменные (комплексы записаны в общем виде для периодов нагрева и охлаждения насыпного слоя насадки):

$$Z = \frac{k_V \cdot \tau}{c_M \cdot \rho_{нас}}; \quad Y = \frac{k_V \cdot y}{C_z \cdot w_{z0}}; \quad g = \frac{t'_M - t_M}{t_M - t_z}; \quad \theta = \frac{t'_M - t_z}{t_M - t_z}, \quad (5)$$

где  $Z$  – безразмерное время;

$Y$  – безразмерная высота слоя;

$g$  – относительная температура материала насадки;

$\theta$  – относительная температура газа (воздуха);

$$k_V = \left[ \frac{1}{\alpha_V} + \frac{R_{ш}^2}{9 \cdot \lambda_M} \right]^{-1} \text{ – объемный коэффициент теплопередачи, } кВт/(м^3 \cdot °C);$$

$R_{ш} = d_{ш} / 2$  – радиус элемента слоя (шаровой насадки), м;

$\lambda_M$  – теплопроводность материала насадки,  $кВт/(м \cdot °C)$

$C_z$  – удельная (объемная) теплоемкость дымовых газов,  $кДж/(м^3 \cdot °C)$ ;

$w_{z0}$  – скорость газа в свободном сечении шахты регенератора, отнесенная к нормальным физическим условиям, м/с;

$t'_M$  – средняя по объему температура материала в начале нагрева, °C;

$t'_z$  – средняя температура газа на входе в слой насадки, °C.

Таким образом, математическая модель описания задачи нагрева и охлаждения насыпного монодисперсного слоя шаров в регенераторе может быть получена в виде обобщенных зависимостей:

$$\begin{cases} \frac{\partial t_M}{\partial Z} = t_Z - t_M; \\ \frac{\partial t_Z}{\partial Y} = t_M - t_Z. \end{cases} \quad (6)$$

Система уравнений (6) должна быть дополнена следующими начальными и граничными условиями:

$$y = 0 (Y = 0) \rightarrow t_{\partial Z} = t'_{\partial Z} (\theta = 0), \quad (7)$$

$$y = 0 (Y = 0) \rightarrow t_{\partial Z} = t'_{\partial Z} (\theta = 0), \quad (8)$$

$$\tau = 0 (Z = 0) \rightarrow t_M = t'_M (\vartheta = 0). \quad (9)$$

Математическая модель решения задачи, описанная уравнениями (6 - 9), позволяет определить относительную температуру материала слоя и относительную температуру газа. Для этого использованы расчетные рекомендации [3, 5].

Изменение температуры материала насадки и газа можно представить в интегральной форме:

$$\begin{aligned} \vartheta &= e^{-Y} \cdot \int_0^Z J_0(2 \cdot \sqrt{Y \cdot Z}) e^{-Z} \cdot dZ, \\ \theta &= 1 - e^{-Z} \cdot \int_0^Y J_0(2 \cdot \sqrt{Z \cdot Y}) e^{-Y} \cdot dY, \end{aligned}$$

где  $J_0(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{x}{2}\right)^{2 \cdot k} \cdot \left(\frac{1}{[k!]^2}\right)$  - функция Бесселя первого рода, нулевого порядка, мнимого аргумента ( $x$ ).

После подстановки функции Бесселя в уравнения, выполнения операций интегрирования и упрощения результатов была получена следующая система выражений для определения относительных температур в форме, удобной для последующего компьютерного моделирования и анализа:

$$\vartheta = e^{-Y} \cdot \left[ \sum_{i=0}^n \left( \left( 1 - e^{-Z} \cdot \sum_{k=0}^i \frac{Z^k}{k!} \right) \cdot \frac{Y^i}{i!} \right) \right], \quad (10)$$

$$\theta = 1 - e^{-Z} \cdot \left[ \sum_{i=0}^n \left( \left( 1 - e^{-Y} \cdot \sum_{k=0}^i \frac{Y^k}{k!} \right) \cdot \frac{Z^i}{i!} \right) \right], \quad (11)$$

где  $k$  и  $n$  - количество итераций, влияющее на точность вычисления.

Решение уравнений (10, 11) позволяет рассчитать характеристики нестационарного процесса теплопереноса в насадке регенератора.

Для получения изменения во времени температуры газа задается значение  $\tau$  и определяются критерии времени  $Z$  и высоты  $Y$ . С помощью этих данных рассчитываются по зависимостям (11, 5) значения  $\theta$  и  $t_Z$  на рассматриваемом участке. При необходимости нахождения значений температур материала насадки задается величина  $Z$  и, меняя критерий  $Y$ , определяется, используя зависимости (10, 5), распределение температур по высоте слоя в рассматриваемый момент времени.

Математическая модель задачи нестационарного теплообмена, описанная выше, не учитывает начальное распределение температуры материала по высоте слоя насадки и пригодна для теплового моделирования регенератора в период его разогрева из холодного состояния. Влияние термической массивности элементов слоя на общий тепловой баланс определяется объемным коэффициентом теплопередачи. Поэтому приближенный метод расчета позволяет определить температурные поля с допустимой для инженерной практики погрешностью, не прибегая к сложным аналитическим вычислениям.

В [6] предложены зависимости для расчета характера температурных полей при работе регенератора в дымовой и воздушный периоды, учитывающие линейный закон неравномерности распределения температуры материала насадки по высоте слоя в начальный момент времени:

$$t_z = \sum_{i=1}^n [(a_i + b_i \cdot Y_H) \cdot (\theta(Y_H - Y_i, Z) - \theta(Y_H - Y_{i-1}, Z))], \quad (12)$$

$$t_M = (a_i + b_i \cdot Y_H) \cdot e^{-Z} + \sum_{i=1}^n [(a_i + b_i \cdot Y_H) \cdot (\vartheta(Y_H - Y_i, Z) - \vartheta(Y_H - Y_{i-1}, Z))], \quad (13)$$

где  $i$  – номер участка насадки ( $i \in [1, n]$ );

$a_i, b_i$  – коэффициенты линейного уравнения;

$Y_H$  – относительная высота насадки, соответствующая крайнему слою.

Значения величин относительной высоты и времени в узловых слоях рассчитываются по зависимости (5). Точность расчетов задается числом разбиений насадки на отдельные участки. Линейный вид зависимости температуры материала насадки по высоте регенератора упрощает интегрирование соответствующих функциональных рядов.

Математическая модель в системе относительных переменных (5, 10 - 11) и (5, 12 - 13) совместно с краевыми условиями дифференциальной задачи (7 - 9) позволяют производить расчеты распределения температурных полей в материале и газе (воздухе) в период разогрева регенератора (холостой ход), а также при нагреве и охлаждении слоя насадки в дымовой (газовый) и воздушный периоды, обеспечивая достаточно высокую для инженерной практики точность решения.

#### Список литературы

1. Тебеньков, Б.П. Рекуператоры для промышленных печей / Б.П. Тебеньков. - М.: Металлургия, 1975. - 296 с.
2. Губинский, В.И. Актуальные задачи реконструкции нагревательных печей / В.И. Губинский // Металлургическая теплотехника: сб. науч. тр. НМетАУ: в 2-х кн. Днепропетровск, 2005. Кн. 1. С. 149-156.
3. Китаев, Б.И. Теплообмен в доменных печах / Б.И. Китаев, Ю.Г. Ярошенко, Б.Л. Лазарев. - М.: Металлургия, 1966. - 357 с.
4. Аэров, М.Э. Гидравлические и тепловые основы работы аппаратов со стационарным и кипящим зернистым слоем / М.Э. Аэров, О.М. Тодес. - Л.: Химия, 1968. - 512 с.
5. Телегин, А.С. Термодинамика и тепломассоперенос: Учебник для вузов / А.С. Телегин, В.С. Швыдкий, Ю.Г. Ярошенко. - М.: Металлургия, 1980. - 264 с.
6. Койфман, А.А. Моделирование нагрева насадки доменного воздушнонагревателя, работающего под давлением / А.А. Койфман, А.И. Симкин, А.А. Томаш // Вестник Приазовского государственного технического университета: Сб. науч. тр. - Ч. 2. - г. Мариуполь. - 2009. - Вып. 19. - С. 203-206.

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ СОЛНЕЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СФЕРИЧЕСКОМ ПЛАЗМЕННОМ ШАРЕ, ВРАЩАЮЩЕМСЯ ВОКРУГ ОСИ СИММЕТРИИ.

Н.И. Косарев

Сибирский федеральный университет,  
Институт цветных металлов и материаловедения, кафедра фундаментального  
естественнонаучного образования, *kosarev\_nikolai@mail.ru*

В работе методом численного моделирования исследуется влияние вращения сферической кальциевой плазмы на поглощение солнечного излучения в резонансной линии на длине волны  $\lambda_0 = 397\text{ нм}$ . Геометрия задачи представлена на рисунке 1. Плазменный шар радиуса  $R_0$ , состоящий из ионов кальция, облучается солнечным излучением, которое поглощается и рассеивается ионами в резонансной линии  $^2S_{1/2} \leftrightarrow ^2P_{1/2}$  ( $\lambda_0 = 397\text{ нм}$ ). Вращение шара с угловой скоростью  $\Omega_0 = V_0 / R_0$  происходит относительно оси Y, рис.1, против часовой стрелки, где  $V_0$  – линейная скорость движения точек среды, лежащих на окружности, радиуса  $R_0$ , рисунок 1 б). Тогда в каждой точке среды центральной прицельной плоскости, находящейся на расстоянии  $r$  от центра шара, линейная скорость движения ионов по окружности радиуса  $|r|$ , составляет

$$v(r) = \frac{V_0}{R_0} \cdot r. \quad (1)$$

При движении вещества уширенная эффектом Доплера спектральная линия формируется тепловой и макроскопической скоростью ионов. В этом случае контур линии поглощения имеет вид [1–7]

$$\Phi(x - \mu W, r) = \pi^{-1/2} \delta^{-1}(r) \cdot \exp\{(-[x - \mu W]^2 / \delta^2(r))\}, \quad (2)$$

где  $x = (v - v_0) / \Delta v_D$ ,  $v_0$  – центральная частота линии для неподвижной среды;  $\Delta v_D = v_0 v_T / c$  – доплеровская ширина линии;  $W = v(r) / v_T$ ,  $v(r)$  – модуль линейной скорости движения вещества в точке  $r$ ,  $v_T$  – тепловая скорость ионов;  $\mu = \cos \theta$ ,  $\theta$  – угол между ионной скоростью и направлением рассеяния фотона; коэффициент  $\delta(r) = (\Delta v_D + |v(r) / \lambda_0|) / \Delta v_D$  зависит от температуры и скорости движения среды в заданной точке  $r$ ,  $\lambda_0 = c / \nu_0$  – длина волны,  $c$  – скорость света. В произвольной точке шара  $r$  введем спектральную интенсивность излучения  $I(r, \theta, \phi, x, t)$ , формируемую солнечным светом и внутренними источниками фотонов в сферическом облаке. Интенсивность  $I(r, \theta, \phi, x, t)$  в каждой точке трехмерного шара зависит от времени ( $t$ ), частотной ( $x$ ) и угловых ( $\theta, \phi$ ) переменных. Для определения  $I(r, \theta, \phi, x, t)$  используем уравнение переноса излучения в лучевой форме [8–9]

$$\frac{dI}{d\tau} = \Phi(x - \mu W, r) \cdot [S - I]. \quad (3)$$

в котором  $d\tau = \chi(r, t) ds$  бесконечно малое приращение оптической толщины вдоль пути фотона  $ds$  в направлении, определяемом углами  $\theta, \phi$ , а  $\chi$  и  $S$  – коэффициенты поглощения и функция источников (см. формулу (4)).

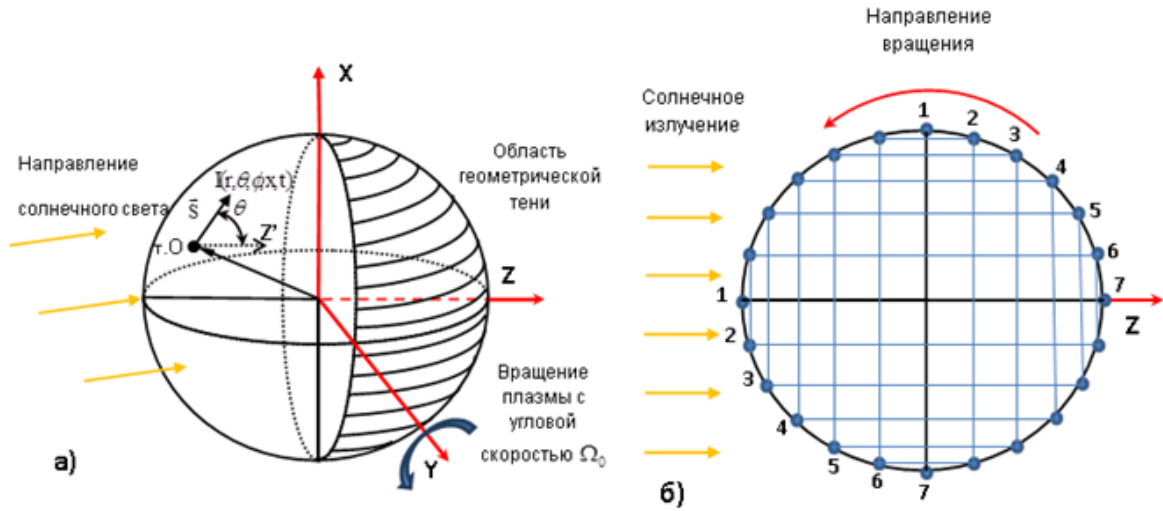


Рис. 1. Геометрия вращающегося плазменного шара – а) и шаблон численной сетки центральной прицельной плоскости – б), проходящей через оси XZ.

В формуле (3) функция источников  $S = \eta(r, t) / \chi(r, t)$  выражается через коэффициенты поглощения  $\chi$  и излучения  $\eta$  на частоте  $\nu_0$ . Эти коэффициенты неявным образом зависят от времени  $t$  через населенности основного  $N_1$  и возбужденного  $N_2$  уровней резонансного перехода и определяются так

$$\chi(r, t) = \alpha_{12} \cdot \left[ N_1(r, t) - \frac{g_1}{g_2} N_2(r, t) \right], \quad \eta(r, t) = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \cdot \alpha_{12} \frac{g_1}{g_2} \cdot N_2(r, t). \quad (4)$$

Здесь  $\alpha_{12} = B_{12} h \nu_0 / (4\pi)$ ;  $g_1$  и  $g_2$  - статвеса уровней,  $h$  – постоянная Планка. Изменение со временем населенностей уровней  $N_1$  и  $N_2$  в единице объема описывается скоростными уравнениями баланса двухуровневых ионов кальция. При учете процессов вынужденного фотовозбуждения, фототушения и спонтанного распада возбужденного уровня, их вид следующий

$$\frac{dN_1(r, t)}{dt} = -B_{12} J(r, t) \cdot N_1(r, t) + (B_{21} J(r, t) + A_{21}) \cdot N_2(r, t), \quad (5)$$

$$\frac{dN_2(r, t)}{dt} = -(B_{21} J(r, t) + A_{21}) \cdot N_2(r, t) + B_{12} J(r, t) \cdot N_1(r, t). \quad (6)$$

Начальные условия при  $t_0 = 0$  для уравнений (5), (6) имеют, соответственно, вид

$$N_2(r, 0) = 0, \quad N_1(r, 0) = N_0, \quad (7)$$

где  $B_{12}$ ,  $B_{21}$  и  $A_{21}$  коэффициенты Эйнштейна для вынужденного фотовозбуждения, фототушения и спонтанного распада. Условия (7) предполагают, что при  $t_0 = 0$  ионы имеют однородное пространственное распределение и находятся в основном состоянии с концентрацией  $N_0$ . В начальный момент времени введем полную оптическую толщину среды  $\tau_0$  на центральной частоте вдоль диаметра шара  $\tau_0 = 2R_0 \chi(R_0, t_0)$  для покоящейся среды.

В уравнениях (5), (6) коэффициент  $J(r, t)$  есть усреднённая по телесным углам и частоте интенсивность излучения в точке  $r$ , в момент времени  $t$ , которая определяется тройным интегралом

$$J(r, t) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x - \mu W, r, t) I(r, \theta, \phi, x, t) dx. \quad (8)$$

Для его вычисления в каждой пространственной точке, угол  $\theta$  должен изменяться в диапазоне от 0 до  $\pi$  относительно оси  $Z'$ , а угол  $\phi$  при заданном значении угла  $\theta$  охватывает значения от 0 до  $2\pi$  при вращении вектора  $\vec{S}$  (рисунок 1) в точке О, вокруг оси  $Z'$ . Если обозначить за  $\vec{R}$  радиус-вектор облучаемой поверхности шара, то граничные условия для уравнения (3) можно записать в виде

$$I(\vec{R}, \theta, \phi, x, t) = \begin{cases} I_s^0, & \text{если } \theta = \pi, \\ 0, & \text{если } \theta \neq \pi \end{cases}. \quad (9)$$

Число уравнений (5), (6) зависит от количества пространственных узлов, на которое разбивается трехмерный шар. Совместно с уравнением (8) они образуют систему интегро-дифференциальных уравнений. Для вычисления коэффициентов  $J(r, t)$  необходим расчет спектральной интенсивности  $I(r, \theta, \phi, x, t)$  в наборе углов, частот и пространственных узлов. Использовалось формальное решение уравнения переноса в интегральной форме [8 – 9]. Тогда для некоторого отрезка интегрирования МО, по лучевой трассе от точки М к точке О, формальное решение уравнения (3) принимает вид

$$I_0 = I_M \cdot \exp(-\Phi \Delta\tau_M) + \int_0^{\Delta\tau_M} S(\tau) \cdot \exp[-\Phi(\Delta\tau_M - \tau)] d\tau,$$

где оптическая толщина  $\Delta\tau_M = \int_0^M \chi(r, t) ds$ , а значение спектральной интенсивности  $I_0$  в

любой узловой точки О находится через известное значение  $I_M$  в точке М. При вычислении тройного интеграла (8) необходимо учитывать вклад в точку О излучения, проходящего из всего шара. Это предполагает выбор отрезков интегрирования МО, соответствующих всевозможным значениям углов  $\theta, \phi$ . Такая процедура сводится к дискретизации трехмерного шара на систему прицельных плоскостей, параллельных плоскости ХZ, рис.1 а). На рис. 1 б) показана центральная прицельная плоскость, которая лежит в плоскости ХZ, изображение расчетной сетки и направление вращения среды. Все остальные прицельные плоскости параллельны центральной, вращаются с такой же угловой скоростью и имеют аналогичное разбиение площади на пространственные узлы. Сеточные значения спектральной интенсивности для фиксированного момента времени рассчитывались для всего набора прицельных плоскостей, набора частотных и угловых узлов. Затем, интеграл (8) по частотным, угловым и пространственным переменным рассчитывался численно, используя специальным образом выбранные квадратурные формулы [8 – 9].

Теперь, если в каждый момент времени правая часть уравнений (5) и (6) рассчитана, то они представляют собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) вида

$$\frac{dY_i(t)}{dt} = F_i[Y_i(t), t], \quad t \in [0, T], \quad i = 1, 2, 3, \dots, N_D,$$

где  $Y_i(t)$  – значение населенности уровня в  $i$ -ом пространственном узле в момент времени  $t$ ,  $T$  – характерный временной масштаб процесса. Размерность приведенной выше системы уравнений  $N_D$  равна произведению количества ионных уровней на число пространственных узлов трехмерного шара. В силу большой жесткости задачи, система ОДУ решалась по схеме неявных, линейных, многошаговых методов с использо-

ванием алгоритма Адамса и Гира [8 – 9], в котором реализован переменный порядок и шаг интегрирования. Численный алгоритм позволяет рассчитывать населенности двух-уровневых ионов и спектральную интенсивность излучения  $I(r, \theta, \phi, x, t)$  при нестационарном фотовозбуждении ионов излучением, когда его интенсивность зависит от времени, либо от времени зависит угловая скорость вращения шара. В представленной работе расчетные данные соответствуют промежутку времени  $T$  равному 1 сек, для которого процесс фотовозбуждения кальциевого облака солнечным светом уже выходит на стационарный режим и интенсивность  $I(r, \theta, \phi, x, t)$  в зависимости от всех переменных также стабилизируется.

Результаты по поглощению солнечного света вращающимся плазменным шаром получены для оптической толщины шара вдоль диаметра  $\tau_0 = 100$ . Скорости вращения граничных точек центральной прицельной плоскости  $V_0$  (точки, лежащие на окружности радиуса  $R_0$ , рис.1б) не превышали величины  $5 \cdot v_T$ . Приведенные данные соответствуют поглощению кальциевой плазмой солнечного излучения в резонансной линии иона кальция с длиной волны  $\lambda_0 = 397\text{ нм}$ . в центральном сечении шара, рис.1 б). На этом рисунке цифрами 1–7 в верхнем полукруге обозначены точки выхода для излучения, распространяющегося по оптическим трассам, удаленным от центра шара на различное расстояние. Разные оптические трассы, как видно из рис.1 б), соответствуют различным оптическим толщинам для излучения и различным проекциям линейной скорости ионов на данное лучевое направление. Цифры 1–7 нижнего полукруга обозначают точки выхода эмиссионного излучения из среды перпендикулярно направлению солнечного света.

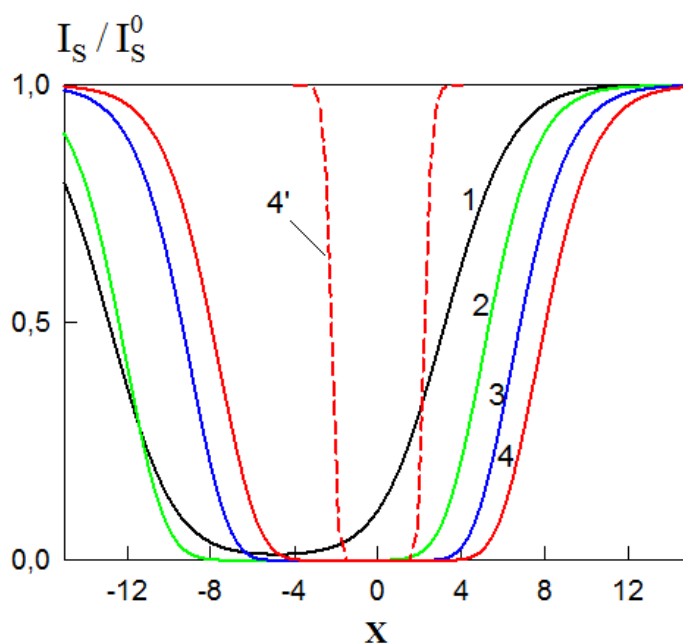


Рис. 2. Частотные зависимости солнечного излучения, проходящего по различным оптическим трассам верхнего полукруга на рис.1 б). Кривая 1 соответствует трассе с номером 2; кривая 2 – с номером 4; кривая 3 – с номером 6 и кривая 4 – с номером 7.

Вращение против часовой стрелки со скоростью на границе шара

$V_0 = 5v_T = 3.46 \times 10^5 \text{ м/с}$ . Статическая оптическая толщина шара по диаметру составляет  $\tau_0 = 100$  при начальной концентрации ионов кальция  $N_0 = 1.94 \times 10^7 \text{ см}^{-3}$ .

Следует отметить, что поглощение широкополосного излучения в плотных средах в отсутствии макроскопического движения вещества изучалось в работах [10 – 14]. Для демонстрации влияния эффектов вращения вещества на поглощение широкополосного излучения, на рис.2 показана частотная форма проходящей через шар солнечного света по различным оптическим трассам верхнего полукруга. Каждая кривая соответствует различным отстройкам геометрического пути от диаметра плазменного шара. Для всех кривых, за исключением кривой 4, ионы кальция движутся навстречу солнечному свету. Поэтому косинус угла  $\vartheta$  между проекцией скорости ионов и направлением распространения света в формуле (2) на всей оптической трассе меньше нуля. При этом ионные контуры поглощения сдвинуты в красную область спектра. Следовательно, в эту же область спектра будут сдвинуты и максимумы контуров поглощения в проходящем солнечном свете. Наибольшее смещение центральной частоты в поглощенном излучении соответствует наиболее удаленным от диаметра трассам, кривая 1, поскольку для них проекция скоростей ионов на направление распространения света принимает наибольшее значение со знаком минус. По мере приближения геометрического пути к диаметру шара, уменьшаются проекции ионных скоростей на направление солнечного света. Поэтому и центральная частота в поглощенном излучении приближается к частоте  $\nu_0$ , соответствующей центральной частоте для стационарной среды, кривая 4.

Для лучевого направления, проходящего через диаметр шара, кривая 4, направление движения ионов перпендикулярно направлению распространения света. Для этой трассы центры поглощения ионов совпадают с центральной частотой стационарной среды, но ширина поглощенного контура на полуглубине значительно превышает соответствующую ширину стационарного контура. Это видно при сравнении кривой 4 с кривой 4', полученной для той же трассы, но для стационарной среды. Причина такого различия станет понятной, если обратиться к уравнению (2), описывающему доплеровский контур линии поглощения среды при наличии макроскопического движения вещества. С ростом линейной скорости  $\nu(r)$  увеличивается коэффициент  $\delta(r)$ , который находится и в знаменателе константы перед экспонентой (2), и в показателе экспоненты, возведенной в квадрат. Если на оптической трассе косинус угла  $\theta$  равен нулю, то для любых значений частоты  $\chi$ , с ростом скорости  $\nu(r)$  значение экспоненты увеличивается быстрее, чем уменьшается коэффициент при экспоненте. Следовательно, в целом коэффициент поглощения на всех частотах контура линии для движущейся среды увеличивается по отношению к стационарной. Поэтому ширина контура на полуглубине для вращающейся плазмы значительно больше ширины линии поглощения стационарной среды даже для случая, когда на оптической трассе направление скорости ионов перпендикулярно направлению солнечного света.

Таким образом, результаты численного моделирования задачи указывают на то, что в проходящем через плазму солнечном свете эффект Доплера приводит к смещению центра линии поглощения в красную спектральную область для таких оптических трасс, проекции движение ионов на которые имеют отрицательные значения (верхний полукруг центрального сечения шара). Такие трассы соответствуют вращению плазмы в направлении, противоположном солнечному свету. И наоборот, центр линии поглощения для проходящего излучения смещается в синюю область частот для оптических трасс, для которых проекции ионных скоростей имеют положительные значения (нижний полукруг). Эти оптические пути соответствуют вращению плазмы по направлению солнечного света.

В заключение отметим, что самостоятельный интерес представляет моделирование задачи о резонансном рассеянии солнечного излучения плазменным шаром, вращающимся вокруг оси симметрии, что является предметом будущих исследований автора по данной тематике.

#### Список литературы

1. Косарев Н.И. Поглощение резонансного излучения в ультрахолодной лазерной плазме / Н.И. Косарев, Н.Я. Шапарев // ДАН. – 2008. – Т.421. – №6. С.762 – 764.
2. Kosarev N.I. Absorption and scattering of resonance laser radiation in ultracold optical dense plasma / N.I. Kosarev, N.Ya. Shaparev // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2008. – V.41. – No23. P. 235701 – 1 – 235701 – 3.
3. Косарев Н.И. Резонансные оптические характеристики ультрахолодной лазерной плазмы / Н.И. Косарев, Н.Я. Шапарев // Квантовая электроника. – 2009. – Т.39. – №12. С.1112 – 1116.
4. Kosarev N.I. Transfer of resonance radiation in an expanding sphere / N.I. Kosarev, N.Ya. Shaparev // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2011. – V.44. – No.19. P.195402 – 1 – 195402 – 5.
5. Kosarev N.I. Scattering and absorption of resonant radiation in an expanding sphere / N.I. Kosarev, N.Ya. Shaparev // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2012. – V.45. – No.16. P.165003 – 1 – 165003 – 5.
6. Косарев Н.И. Резонансное рассеяние солнечного света атомарным облаком при диффузионном расширении вещества / Н.И. Косарев // Оптика атмосферы и океана. – 2017. – Т.30. – №3. С.233 – 236.
7. Косарев Н.И. Рассеяние солнечного света ионным облаком в условии пульсирующей динамики вещества / Н.И. Косарев // Астрофизический бюллетень. – 2017. – Т.72. – №3. (В печати).
8. Косарев Н.И. Лазерная резонансная ионизация атомов натрия в условиях переноса излучения / Н.И. Косарев // Математическое моделирование. – 2005. – Т.17. – №5. С.105-122.
9. Косарев Н.И. Перенос излучения в искусственном бариевом облаке при его фотоионизации солнечным светом / Н.И. Косарев // Математическое моделирование. – 2006. – Т.18. – №12. С.67 – 87.
10. Косарев Н.И. Распространение широкополосного излучения в бариевом слое / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1991. – Т.4. – №11. С.1172 – 1178.
11. Косарев Н.И. Распространение солнечного излучения в искусственном бариевом облаке / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – Т.6. – №10. С.1298 – 1306.
12. Косарев Н.И. Поглощение лазерного излучения плотными парами натрия / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1995. – Т.8. – №12. С.1752 – 1756.
13. Косарев Н.И. Рассеяние солнечного света ионным бариевым облаком / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1999. – Т.12. – №1. С. 30–35.
14. Косарев Н.И. Компьютерное моделирование радиационных эффектов в бариевых облаках / Н.И. Косарев, Н.Я. Шапарев, И.М. Шкедов // В сборнике: Актуальные проблемы информатики, прикладной математики и механики. Ред. В.В. Шайдуров – Новосибирск–Красноярск. – 1996. – С.82 – 89.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ СОЛНЕЧНОГО СВЕТА ПЛАЗМЕННЫМ ОБЛАКОМ ПРИ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ЧЕРЕДОВАНИИ РАСШИРЕНИЯ И СЖАТИЯ ВЕЩЕСТВА

Н.И. Косарев

Сибирский федеральный университет,  
Институт цветных металлов и материаловедения, кафедра фундаментального естественнонаучного образования, [kosarev\\_nikolai@mail.ru](mailto:kosarev_nikolai@mail.ru)

Методом численного моделирования решена задача о переносе солнечного излучения в сферическом облаке кальциевой плазмы на длине волны  $\lambda_0 = 397 \text{ нм}$  в условии пульсирующей динамики вещества, при котором его радиальное расширение меняется на сжатие. Рассматривается следующая модельная ситуация. Сферическое облако радиуса  $R_0$ , содержащее ионы кальция, облучается солнечным светом, рис. 1, поглощение и рассеяние которого осуществляется в ионной линии  $^2S_{1/2} \leftrightarrow ^2P_{1/2}$  с длиной волны  $\lambda_0 = 397 \text{ нм}$ .

Радиальное расширение газа в вакуум описывается самосогласованным решением [1 – 3] в котором скорость расширения в точке среды  $\vec{r}$  определяется линейным выражением  $\vec{v}(\vec{r}) = \frac{V}{R} \cdot \vec{r}$ , где  $V$  – скорость расширения границы сферы радиуса  $R_0$ . В нашем случае скорость  $V(t)$  зависит от времени и моделируется гармонической зависимостью выражением

$$V(t) = V_0 \cdot \sin\left(\frac{t}{T_0} \cdot \frac{\pi}{2}\right). \quad (1)$$

Здесь  $T_0$  – время, соответствующее четверти периода функции  $\sin(\xi)$ , а скорость расширения границы шара обозначена  $V_0$ . Время  $t$  при изменении в диапазоне между 0 и  $4 \times T_0$  полностью охватывает одну фазу расширения – сжатие. Область  $0 \leq t \leq 2T_0$  соответствует фазе радиального расширения облака, для которой функция  $\sin(\xi)$  и, следовательно, скорость  $V(t)$  принимает положительные значения. Соответственно, в этот период времени радиус облака увеличивается. На временах  $2T_0 < t \leq 4T_0$  скорость  $V(t)$  становится отрицательной и, следовательно, ионное облако радиально сжимается.

С учетом зависимости (1), радиальная скорость среды в точке  $\vec{r}$  будет также зависеть и от времени  $t$

$$\vec{v}(\vec{r}, t) = \frac{\left( V_0 \cdot \sin\left(\frac{t}{T_0} \cdot \frac{\pi}{2}\right) \right)}{R} \cdot \vec{r}. \quad (2)$$

При макроскопическом движении среды, если уширение спектральной линии формируется доплеровским механизмом, контур линии поглощения имеет вид [1 – 7]

$$\Phi(x - \mu W, r, t) = \pi^{-1/2} \delta^{-1}(r, t) \cdot \exp\{(-[x - \mu W]^2 / \delta^2(r, t))\}. \quad (3)$$

В выражении (3) введены следующие обозначения:  $x = (\nu - \nu_0) / \Delta \nu_D$ ,  $\nu_0$  – центральная частота линии для неподвижной среды;  $\Delta \nu_D = \nu_0 v_t / c$  – доплеровская ширина линии;  $W = \nu(r, t) / \nu_t$ ,  $\nu(r, t)$  – модуль радиальной скорости движения вещества,  $\nu_t$  – тепловая скорость ионов;  $\mu = \cos \theta$ ,  $\theta$  – угол между ионной скоростью и направлением

рассеяния фотона; коэффициент  $\delta(r, t) = (\Delta\nu_D + |\nu(r, t) / \lambda_0|) / \Delta\nu_D$  зависит от температуры и скорости движения среды в заданной точке  $r$ ,  $\lambda_0 = c / \nu_0$  – длина волны,  $c$  – скорость света.

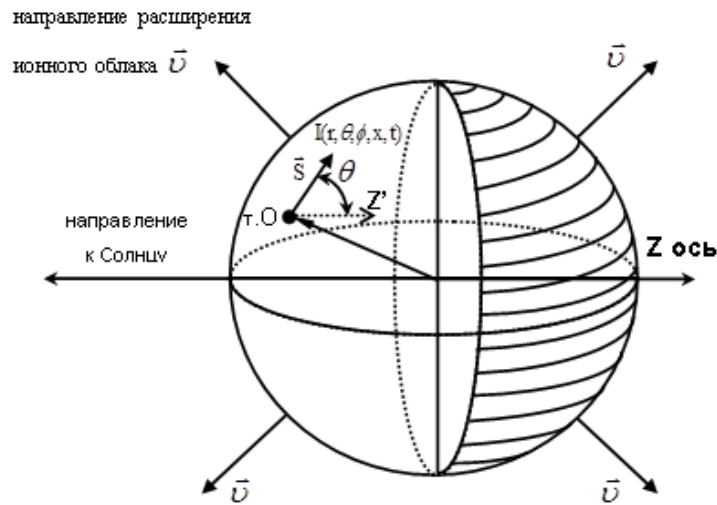


Рис. 1. Геометрия задачи. Солнечное излучение интенсивности  $I_s^0(\nu)$  освещает левую границу кальциевого облака.

В произвольной точке шара  $r$  определим спектральную интенсивность излучения  $I(r, \theta, \phi, x, t)$ , формируемую солнечным светом и внутренними источниками фотонов в облаке. Эта интенсивность зависит от времени ( $t$ ), частотной ( $x$ ) и угловых ( $\theta, \phi$ ) переменных. Для определения  $I(r, \theta, \phi, x, t)$  выпишем стационарное уравнение переноса излучения в лучевой форме [8,9]

$$\frac{dI}{d\tau} = \Phi(x - \mu V, r) \cdot [S - I]. \quad (4)$$

в котором  $d\tau = \chi_0(r, t)ds$ ,  $ds$  бесконечно малое приращение пути фотона в направлении, определяемом углами  $\theta, \phi$ , а  $\chi_0$  и  $S$  – коэффициент поглощения и функция источников (определены далее). За  $\tau_0$  обозначим полную оптическую толщину среды на центральной частоте вдоль диаметра шара  $\tau_0 = 2R_0\chi_0(R_0, t_0)$  для начального момента времени  $t_0$ , когда разлета ещё нет и радиус облака равен  $R_0$ . Функция источников  $S = \eta_0(r, t) / \chi_0(r, t)$  в уравнении переноса, выражаемая через коэффициенты поглощения  $\chi_0$  и излучения  $\eta_0$  для частоты  $\nu_0$ , неявным образом зависят от времени  $t$  через населенности уровней и определяются так

$$\chi_0(r, t) = \alpha_{12} \cdot \left[ N_1(r, t) - \frac{g_1}{g_2} N_2(r, t) \right], \quad \eta_0(r, t) = \frac{2h\nu_0^3}{c^2} \cdot \alpha_{12} \frac{g_1}{g_2} \cdot N_2(r, t). \quad (5)$$

Здесь  $\alpha_{12} = B_{12}h\nu_0/(4\pi)$ ;  $g_1$  и  $g_2$  – статвеса уровней,  $h$  – константа Планка. В уравнении (5) индексы 1 и 2 относятся к основному и возбужденному уровням резонансной линии, а  $N_1$  и  $N_2$  – населенности соответствующих уровней. Их изменение со временем описывается скоростными уравнениями баланса двухуровневых ионов кальция. Учитываются процессы вынужденного фотовозбуждения, фототушения и спонтанного распада возбужденного уровня. Поэтому уравнения баланса населенностей принимают следующий вид

$$\frac{dN_1(r, t)}{dt} = -B_{12}J(r, t) \cdot N_1(r, t) + (B_{21}J(r, t) + A_{21}) \cdot N_2(r, t), \quad (6)$$

$$\frac{dN_2(r, t)}{dt} = -(B_{21}J(r, t) + A_{21}) \cdot N_2(r, t) + B_{12}J(r, t) \cdot N_1(r, t), \quad (7)$$

начальные условия для уравнений (6), (7) имеют, соответственно, вид

$$N_2(r, 0) = 0, \quad N_1(r, 0) = N_0, \quad (8)$$

где  $B_{12}$ ,  $B_{21}$  и  $A_{21}$  коэффициенты Эйнштейна для вынужденного фотовозбуждения, фототушения и спонтанного распада; начальные условия (8) предполагают, что в момент времени  $t=0$  ионы имеют однородное пространственное распределение и находятся в основном состоянии с концентрацией  $N_0$ . Кроме начальных условий (8) в каждый момент времени движения вещества выполняется условие сохранения полного количества ионов в единице объема шара

$$N_1(r, t) + N_2(r, t) = N_0 \cdot \frac{R_0^3}{(R_0 + \nu(r, t) \cdot t)^3}. \quad (9)$$

Последнее соотношение показывает, что при расширении облака, когда скорость  $\nu(r, t)$  положительна и в каждой точке облака с координатой  $r$  направлена радиально от центра шара наружу, полная концентрация ионов в единице объема со временем уменьшается. При сжатии – наоборот, скорость  $\nu(r, t)$  в любой точке среды отрицательна и направлена радиально к центру шара. Концентрация ионов теперь опять увеличивается, возвращаясь к своему первоначальному значению  $N_0$ , соответствующему покоящемуся веществу.

В скоростных уравнениях баланса населенностей ионов коэффициент  $J(r, t)$  выражается через трехкратный интеграл

$$J(r, t) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x - \mu V, r) I(r, \theta, \phi, x, t) dx. \quad (10)$$

Для вычисления интеграла (10) в любой точке среды, угол  $\theta$  должен изменяться в диапазоне от 0 до  $\pi$  относительно оси  $Z'$ , а угол  $\phi$  при заданном значении угла  $\theta$  охватывает значения от 0 до  $2\pi$  при вращении вектора  $\vec{S}$  (рисунок 1) в точке О, вокруг оси  $Z'$ . Будем считать, что направление солнечного света интенсивности  $I_s^0$  совпадает с осью  $Z$  системы координат находящейся в центре сферы, рисунок 1. Если обозначить за  $\vec{R}$  радиус-вектор облучаемой поверхности шара, то граничные условия имеют вид

$$I(\vec{R}, \theta, \phi, x, t) = \begin{cases} I_s^0, & \text{если } \theta = \pi, \\ 0, & \text{если } \theta \neq \pi \end{cases}. \quad (11)$$

Скоростные уравнения баланса (6) и (7) описывают динамику населенностей двухуровневых ионов, а полное их количество определяется числом пространственных узлов, на которое дискретизуется трехмерный шар. Уравнения (6), (7) имеют интегродифференциальную структуру потому, что в правую их часть входит коэффициент  $J(r, t)$ , представляющий собой трехкратный интеграл от спектральной интенсивности излучения  $I(r, \theta, \phi, x, t)$ . Последняя сама зависит от населенностей уровней через коэффициент поглощения  $\chi_0(r, t)$  и функцию источников  $S$ , и находится из решения уравнения переноса (4), которое также является интегродифференциальным уравнением. Для расчета спектральной интенсивности  $I(r, \theta, \phi, x, t)$  в наборе углов, частот и пространственных узлов, использовано формальное решение уравнения переноса в инте-

гальной форме [8 – 9]. Если в каждый момент времени правая часть уравнений (6) и (7) рассчитана, то теперь они представляют собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений. Основу численного решения уравнений (4)–(11) составляли алгоритмы, изложенные в работах [8 – 9]. В представленной статье эти алгоритмы доработаны для учета макроскопического расширения–сжатия плазменного объема. Построенный численный алгоритм позволяет просчитывать населенности двухуровневых ионов и спектральную интенсивность излучения  $I(r, \theta, \phi, x, t)$  на временах, включающих достаточно большое количество фаз пульсаций облака (порядка десяти), для оптических толщин  $\tau_0 \leq 100$  и скоростей разлета, равных нескольким тепловым скоростям ионов кальция.

Результаты численных расчетов процесса рассеяния солнечного света ионным кальциевым облаком получены для следующих параметров модели: температура инжектируемых паров составляет  $T_0 = 1160^\circ \text{K}$ ; характерный размер облака составляет  $D_0 \approx 10^6 \text{ см}$ ; начальная концентрация атомов  $N_0 = 4.85 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$ ; статическая оптическая толщина на центральной частоте ионного перехода  $\tau_0 = 25$ . Максимальная скорость разлета (сжатия) в момент времени, когда аргумент функции синус в выражении 2 равен соответственно  $+1$  (а для сжатия  $-1$ ), составляла  $V_0 = 2 \times v_T = 1.4 \times 10^5 \text{ см/с}$ . Предполагалось, что солнечное излучение имеет широкий спектр  $I_s^0$  и его интенсивность не зависит от частоты в пределах спектральной линии ионов кальция. Значение  $I_s^0$  для резонансного перехода составляло  $1.23 \times 10^{10} \text{ эрг} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$  [10 – 11]. Для удобства численного счета характерные времена рассматриваемого процесса пульсации вещества измерялись в единицах  $10^{-6}$  секунд. Представленные результаты соответствуют излучению, распространяющемуся по лучевой трассе пересекающую центр сферы вдоль её диаметра.

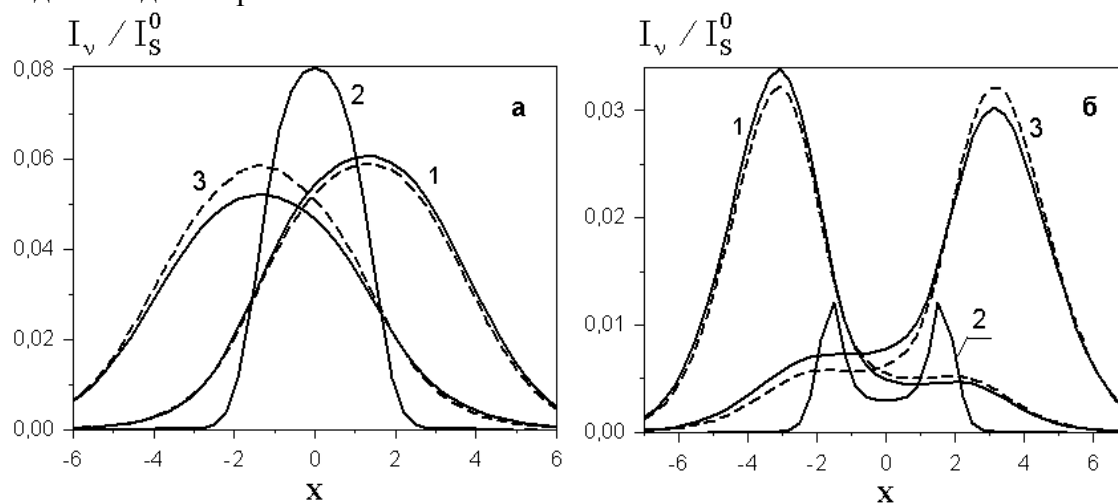


Рис. 2. Частотный контур линии излучения рассеянного “назад” – а), и “вперед” – б), нормированного на  $I_s^0$  при фиксированном времени  $t$  [мкс]: 1 мкс – кривая 1; 2 – 2; 3 – 3. По оси абсцисс отложена безразмерная частота  $x = (\nu - \nu_0) / \Delta \nu_D$ .

На рис. 2 представим результаты моделирования рассеяния солнечного света кальциевым облаком в условии пульсации вещества. Здесь представлены эмиссионные профили для излучения, рассеянного в направлении противоположном солнечному свету (направление “назад”) – а), и по направлению солнечного света (направление “вперед”) – б). Кривые 1 получены в момент времени наибольшей скорости расширения

( $t = 1 \text{ мкс}$ ). Кривые 2 соответствует нулевой скорости расширения ( $t = 2 \text{ мкс}$ ), а кривые 3 получены в момент времени наибольшей скорости сжатия ( $t = 3 \text{ мкс}$ ).

При расширении облака излучение рассеянное “назад” сдвинуто по частоте в “синее” частотное крыло спектра (сплошная кривая 1, рис.2а). Это излучение формируется возбужденными ионами, находящимися вблизи облучаемой границы шара, для которых контуры линий излучения сдвинуты в “синюю” спектральную область, а выход фотонов из среды в направлении “назад” является более облегченным по отношению к другим направлениям рассеяния. При сжатии вещества контур линии излучения наоборот сдвинут в “красную” спектральную область, за счет эффекта Доплера (сплошная кривая 3, рис.2а). Отметим также, что в отсутствии движения вещества контур линии рассеянного “назад” излучения имеет симметричное по частоте распределение (кривая 2, рис.2а).

При рассеянии в направлении “вперед”, расширение вещества (кривая 1 рис.2б) приводит к сдвигу спектрального контура в “красное” крыло. Это вызвано двумя причинами. Первая связана с тем, что в области от входной границы и до центра среды рассеянная “вперед” радиация смещена в “красную” область спектра из-за эффекта Доплера. Вторая причина состоит в том, что в области от центра шара и до его теневой границы рассеянное “вперед” излучение уже более сильно поглощается в “синем” спектральном крыле, а “красное” крыло спектра здесь проходит среду без значительного поглощения. В условии сжатия вещества наоборот, в области от входной границы и до центра сферы рассеянная “вперед” радиация смещена в “синюю” область спектра. В области от центра шара и до его теневой границы рассеянное “вперед” излучение теперь более сильно поглощается в “красном” спектральном крыле. Но теперь, “синее” крыло спектра проходит среду без значительного поглощения и выходная интенсивность при сжатии оказывается смещенной в “синюю” частотную область.

Отметим, что контур линии излучения, рассеянного с теневой стороны шара, в отсутствии движения вещества, кривая 2 рис.2б, имеет самообращенную частотную форму, симметричную относительно центральной частоты линии  $\nu_0$ . Эффекты реабсорбции частотных контуров резонансных линий атомов бария и натрия достаточно детально исследованы в работах [9 – 14] для стационарных оптически плотных сред. Расширение вещества приводит к тому, что правая часть стационарного реабсорбированного контура (кривая 2 рис.2б) ослабляется и, уширяясь, сдвигается в “синюю” область спектра. Левая часть стационарного контура усиливается и, уширяясь, сдвигается в “красную” область спектра. Линия в целом выглядит сдвинутой в “красную” спектральную область. При сжатии вещества, наоборот наблюдается видимый сдвиг линии в “синюю” область спектра. Таким образом, получено смещение максимума контура спектральной линии при средней скорости разлета по лучу зрения равной нулю, и такое смещение не вызвано макроскопическим удалением или приближением вещества по отношению к внешнему наблюдателю.

Пунктирные кривые 1,3 на рис.2 а) и б) получены для десятой фазы пульсации вещества для моментов времени, соответствующих наибольшим скоростям расширения и сжатия ионного облака, как и сплошные кривые. Как видно, наблюдается симметричная картина смещения максимума линии в “красную” и “синюю” области спектра относительно центральной частоты. Интенсивность рассеянного излучения формируется коэффициентом излучения (выражение (5)). Поэтому такое симметричное спектральное распределение свидетельствует о том, что примерно для десяти фаз радиальной пульсации вещества сформировалось одинаковое пространственное распределение возбужденных ионов в объеме для временных кадров, когда скорости расширения и сжатия шара максимальны.

В заключении отметим, что несимметричное относительно центральной частоты линии распределение интенсивности свечения движущегося вещества может проявляться как в натуральных ионосферных экспериментах с искусственными облаками (ссылки на экспериментальные работы даны в списке литературы в работах [9 – 14]), а также при расширении планетарных туманностей и звездных атмосфер.

#### Список литературы

1. Косарев Н.И. Поглощение резонансного излучения в ультрахолодной лазерной плазме / Н.И. Косарев, Н.Я. Шапарев // ДАН. – 2008. – Т.421. – №6. С.762 – 764.
2. Kosarev N.I. Absorption and scattering of resonance laser radiation in ultracold optical dense plasma / N.I. Kosarev, N.Ya. Shaparev // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2008. – V.41. – No23. P. 235701 – 1 – 235701 – 3.
3. Косарев Н.И. Резонансные оптические характеристики ультрахолодной лазерной плазмы / Н.И. Косарев, Н.Я. Шапарев // Квантовая электроника. – 2009. – Т.39. – №12. С.1112 – 1116.
4. Kosarev N.I. Transfer of resonance radiation in an expanding sphere / N.I. Kosarev, N.Ya. Shaparev // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2011. – V.44. – No.19. P.195402 – 1 – 195402 – 5.
5. Kosarev N.I. Scattering and absorption of resonant radiation in an expanding sphere / N.I. Kosarev, N.Ya. Shaparev // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2012. – V.45. – No.16. P.165003 – 1 – 165003 – 5.
6. Косарев Н.И. Резонансное рассеяние солнечного света атомарным облаком при диффузионном расширении вещества / Н.И. Косарев // Оптика атмосферы и океана. – 2017. – Т.30. – №3. С.233 – 236.
7. Косарев Н.И. Рассеяние солнечного света ионным облаком в условии пульсирующей динамики вещества / Н.И. Косарев // Астрофизический бюллетень. – 2017. – Т.72. – №3. (В печати).
8. Косарев Н.И. Лазерная резонансная ионизация атомов натрия в условиях переноса излучения / Н.И. Косарев // Математическое моделирование. – 2005. – Т.17. – №5. С.105-122.
9. Косарев Н.И. Перенос излучения в искусственном бариевом облаке при его фотоионизации солнечным светом / Н.И. Косарев // Математическое моделирование. – 2006. – Т.18. – №12. С.67 – 87.
10. Косарев Н.И. Распространение широкополосного излучения в бариевом слое / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1991. – Т.4. – №11. С.1172 – 1178.
11. Косарев Н.И. Распространение солнечного излучения в искусственном бариевом облаке / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – Т.6. – №10. С.1298 – 1306.
12. Косарев Н.И. Поглощение лазерного излучения плотными парами натрия / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1995. – Т.8. – №12. С.1752 – 1756.
13. Косарев Н.И. Рассеяние солнечного света ионным бариевым облаком / Н.И. Косарев, И.М. Шкедов // Оптика атмосферы и океана. – 1999. – Т.12. – №1. С. 30–35.
14. Косарев Н.И. Компьютерное моделирование радиационных эффектов в бариевых облаках / Н.И. Косарев, Н.Я. Шапарев, И.М. Шкедов // В сборнике: Актуальные проблемы информатики, прикладной математики и механики. Ред. В.В. Шайдуров – Новосибирск–Красноярск. – 1996. – С.82 – 89.

# КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ МОРФОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МЕДИЦИНСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ ШИАРЛЕТ- ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

М.А. Курако<sup>1</sup>, С.В. Кириллова<sup>1</sup>, А.С. Кругляков<sup>1</sup>, К.В. Симонов<sup>2</sup>, Т.В. Черепанова<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Сибирский федеральный университет,

Институт космических и информационных технологий, [mkurako@sfu-kras.ru](mailto:mkurako@sfu-kras.ru)

<sup>2</sup>Институт вычислительного моделирования СО РАН, [simonovkv@icm.krasn.ru](mailto:simonovkv@icm.krasn.ru)

<sup>3</sup>Красноярский государственный медицинский университет имени проф. В. Ф. Войно-Ясенецкого, [grakova@list.ru](mailto:grakova@list.ru)

## Введение

В последнее десятилетие активно развиваются новые биотехнологии при решении актуальных клинических экспериментальных задач, а также их приборное обеспечение. В то же время известные методические и алгоритмические средства для количественного описания результатов экспериментальных медицинских исследований не вполне соответствуют требованиям по быстродействию и качеству обработки сложных визуальных данных.

Одной из таких задач является современная технология реконструкции изъянов передней брюшной стенки с помощью биосовместимых сверхэластичных сетчатых имплантатов из никелида титана [1–2]. На основании большого числа клинических наблюдений авторами доказана высокая эффективность применения разрабатываемой методики. В тоже время в ряде случаев отграничить эндопротез от органов брюшной полости не представляется возможным.

В связи с этим возникла необходимость в создании нового комбинированного имплантата на основе никелида титана, способного замещать дефекты передней брюшной стенки с возможностью к интраперитониальному методу расположения. Разработка и обоснование этого нового способа осуществлялось на основе серии экспериментальных исследований на кроликах породы Шиншилла. В результате получен значительный по объему экспериментальный материал, который подвергался гистологическому изучению, результаты определяли по морфологическим и морфометрическим параметрам.

Идея настоящей работы состоит в том, чтобы на основе нового вычислительного подхода — шиарлет-преобразования экспериментальных данных — повысить точность выделения «квази круглых» (образования) и линейных (волокна) структур. Кроме этого, повысить визуальное качество изображений изучаемых клинических объектов в рамках процедуры контрастирования для адекватной количественной оценки их основных метрических характеристик. В конечном итоге, предполагается создание общей экспериментальной модели репаративного гистогенеза в грыжевых дефектах передней брюшной стенки после замещения никелид-титановыми имплантатами.

## 1. Методика анализа медицинских изображений

В работе в качестве вычислительного инструментария для анализа динамики указанного процесса, а также для выделения внутренних геометрических черт экспериментальных изображений объектов интереса предлагается новый подход к решению задачи количественного морфологического представления визуальных данных на осно-

ве шиарлет- и вейвлет-преобразований [3–7]. Шиарлет-преобразование является современным методом многомерного анализа пространственных данных и изображений. Этот метод отличается возможностью определения анизотропной составляющей, что может быть применимым для решения задач обработки сложных изображений. Алгоритмические расчетные схемы шиарлет-преобразования опираются на хорошо разработанную теорию вейвлет-анализа и является её естественным расширением. Так, параметрами шиарлет-преобразования являются не только смещение и масштабирование, но и сдвиг.

Целью работы является повышение точности анализа указанных выше экспериментальных изображений путем модификации и адаптации алгоритмического обеспечения решения задач количественного морфологического анализа на основе шиарлет-преобразования.

Поставленная цель определила необходимость решения следующих задач: выполнить сравнительный анализ алгоритмов геометрического анализа визуальных данных, основанных на вейвлет- и шиарлет-преобразованиях; адаптировать методические основы нового подхода (сочетание вейвлет- и шиарлет преобразования) для количественного морфологического анализа медицинских изображений.

Предлагаемая вычислительная методика решения указанных задач состоит из следующих этапов:

- подготовительный этап, на котором исходные изображения форматируются под расчетный шаблон и намечается последовательность расчетных процедур;
- настройка алгоритмического обеспечения, выбор конкретного алгоритма в зависимости от поставленной задачи и от условий яркости и контрастности изображений;
- обработка исходных изображений для различных расчетных условий в зависимости от поставленной задачи;
- анализ расчетных изображений, контрастирование изучаемых изображений на основе цветового кодирования и масштабирования объектов интереса.

Далее на экспериментальном материале показывается эффективность шиарлет-преобразования как инструмента для анализа динамики внутренних геометрических черт объектов интереса исследуемых изображений.

## **2. Методика экспериментальных исследований**

В рамках решения поставленной задачи выполнена серия экспериментальных клинических исследований на кроликах породы Шиншилла, животные были разделены на 3 группы, по 11 животных в каждой. Операции выполнены на базе кафедры оперативной хирургии КрасГМУ. Для исследований применялись сетчатые имплантаты из никелида титана, разработанные и изготовленные в НИИ медицинских материалов и имплантатов с памятью формы (г. Томск).

С целью получения комбинированной ткани использовали имплантат, сплетенный по текстильной технологии из сверхэластичной никелид-титановой нити толщиной 60 мкм, с размерами ячейки 120-240 мкм. Нить представляет собой композиционный материал, включающий сердцевину из наноструктурного монолитного никелида титана и пористый поверхностный слой (5-7 мкм) оксида титана. Присутствие монолитного никелида титана внутри оксидной оболочки позволяет проявлять эластичные

свойства, а пористая поверхность нити придает ей высокую адаптивность в тканях организма.

В первой части эксперимента животным путем тунелизации межмышечного пространства задней тазовой конечности устанавливали эксплантат, который извлекали на заданные сутки. В целях определения пригодности трансплантата и изучения морфогенеза процессов репаративной регенерации в соединительнотканых дефектах после замещения «пророщенным» материалом из никелида титана выполнена вторая часть эксперимента. У животных искусственным путем формировали изъязвление передней брюшной стенки, затем замещали пророщенным имплантатом, извлеченным из задней тазовой конечности животного в определённые сроки. В первой группе имплантат забирали через 5, во второй — через 7, в третьей — через 10 суток экспозиции.

Далее для изучения материала вместе с полученным регенератом забирали через 3, 5, 7, 10, 14, 21, 28, 42 и 56 суток после операции. После окончания эксперимента животных выводили из опыта согласно поставленным срокам. После фиксации имплантат прецизионно извлекали, тканевой регенерат и прилежащие ткани направлялись на гистологическое исследование. Анализ объемного состава структурных компонентов проводили под микроскопом при стандартном увеличении  $\times 175$  на шестиугольной решетке с 25 точками. Наблюдение за экспериментальными животными осуществляли в течение 6 месяцев после основного вмешательства.

### **3. Анализ динамики изучаемого процесса**

Полученный материал подвергали гистологическому изучению. Результаты определяли по морфологическим и морфометрическим параметрам. Затем выполнялась обработка и анализ соответствующего набора снимков в динамике, на которых показана изменчивость изучаемого процесса. С помощью разработанной методики на основе шиарлет-преобразования с контрастированием цветовым кодированием и масштабированием объектов интереса выделялись искомые особенности и закономерности.

Исследования показали, что в зоне непосредственного контакта с имплантатом в 1-е сутки после операции определялся клеточный детрит, а окружающая ткань имела выраженные некробиотические изменения. В отдаленные сроки эти участки отделялись зоной демаркационного воспаления. Начиная с 5-ых суток наблюдения воспалительные явления в окружающих тканях уменьшались, нарастали репаративные процессы, увеличивалось количество клеток фибробластического ряда, происходило новообразование сосудов микроциркуляторного русла. К 7-м суткам исследования лейкоцитарная инфильтрация прогрессивно уменьшалась, а количество коллагеновых волокон и клеток фибробластического ряда напротив, увеличилось. При этом коллагеновые волокна собирались в пучки, а общее их количество увеличивалось в 4 раза.

На 10 сутки наблюдения лейкоцитарная инфильтрация прогрессивно уменьшалась, увеличивалось количество волокнистого компонента. Появлялись параллельно направленные, более толстые пучки коллагеновых волокон. Преобладание аморфного компонента и лейкоцитов во всех экспериментальных группах над контрольными величинами являются следствием воспалительных изменений. За время наблюдения происходило постепенное их снижение, а, следовательно, и отека межуточной ткани. Количество же коллагеновых волокон, напротив, увеличивалось, и к 10-м суткам экспози-

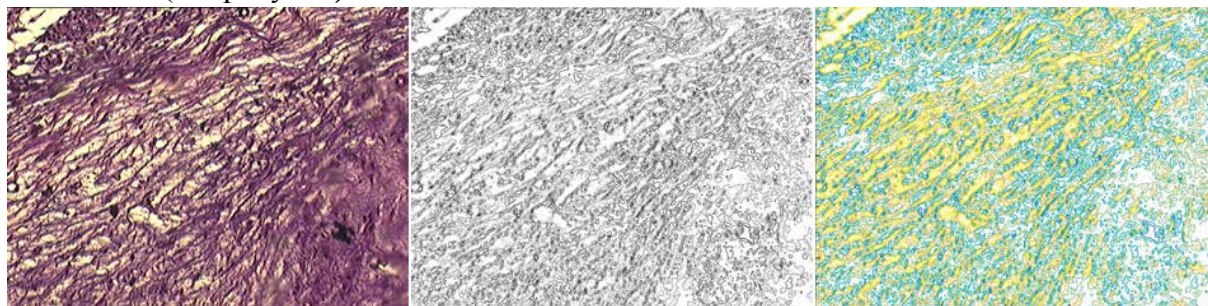
ции имплантата в бедре почти вдвое превышало этот показатель в сравнении с пятью сутками исследования. В ходе наблюдения в зоне контакта происходило постепенное уменьшение лейкоцитарной инфильтрации и клеток фибробластического ряда, а количество волокнистых элементов нарастало. Формирующаяся к 7-м и 10-м суткам вокруг имплантата ткань приобретала свойства плотной неоформленной соединительной.

Далее выделены и представлена динамика морфометрических показателей соединительной ткани после проращивания имплантата в бедре экспериментального животного и последующей имплантации в дефекты передней брюшной стенки. Такие имплантаты называются «аутоимплантатами», поскольку несут на себе не только инородный материал, но и «выращенную» на никелид-титановой матрице соединительную ткань.

Результаты исследования показали, что через 3 суток после имплантации в зоне вмешательства наблюдалась неспецифическая воспалительная реакция, т.е. преобладание клеточных элементов над волокнистым компонентом. Через 5-7 суток воспалительные явления уменьшались. Во второй и третьей группах увеличивалось количество фибробластов и коллагеновых волокон, появлялись сосудистые элементы, которые пронизывали регенерат и имплантационный материал.

Спустя 10 суток, в препаратах II и III групп выявлялось значительное количество клеток фибробластического ряда и коллагеновых волокон, в большей степени наблюдалось прораствание сосудов через ячеистую структуру имплантата, что свидетельствовало о росте соединительной ткани, как в толще самого имплантата, так и с наружной и внутренней его сторон. На 14-28 сутки в регенерате II группы определялось значительное повышение волокнистого компонента, в сравнении с I и III группами, количество клеточных элементов стабилизировалось, начиналось формирование сухожильных пучков.

В течение последующих 42 суток, во II группе продолжалась дифференцировка соединительнотканного регенерата, количество коллагеновых волокон преобладало над фиброцитами и фибробластами, тогда как в I и III группах эти процессы замедлились. Данные процессы завершались к 56 суткам, полученный регенерат напоминал строение нормального апоневроза, после указанные сутки последний не претерпевал заметных изменений (см. рисунок).



Гистологическая картина 208 суток имплантационного материала в дефектах передней брюшной стенки, «выращенной в течение» 7 суток, коллагеновые волокна продольно направлены вокруг имплантата (слева); результат шиарлет-преобразования изображения (в центре); контрастирование преобразованного изображения на основе цветового кодирования (справа)

## Выводы

Успешно применена модифицированная методика геометрического анализа изображений для решения задачи количественного описания динамики изучаемого процесса на базе экспериментальных клинических исследований. Методика показала свою эффективность за счет обеспечения возможности выбора базовых алгоритмов шиарлет-преобразования, что позволило повысить точность выделения линейных структур и визуальное качество изображений изучаемых клинических объектов на 20-30%. Успешно решалась задача, связанная с контрастированием изучаемых эффектов по времени на снимках через процедуры фильтрации и шумоподавления, а также масштабирования объектов интереса.

В итоге установлено, что тканевые имплантаты на основе никелида титана позволяют полноценно замещать дефекты соединительной ткани, благодаря биохимической и биомеханической совместимостью с тканями организма. «Пророщенный» имплантат способен выполнять функцию матрицы для трансплантации аутосоединительной ткани. Использование «пророщенного» аутосоединительной тканью сетчатого никелид-титанового имплантата в качестве пластического материала для реконструкции изъязнов, позволит обеспечивать прочное и надежное закрытие дефекта.

## Список литературы

1. Биосовместимые материалы с памятью формы и новые технологии в медицине / Под ред. проф. В.Э. Гюнтера. — Томск: ИПФ; Изд-во НТЛ. — 2004. — 440 с.
2. Радкевич А.А. Репаративный десмогенез после замещения соединительно-тканых дефектов тканевыми имплантатами из никелида титана / А.А. Радкевич, Ю.С. Винник, И.Э. Каспарова // Сибирский медицинский журнал. — 2009. — Т.91. — №8. — С.151 – 153.
3. Labate D. Sparse directional image representations using the discrete shearlet transform / D. Labate, G. Easley, W-Q. Lim // Applied Computational Harmonic Analysis. — 2008. — V.25. — P.25-46.
4. Guo K. Edge analysis and identification using the Continuous Shearlet Transform / K. Guo, D. Labate, G. Easley, W-Q. Lim // Applied Computational Harmonic Analysis. — 2009. — V.27. — P.24-46.
5. Lim W.-Q. The discrete shearlet transform: a new directional transform and compactly supported shearlet frames / W.-Q. Lim // IEEE Trans. Imag. Proc. — 2010. — V.19. — P.1166-1180.
6. Hauser S. Fast finite shearlet transform: a tutorial. University of Kaiserslautern. — 2011.
7. Kutyniok G. Introduction to shearlets. In Shearlets. Multiscale analysis for multivariate data / G. Kutyniok, D. Labate. — Birkhauser, Boston, MA, USA, 2012: — P.1-38.

## ОБРАЗОВАНИЕ СТРУКТУР В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ СТЕРЖНЕОБРАЗНЫХ ЧАСТИЦ<sup>3</sup>

Н.И. Лебовка<sup>1,2</sup>, Ю.Ю.Тарасевич<sup>3</sup>, В.А. Гигиберия<sup>2</sup>, Н.В. Выгорницкий<sup>2</sup>,  
А.С. Бурмистров<sup>3</sup>, В.В. Лаптев<sup>4,3</sup>

<sup>1</sup>Институт биокolloидной химии им. Ф.Д. Овчаренко НАН Украины, Украина

<sup>2</sup>Национальный университет им. Тараса Шевченко, Украина

<sup>3</sup>Астраханский государственный университет, Россия

<sup>4</sup>Астраханский государственный технический университет, Россия

В последние годы большое внимание уделялось изучению процессов самоорганизации в плотных двумерных системах жестких стержней [1]. Такие системы могут быть как жидкими (коллоиды со стержнеобразными частицами), так и сыпучими (гранулированные материалы). В частности, множество экспериментальных работ посвящено образованию структур в тонких слоях вытянутых гранул под воздействием вибрации [2–4]. Для теоретического исследования и моделирования этих систем удобно применять решёточный подход — используется дискретное пространство (например, квадратная решётка), стержень с отношением сторон  $k$  представляется в виде линейного  $k$ -мера (частицы, занимающей  $k$  соседних узлов решётки). В случае квадратной решётки стержень может иметь только две взаимно перпендикулярные пространственные ориентации. Помимо дискретного пространства удобно использовать и дискретное время. В этом случае броуновская диффузия частиц моделируется как случайное блуждание.

В наших исследованиях [5–7] была изучена броуновская диффузия линейных  $k$ -меров на квадратной решетке с помощью кинетического моделирования Монте-Карло (МК). Основное внимание было уделено плотным системам. В плотных системах возможна только трансляционная диффузия частиц, в то время как вращательная диффузия полностью подавляется. В большинстве случаев мы исследовали изотропные системы, т.е. системы с равным числом частиц различных пространственных ориентаций. Кроме того, были исследованы системы с неравным количеством частиц различных пространственных ориентаций. Начальное состояние систем создавалось с использованием алгоритма случайного последовательного осаждения частиц (RSA) [8] до заданной плотности упаковки (концентрации)  $k$ -меров. Затем случайным образом выбиралась одна частица и предпринималась попытка сместить её на постоянную решётки в произвольно выбранном направлении. Число попыток, равное полному числу частиц в рассматриваемой системе, принималось за один шаг МК. Моделирование типично продолжалось до  $10^7$  шагов МК, а в некоторых случаях — до  $10^8$  шагов МК.

Мы исследовали влияние отношения сторон частиц, их концентрации, анизотропии начального состояния, размера системы и типа граничных условий на образование структур и изменение физических свойств [6,7]. Длина  $k$ -меров варьировалась от 2 до 12, размер решётки  $L$  менялся от 128 до 2048, основные исследования проводились для случая  $L = 256$ . Для характеристики вызванных диффузией процессов оценивалось, в частности, количество кластеров ( $n$ ), число внутривидовых ( $n_x, n_y$ ) и межвидовых ( $n_{xy}$ ) контактов между  $k$ -мерами различной пространственной ориентации и электропроводность системы. Временная эволюция системы состоит из нескольких фаз, которые наиболее удобно определять по особенностям на графике зависимости от времени

---

<sup>3</sup> Исследования выполнены при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект №3.959.2017/4.6 и Национальной академии наук Украины, проект № 43/17-Н.

числа кластеров, состоящих из частиц одного вида (Рис. 1). В частности, было обнаружено, что при  $k \geq 6$  в достаточно плотных системах умеренного размера с периодическими граничными условиями (ПГУ) случайное блуждание частиц приводит к формированию стационарных структур (Рис. 1) и радикальному изменению физических свойств систем, в частности их электропроводности. После многостадийного переходного процесса первоначально однородная система приходит в упорядоченное стационарное состояние (Рис. 1).

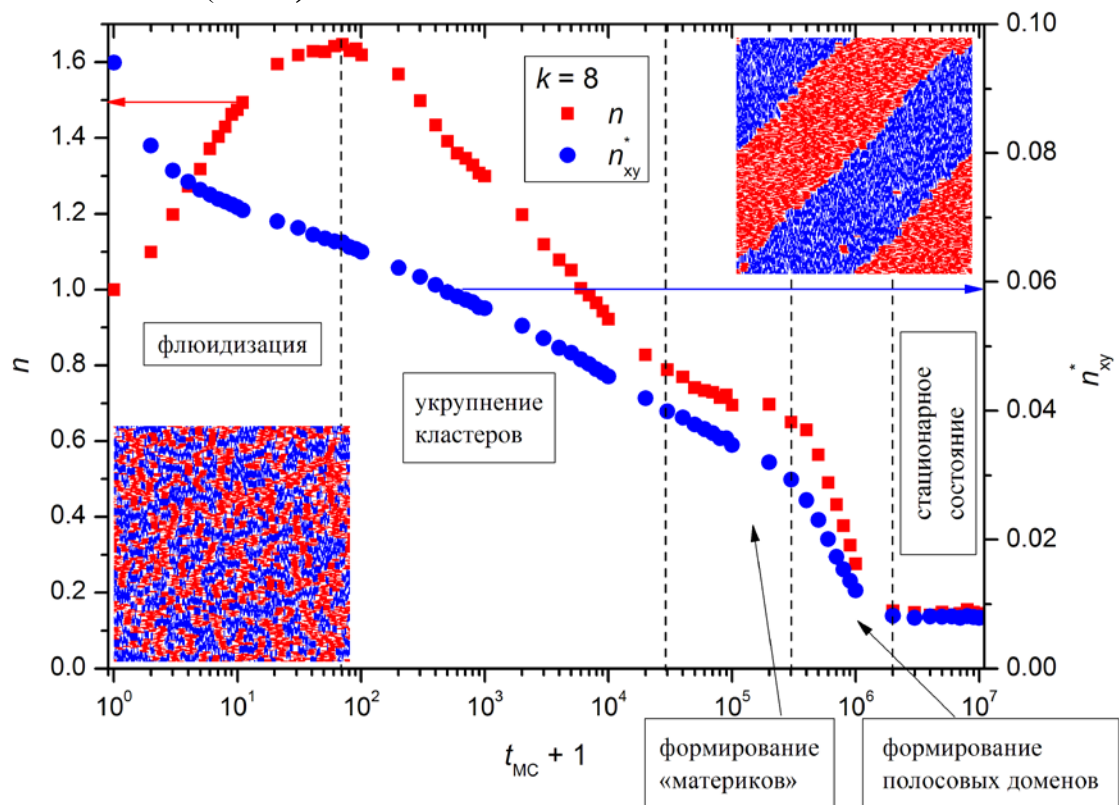


Рис.1 Пример формирования структуры в результате диффузии в двумерной системе стержней с отношением сторон  $k = 8$ , на решётке со стороной  $L = 256$ ; периодические граничные условия. Показано изменение с течением времени числа кластеров, состоящих из частиц одной пространственной ориентации,  $n$  (левая ось) и относительного числа межвидовых контактов  $n_{xy}^* = n_{xy} / (n_{xy} + n_x + n_y)$  (правая ось). Начальное изотропное состояние джамминга (вставка в левом нижнем углу), получено случайным последовательным осаждением  $k$ -меров на квадратную решётку. На вставке в правом верхнем углу представлено конечное стационарное состояние — полосовые домены, образовавшейся после  $10^7$  шагов МК

Мы связываем самоорганизацию с несколькими факторами: во-первых, нелинейная зависимость коэффициентов самодиффузии и кросс-диффузии от концентрации и их сильная анизотропия (Рис.2); во-вторых, конечность размеров системы, по-видимому, приводящая при наличии ПГУ к корреляциям движения частиц. Увеличение размера системы приводит к существенному увеличению времени релаксации к стационарному состоянию, что затрудняет комплексное исследование размерных эффектов за приемлемое время. Увеличение плотности заполнения системы частицами приводит к уменьшению коэффициента диффузии (Рис.2), что также увеличивает время релаксации.

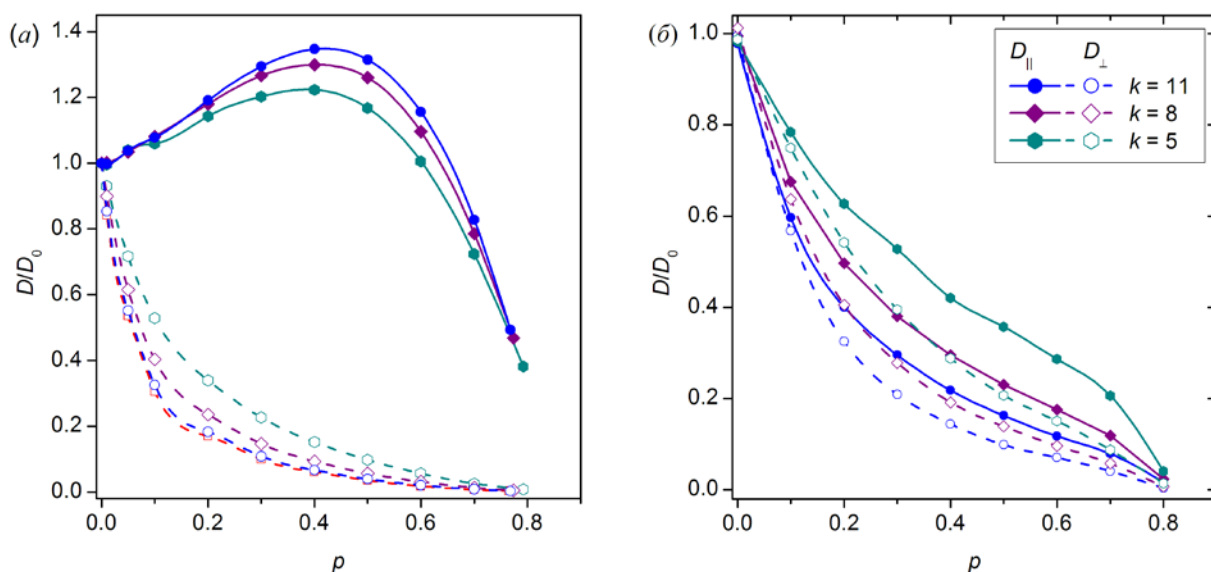


Рис. 2 Зависимости коэффициентов диффузии от концентрации (а) самодиффузия, (б) кросс-диффузия; легенда относится к обоим частям рисунка;  $D_{\parallel}$  — коэффициент диффузии при продольном смещении,  $D_{\perp}$  — коэффициент диффузии при поперечном смещении,  $D_0$  — коэффициент диффузии мономера ( $k=1$ )

Заметим, что различные модификации алгоритма RSA, например, end-on RSA, RSA с адсорбцией-десорбцией, RSA с диффузионной релаксацией, позволяют получать более плотные системы в состоянии джамминга, чем при использовании обычного механизма RSA. Наши исследования показали, что даже при незначительном превышении начальной плотности упаковки частиц концентрации джамминга RSA образование стационарных структур не удаётся зафиксировать за время проведения компьютерных экспериментов вплоть до  $10^8$  шагов МК. Например, при  $k=12$  максимальная плотность упаковки, достижимая с помощью алгоритма RSA, —  $p_j \approx 0.72384$ , а время выхода на стационарное состояние составляет примерно  $5 \cdot 10^6$  шагов МК; если же с помощью RSA с диффузионной релаксацией получить начальное состояние с плотностью упаковки  $p = 0.74 \approx 1.02 p_j$ , то система не выходит на стационарное упорядоченное состояние даже за  $10^8$  шагов МК.

При изменении начальной концентрации переход от однородного стационарного состояния к структурированному стационарному состоянию является непрерывным, т. е. полосовые домены становятся менее выраженными, когда начальная концентрация  $k$ -меров уменьшается. При некоторой начальной концентрации установившееся состояние выглядит вполне однородным.

Таким образом, можно утверждать, что формирование стационарных структур возможно только в некотором диапазоне концентраций, верхняя граница которого почти совпадает с концентрацией джамминга RSA.

Дополнительно исследовано образование структур при вертикальной сушке тонкой плёнки, содержащей стержнеподобные частицы [5]. Моделирование проводилось в прямоугольной области с ПГУ вдоль горизонтального направления, непроницаемой нижней границей и непроницаемой подвижной верхней границей. Скорость движения верхней границы связана со скоростью испарения растворителя. В этом случае конечное состояние системы представляет собой структуру в виде сэндвича — между двумя слоями горизонтально расположенных частиц заключён слой вертикально ориентированных частиц. Такая структура, естественно, является сильно анизотропной.

Таким образом, с помощью вертикальной сушки могут быть получены плёнки со значительной анизотропией электропроводности в горизонтальном и вертикальном направлениях. Анизотропию можно точно регулировать путем изменения значений начальных концентраций, отношения сторон частиц и скорости испарения. Такая анизотропия, по-видимому, является следствием различной связности, стратификации и уплотнения стеков  $k$ -меров, ориентированных в горизонтальном и вертикальном направлениях.

Наиболее важным, на наш взгляд, вопросом, требующим дополнительных исследований, является возможность построения континуального аналога описанной модели, демонстрирующего образование стационарных структур. Проведенные нами исследования показали, что в континуальном подходе для образования стационарных структур недостаточно учёта в уравнениях диффузии нелинейной зависимости коэффициентов диффузии от концентрации. Можно предположить, что для образования структур необходимы корреляции в движении частиц на расстояниях порядка размера системы. Для возникновения таких корреляций принципиально наличие ПГУ, не слишком большого отношения  $L/k$  и достаточной плотности частиц. В качестве альтернативного объяснения наблюдаемых процессов пространственной организации системы можно предположить механизмы, сходные со спиновальным распадом [9].

#### Список литературы

1. Aranson, I. S. Patterns and collective behavior in granular media: Theoretical concepts [Text] / Igor S. Aranson, Lev S. Tsimring // *Rev. Mod. Phys.* — 2006. — Jun. — Vol. 78. — P. 641–692.
2. Börzsönyi, T. Granular materials composed of shape-anisotropic grains [Text] / Tamás Börzsönyi, Ralf Stannarius // *Soft Matter*. — 2013. — Vol. 9, no. 31. — P. 7401–7418.
3. Ordering in granular-rod monolayers driven far from thermodynamic equilibrium [Text] / Thomas Müller, Daniel de las Heras, Ingo Rehberg, Kai Huang // *Phys. Rev. E*. — 2015. — Jun. — Vol. 91. — P. 062207.
4. Clustering in vibrated monolayers of granular rods [Text] / M. González-Pinto, F. Borondo, Y. Martínez-Ratón, E. Velasco // *Soft Matter*. — 2017. — Vol. 13. — P. 2571–2582.
5. Monte Carlo simulation of evaporation-driven self-assembly in suspensions of colloidal rods [Text] / Nikolai I. Lebovka, Nikolai V. Vygornitskii, Volodymyr A. Gigiberiya, Yuri Yu. Tarasevich // *Phys. Rev. E*. — 2016. — Dec. — Vol. 94. — P. 062803.
6. Diffusion-driven self-assembly of rodlike particles: Monte Carlo simulation on a square lattice [Text] / Nikolai I. Lebovka, Yuri Yu. Tarasevich, Volodymyr A. Gigiberiya, Nikolai V. Vygornitskii // *Phys. Rev. E*. — 2017. — May. — Vol. 95. — P. 052130.
7. Pattern formation in a two-dimensional two-species diffusion model with anisotropic nonlinear diffusivities: a lattice approach [Text] / Yuri Yu. Tarasevich, Valeri V. Laptev, Andrei S. Burmistrov, Nikolai I. Lebovka // *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.* — 2017. — Vol. 2017. — accepted 17 July 2017.
8. Evans, J. W. Random and cooperative sequential adsorption [Text] / J. W. Evans // *Rev. Mod. Phys.* — 1993. — Oct. — Vol. 65. — P. 1281–1329.
9. Green, M. J. Initial stage of spinodal decomposition in a rigid-rod system [Text] / Micah J. Green, Robert A. Brown, Robert C. Armstrong // *J. Chem. Phys.* — 2007. — Vol. 126, no. 3. — P. 034903.

# ДОЛГОВРЕМЕННАЯ ПАМЯТЬ ВО ВРЕМЕННЫХ РЯДАХ, ОПИСЫВАЮЩИХ ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЯ

А.Н. Мацулев<sup>1</sup>, А.А. Кабанов<sup>2</sup>, К.В. Симонов<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ИХХТ ФИЦ КНЦ СО РАН,  
ИФ им. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, [matsulev@iccr.ru](mailto:matsulev@iccr.ru)

<sup>2</sup>ИВТ СО РАН

<sup>3</sup>ИВМ СО РАН ФИЦ КНЦ СО РАН

## Введение

Есть некоторое противоречие в том, как мы *интуитивно* описываем природные процессы. Например, мы «знаем», что завтра погода будет примерно такая же, как сегодня, это отражает тот факт, что среднее значение этого случайного процесса нам примерно известно (с оговорками, конечно: это выборочное среднее и с учетом сезонных трендов). С другой стороны, мы «не знаем» какая будет погода завтра – это отражает понимание присутствия полной случайности, т.е. непредсказуемости погоды. Тем не менее, метеорология делает свои прогнозы.

Оригинальный анализа природных процессов был предложен инженером Гарольдом Э. Хёрстом [1], а затем получил математическое (фрактальная геометрия) обобщение в работах Бенуа Мандельброта [2-3]. В настоящее время этот метод весьма популярен при анализе финансовых рынков – случайных процессов с памятью [4]. В статистике этот подход называется RS-анализом (rescaled range).

Инженер-гидролог Г. Хёрст искал способ оценить высоту платины для водохранилища на реке. Для этой цели была важна не величина стока воды, а его накопление в водохранилище – суммарная за продолжительный период, с тем, чтобы при единовременном случайном экстремально-большом поступлении воды высота платины оказалось достаточной.

В математическом отношении указанная выше задача аналогична задаче о блуждании броуновской частицы [3]. В этом случае мы следим только за тем насколько далеко броуновская частица ушла от исходного положения за  $n$ -шагов. При этом не важно, как она двигалась на каждом отдельном шаге. Многие природные явления называются случайными процессами, обладающими «памятью», т.е. броуновская частица, в этом случае, помнит свои несколько предыдущих шагов, но потом забывает. Например, показано, что финансовые рынки обладают «памятью» [4]. Как оказывается «памятью» обладают и землетрясения.

## 1. Анализ временных рядов магнитуд землетрясений

При анализе временного ряда магнитуд землетрясений мы сталкиваемся с двумя случайными процессами с памятью: случайные интервалы времени между землетрясениями и случайные значения магнитуд тектонических толчков. Конечно, ряд магнитуд кажется более значимыми для практики, но для понимания сложной природы сейсмичности, следует анализировать оба временных ряда. На приведенном ниже рисунке

будут представлены 2 графика с временем по оси абсцисс и по оси ординат – накопленные отклонения (сумма последовательных отклонений от среднего значения) магнитуд и интервалов между толчками.

Для анализа мы выбрали данные о землетрясениях для всей Земли за период с 1 января 1910 по 2 марта 2016 года [5]. Выбор землетрясений для всей Земли в целом в качестве объекта данного анализа продиктован тем, что это позволяет при построении моделей рассматривать действующие силы обобщенно-упрощенно как внутриземные и внешние космические. Удобно также, что в этом случае, мы можем использовать время UTC (Coordinated Universal Time) – универсальное координированное время.

Выбор временного периода объясняется тем, что с течением времени для определения параметров землетрясений используются не полностью идентичные теоретические подходы и практические процедуры. Например, сейчас регистрация землетрясений большей частью автоматизирована, а в начале 20 века – это делали люди, кроме того в прошлые времена слабые землетрясения просто не регистрировались. Поэтому естественным выглядит и то, что в настоящей работе мы будем анализировать только сильнейшие землетрясения с магнитудами более 7 (Рис. 1).

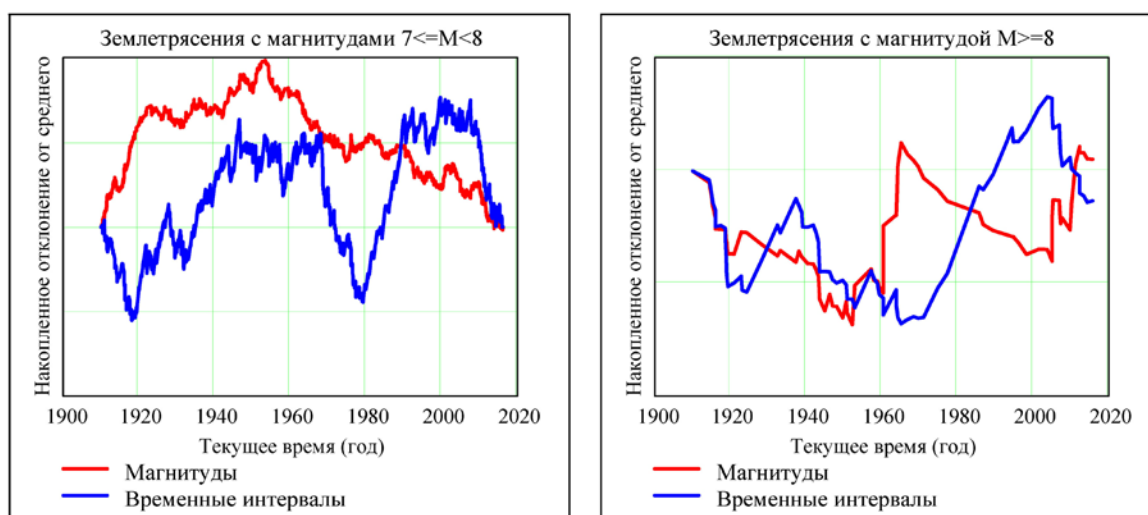


Рис. 1. Накопленные отклонения от средних по всей выборке для магнитуд ( $M$ ) землетрясений (указаны над графиками) и интервала между толчками, определенных по временным рядам землетрясений на Земле в период с 1 января 1910 г. по 2 марта 2016 г.

За период с 01.01.1910 по 02.03.2016 гг. по каталогу [5] имело место 901 землетрясение с магнитудой  $7 \leq M < 8$  (выборка 1) и только 78 событий с  $M \geq 8$  (выборка 2). Разумеется, что распределения для каждой выборки не являются Гауссовыми, но для получения общего представления о рядах приведем их средние значения и среднеквадратичные отклонения:

- 1-я выборка:  $\langle M_1 \rangle = 7.441$ ,  $\delta_{M,1} = 0.286$ ,  $\langle \Delta t_1 \rangle = 43.038$  дня,  $\delta_{\Delta t,1} = 47.287$  дней;

- 2-я выборка:  $\langle M_2 \rangle = 8.306$ ,  $\delta_{M,2} = 0.285$ ,  $\langle \Delta t_2 \rangle = 1.355$  года,  $\delta_{\Delta t,2} = 1.416$  года.

Если среднее значение для анализируемого ряда определено, то далее можно рассматривать отклонения каждой величины от этого среднего и суммировать отклонения последовательно шаг за шагом, получая тем самым накопленное отклонение от среднего. Полагаем, что накопленное отклонение всего ряда в целом должно свестись к нулю – это удобно для представления графика текущего накопления от времени.

Итак, на рисунке представлены 4 временных ряда для 2-х выборок землетрясений по величине их магнитуды. Следует отметить, что для удобства анализа в каждой выборке графики накопленных отклонений от средней магнитуды (красная кривая) и промежутка между толчками (синяя кривая) были шкалированы так, чтобы размах колебаний, представляемый линиями графиков, был примерно сопоставим.

Из графиков видно, что имеют место достаточно длинные (многолетние) тренды – периоды возрастания, сменяющиеся периодами убывания – это достаточно неожиданно, т.к. исходные временные ряды магнитуд землетрясений производят впечатление полностью случайного процесса. Наличие подобных трендов говорит о том, что система обладает памятью о предыдущих событиях, что на математическом языке еще означает наличие самоподобия, как бы внутреннего шаблона. Этот шаблон, как показали наши собственные исследования и др. авторы, очень трудно обнаружить методами Фурье-спектроскопии и вейвлет-анализа.

## 2. Выделение и анализ последовательностей землетрясений при решении прогностических задач

В качестве подхода для выделения и анализа последовательностей землетрясений при решении прогностических задач рассмотрим следующую процедуру. Для изучаемой территории после уточнения положения (границ) сейсмоактивных элементов (разломов, блоков) и совмещения их положения с эпицентральной полем исходного сейсмического каталога, необходимо выделить информационную прогнозную ячейку (круговой или эллиптической формы) с параметрами, соответствующими прогнозируемому сейсмическому событию. В табл. приведены оценки параметров прогнозной информационной ячейки исходя из многолетнего опыта сейсмологических наблюдений.

Таблица

Оценки параметров прогнозной информационной ячейки

| Прогнозная магнитуда | Радиус прогнозной ячейки |
|----------------------|--------------------------|
| M1=4.0               | R1=70 км                 |
| M2=5.0               | R2=100 км                |
| M3=6.0               | R3=150 км                |

|        |           |
|--------|-----------|
| M4=7.0 | R4=200 км |
| M5=8.0 | R5=300 км |
| M6=9.0 | R6=400 км |

Как следует из таблицы для значимых (по последствиям) землетрясений с  $M$  от 4,0 до 5,0 информационная ячейка имеет радиус около 100 км. В случае приуроченности прогнозируемого события к сейсмоактивному разлому, целесообразно информационную прогнозную ячейку выбирать в форме эллипса с отношением осей 1:2. Применительно к землетрясению с  $M \approx 5,0$  эллипсоидная ячейка будет иметь большую ось протяженностью 200 км вдоль разлома и малую ось – 100 км поперек разлома.

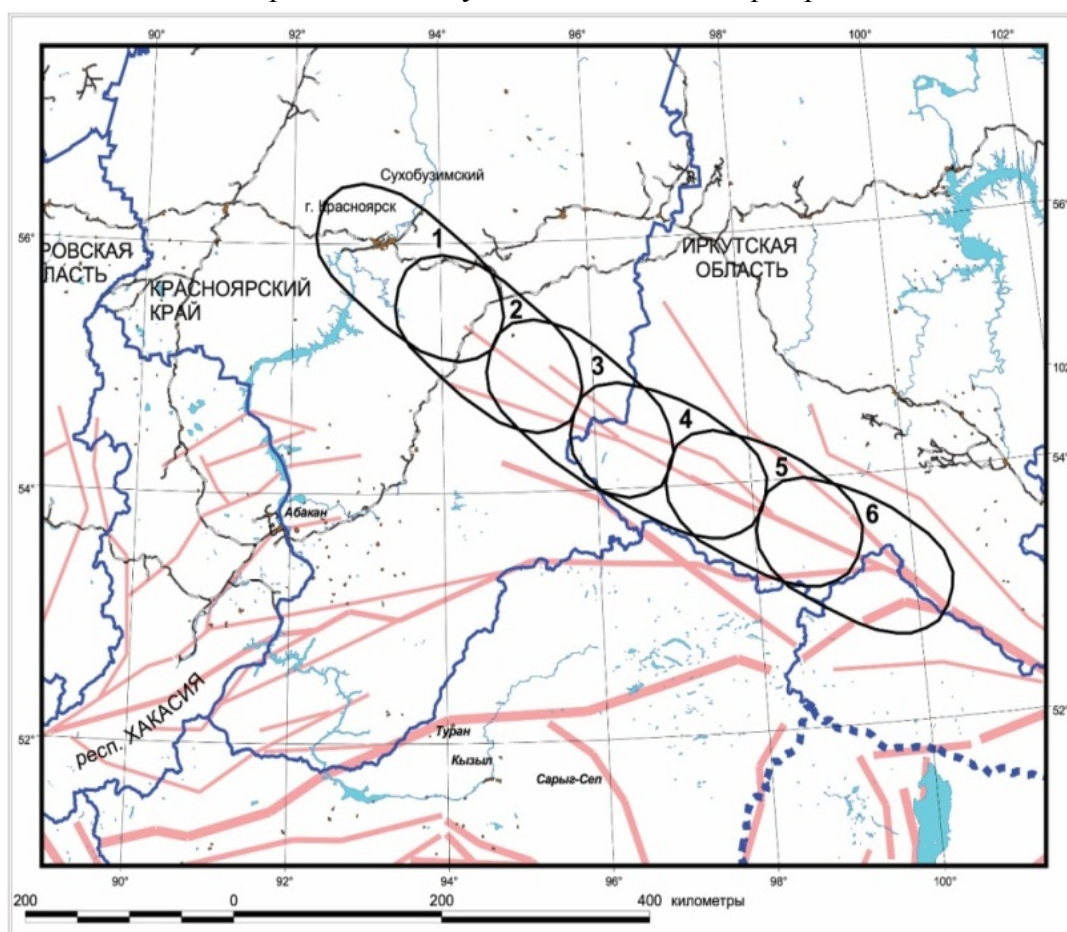


Рис. 2. Пример сканирования информационной ячейкой особенности сейсмического режима зоны Главного Саянского разлома.

В пределах каждой информационной ячейки необходимо выбрать из каталога сейсмические события за анализируемый период (10-15 лет) и построить временной энергетический ряд  $M=f(t)$ . Временной ряд должен быть информационно представительным. Представительность исходного временного ряда  $M=f(t)$  определяется с одной стороны сейсмичностью региона (объективный фактор), так и параметрами существующей сейсмической сети в регионе.

Характер энергетических сейсмических процессов в земной коре консервативен и устойчив на протяжении от нескольких до десятков лет. В то же время, анализ энергетических процессов в соседних информационных ячейках (при сканировании эпицентрального поля с шагом, как правило, равным  $\frac{1}{2}$  большой оси информационной ячейки) позволяет выявлять интервалы времени смены характера сейсмического процесса и таким образом понизить уровень субъективизма при выделении особенностей (энергетических уровней) в пределах каждой информационной ячейки и повысить точность оценок параметров ожидаемого сильного землетрясения.

На рисунке 2 приведен пример сканирования информационной ячейкой особенности сейсмического режима зоны Главного Саянского разлома.

### **Заключение**

1. Показано, что изучаемые временные ряды обладают «памятью» и представленные на рисунке случайные процессы достаточно независимы.

2. Способ построения и анализа временных последовательностей землетрясений в рамках «информационных ячеек» позволяет решать прогностические задачи.

### **Список литературы**

1. Hurst H.E. Long-Term Storage Capacity in Reservoirs / H.E. Hurst // Transactions of the American Society of Civil Engineers. – 1951. - Vol.55 - P. 400-410.
2. Mandelbrot B.B. Noah, Joseph, and operational hydrology / B.B. Mandelbrot; J.R. Wallis // Water Resources Research. – 1968. – Vol.4. – № 5. – P.909-918.
3. Mandelbrot B.B. Fractional Brownian motions, fractional noises and applications / B.B. Mandelbrot and J.W. Van Ness // SIAM Review. – 1968. – Vol.10. – №4. – P.422-437.
4. Long-Term Memory in Stock Market Prices / A.W. Lo // Econometrica. – 1991. - Vol.59. - №.5. - P.1279-1313.
5. United States Geological Survey's (USGS) Earthquake Hazards Program, Search Earthquake Archives. [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: <http://earthquake.usgs.gov/earthquakes/search/> (дата доступа 03.04.2016)

# ЭФФЕКТЫ ОПТИЧЕСКИХ ВНУТРИЦЕЛЕВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СУПЕРОБМЕННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ В $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , С НЕРАВНОВЕСНЫМИ ФОТОВОЗБУЖДЁННЫМИ ЦЕНТРАМИ<sup>4</sup>

С.И.Полукеев<sup>1</sup>, В.А.Гавричков<sup>1</sup>, С.Г.Овчинников<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики СО РАН, [dir@iph.krasn.ru](mailto:dir@iph.krasn.ru)

<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, [office@sfu-kras.ru](mailto:office@sfu-kras.ru)

Понимание переноса энергии между зарядовыми, орбитальными и спиновыми степенями свободы – важная проблема многих областей физики конденсированного состояния. С первых экспериментов оптическое возбуждение электронных спинов и динамика сверхбыстрого намагничивания привлекли много внимания. Возможность управлять обменным взаимодействием с помощью света важна во многих областях физики, от квантовых вычислений до сильно коррелированных систем. Во многих экспериментах было обнаружено влияние оптической накачки на обменное взаимодействие в мотт-хаббардовских диэлектриках.

В данной работе было вычислено обменное взаимодействие в недопированном купрате  $\text{La}_{214}$  при оптической накачке с помощью обобщённого LDA+GTB (generalized tight binding) метода. Чтобы учесть эффект оптической накачки, в работе были включены возбуждённые однодырочные локальные  $l$ - и  $l'$ - состояния, а также  $\mu$ -двухдырочные синглеты и триплеты. В итоге было получено изменение обменного взаимодействия

$$\delta H_{s-ex} = - \sum_{ij} \sum_{ll'} J_{ij}^{ll'} \left( S_{il} S_{jl'} - \frac{1}{4} n_l n_{l'} \right), \quad (1)$$

индуцированное стационарным световым облучением. Здесь

$$J_{ij}^{ll'} = \sum_{\mu} \frac{2 \left( t_{ij}^{l0,l'\mu} \right)^2}{\Delta_{ll'\mu}}, \quad (2)$$

где  $t_{ij}^{l0,l'\mu}$  - интеграл перескока, включающий все возможные основные и возбуждённые состояния ячейки,  $\Delta_{ll'\mu} = \varepsilon_{\mu} + \varepsilon_0 - (\varepsilon_l + \varepsilon_{l'})$  - аналог хаббардовского отталкивания  $U$  в реальном конфигурационном пространстве мотт-хаббардовского материала.

Выражение оптически стимулированного ненулевого заполнения  $p_l$  ( $\sum_l p_l = 1$ ) возбуждённых состояний в приближении среднего поля для обменной части энергии:

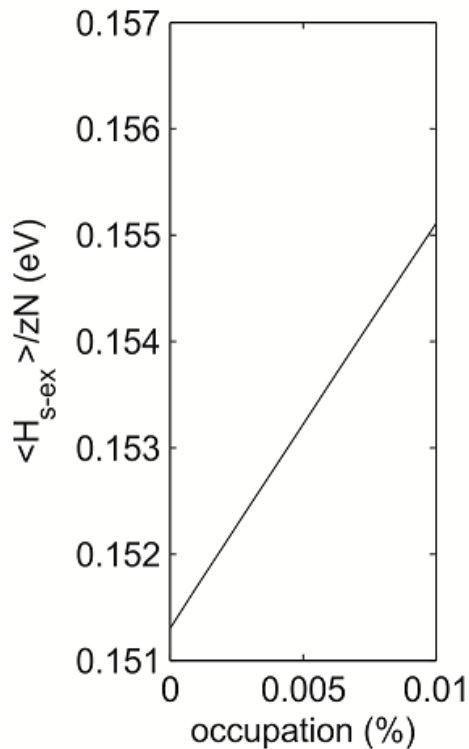
$$\langle \hat{H}_{s-ex} \rangle \approx - \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{ll'} J_{ij}^{ll'} \langle X_i^{l\sigma l\sigma} \rangle \langle X_j^{l'\bar{\sigma} l'\bar{\sigma}} \rangle \approx - \frac{zN}{2} \left[ J_{\langle ij \rangle}^{l_0 l_0} p_{l_1}^2 + 2 \sum_{l \neq l_0} J_{\langle ij \rangle}^{l l_0} p_l p_{l_0} + \sum_{l, l' \neq l_0} J_{\langle ij \rangle}^{ll'} p_l p_{l'} \right], \quad (3)$$

имеет место только на резонансной частоте  $h\nu = \varepsilon_l - \varepsilon_{l_0}$ . Таким образом, влияние световой накачки на суперобмен (1) являются частотно селективными и линейными по амплитуде облучения.

Данный подход был протестирован на недопированном материале  $\text{La}_{214}$  с высокой  $T_c$ . Используя параметры LDA для купрата  $\text{La}_{214}$ , был получен результат, показан-

<sup>4</sup> Работа была поддержана грантами РФФИ 16-02-00273, No.16-02-00098, NSh-7559.2016.2 и Красноярского краевого фонда науки No. 17-42-240212

ный на рисунке, который подразумевает, что скорее всего суперобменный вклад будет возрастать при сколько угодно малом заполнении однодырочных возбуждённых локальных состояний в La214 на множитель  $\sim 4 \times 10^{-3} \text{ eV} / (\%)$ .



Зависимость антиферромагнитного вклада (3) от заполнения  $p_1$  первого возбуждённого однодырочного состояния.

#### Список литературы

1. Kirilyuk, A., Kimel, A. V., Rasing, T., Ultrafast optical manipulation of magnetic order, *Rev. Mod. Phys.* 82(2010), 2731-2784.
2. de Graaf, C., Broer, R., Midinfrared spectrum of undoped cuprates: d-d transitions studied by ab initio methods, *Phys. Rev. B*, 62(2000), 702-709.
3. Mikhaylovskiy, R. V., Hendry, E., Kruglyak, V. V., Pisarev, R. V., Rasing, T., Kimel, A.V., Terahertz emission spectroscopy of laser-induced spin dynamics in TmFeO3 and ErFeO3 orthoferrites, *Phys. Rev. B* 90(2014), 184405.
4. Mikhaylovskiy, R. V., Hendry, E., Secchi, A., Mentink, J. H., Eckstein, M., Pisarev, A. W. R. V., Kruglyak, V. V., Katsnelson, M. I., Rasing, T., Kimel, A., Ultrafast optical modification of exchange interactions in iron oxides, *Nature Communications* 6(2015), 1-9.
5. Katsnelson, M. I., Lichtenstein, A. I., First-principles calculations of magnetic interactions in correlated systems, *Phys. Rev. B* 61(2000), 8906-8912.
6. Mazurenko, V. V., Anisimov, V. I., Weak ferromagnetism in antiferromagnets: alfa Fe2O3 and La2CuO4, *Phys. Rev. B* 71(2005), 184434.
7. Boukhvalov, D. W., Lichtenstein, A. I., Dobrovitski, V. V., Katsnelson, M. I., Harmon, B.

- N.; Mazurenko, V. V., Anisimov, V. I., Effect of local Coulomb interactions on the electronic structure and exchange interactions in Mn<sub>12</sub> magnetic molecules, *Phys. Rev. B* 65(2002), 184435.
8. Korshunov, M. M., Gavrichkov, V. A., Ovchinnikov, S. G., Nekrasov, I. A., Pchelkina, Z. V., Anisimov, V. I., Hybrid LDA and generalized tight-binding method for electronic structure calculations of strongly correlated electron systems, *Phys. Rev. B* 72(2005), 165104.
  9. Ovchinnikov, S. G., Zabluda, V. N., Energy structure and optical spectra taking into account of strong electron correlations, *ZETF* 125(2004), 150-159.
  10. Gavrichkov, V. A., A simple metal-insulator criterion for the doped Mott-Hubbard materials, *Sol. State Comm.* 208(2015), 11-14.
  11. Khaliullin, G., Horsch, P., Oles, A. M., Theory of optical spectral weights in Mott insulators with orbital degrees of freedom, *Phys. Rev. B* 70(2004), 195103(1-6).
  12. Eskes, H., Jefferson, J. H., Superexchange in the cuprates, *Phys. Rev. B* 48(1993), 9788.
  13. Jefferson, J. H., Eskes, H., Feiner, L. F., Derivation of a single band model for CuO<sub>2</sub> planes by cell perturbation method, *Phys. Rev. B* 45(1992), 7959.
  14. Feiner, L. F., Jefferson, J. H., Raimondi, R., Effective single band models for high *T<sub>c</sub>* cuprates. I. Coulomb interactions, *Phys. Rev. B* 53(1996), 8751.
  15. Raimondi, R., Jefferson, J. H., Feiner, L. F., Effective single-band models for the high-*T<sub>c</sub>* cuprates. II. Role of apical oxygen, *Phys. Rev. B* 53(1996), 8774-8788.
  16. Gavrichkov, V. A., Ovchinnikov, S. G., Influence of Two-Particle Excited States on the Interatomic Exchange Interaction in La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>, *Physics of the Solid State* 50(2008), 1081–1086.
  17. Hubbard, J., Electron Correlations in Narrow Energy Bands.IV. The Atomic Representation, *Proc.Roy.Soc. A* 285(1965), 542.
  18. Gavrichkov, V. A., Pchelkina, Z. V., Nekrasov, I. A., Ovchinnikov, S. G., Pressure effect on the energy structure and superexchange interaction in undoped orthorhombic La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>, *Int. J. Mod. Phys. B* 30(2016), 1650180.
  19. Anderson, P. W. Rado, G. (Ed.), Exchange in Insulators: Superexchange, Direct Exchange, and Double Exchange, *Elsevier Inc.* II(1963), 25-81.
  20. Chao, K. A., Spalek, J., Oles, A. M., Kinetic exchange interaction in a narrow S-band, *Journal of Physics C: Solid State Physics* 10(1977), L271.
  21. Shastry, B. S., t-J Model and Nuclear Magnetic Relaxation in High-*T<sub>c</sub>* Materials, *Phys. Rev. Lett.* 63(1989), 1288-1291.
  22. Gavrichkov, V. A., Borisov, A. A., Ovchinnikov, S. G., Angle-resolved photoemission data and quasiparticle spectra in antiferromagnetic insulators Sr<sub>2</sub>CuO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> and Ca<sub>2</sub>CuO<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, *Phys. Rev. B* 64(2001), 235124.
  23. Gavrichkov, V. A., Ovchinnikov, S. G., Yakimov, L. E., The Role of Orbital Ordering in the Formation of Electron Structure in Undoped LaMnO<sub>3</sub> Manganites in the Regime of Strong Electron Correlations, *JETP* 102(2006), 972–985.
  24. Gavrichkov, V. A., Ovchinnikov, S. G., Pchelkina, Z. V., Nekrasov, I. A., Quasiparticle in CMR oxides in para- and ferromagnetic phases, *J. Phys.: Conf. Ser. - 2010. - Vol. 200. - P. 012046.* 200(2010), 012046.

25. Gavrichkov, V. A., Ovchinnikov, S. G., Nekrasov, I. A., Pchelkina, Z. V., Electronic Structure of p-Type  $\text{La}_{1-x}\text{MnO}_3$  Manganites in the Ferromagnetic and Paramagnetic Phases in the LDA + GTB Approach, *JETP* 112(2001), 860–876.
26. Ovchinnikov, S. G., Orlov, Y. S., Nekrasov, I. A., Pchelkina, Z. V., Electronic Structure, Magnetic Properties, and Mechanism of the Insulator–Metal Transition in  $\text{LaCoO}_3$  Taking into Account Strong Electron Correlations, *JETP* 112(2011), 140-151.
27. Orlov, Y. S., Solovyov, L. A., Dudnikov, V. A., Fedorov, A. S., Kuzubov, A. A., Kazak, N. V., Voronov, V. N., Vereshchagin, S. N., Shishkina, N. N., Perov, N. S., Lamonova, K. V., Babkin, R. Y., Pashkevich, Y. G., G.Anshits, A., Ovchinnikov, S. G., Structural properties and high-temperature spin and electronic transitions in  $\text{GdCoO}_3$ : Experiment and theory, *Phys. Rev. B* 88(2013), 235105.
28. Ovchinnikov, S. G., Val'kov, V. V., Hubbard operators in the theory strongly correlated electrons, *Imperial College Press, London* (2004), 241.
29. Ovchinnikov, S. G., Gavrichkov, V. A., Korshunov, M. M., Shneyder, E. I. Avella, A., Mancini, F. (Eds.), Springer Series in Solid-State Sciences LDA+GTB method for band structure calculations in the strongly correlated materials. In the “Theoretical Methods for strongly Correlated systems”, *Volume 171, Springer Berlin Heidelberg* 171(2012), 143-171.
30. Zaitsev, R. O., Generalized diagram technique and spin waves in an anisotropic ferromagnet, *JETP* 41(1975), 100.
31. Gaididei, Y. B., Loktev, V. M., On a Theory of the Electronic Spectrum and Magnetic Properties of High- $T_c$  Superconductors, *Phys. Status Solidi B* 147(1988), 307.
32. Varma, V., Schmitt-Rink, S., Abrahams, E., Charge transfer excitations and superconductivity in “ionic” metals, *Solid State Communications* 62(1987), 681.
33. Emery, V. J., Theory of High- $T_c$  Superconductivity in Oxides, *Phys. Rev. Lett.* 58(1987), 2794-2797.
34. Zaanen, J., Oles, A. M., Canonical perturbation theory and the two-band model for high- $T_c$  superconductors, *Phys. Rev. B* 37(1988), 9423-9438.
35. Eskes, H., Sawatzky, G. A., Feiner, L. F., Effective transfer for singlets formed by hole doping in the high- $T_c$  superconductors, *Physica C* 160(1989), 424.
36. Ohta, Y., Tohyama, T., Maekawa, S., Charge-transfer gap and superexchange interaction in insulating cuprates, *Phys. Rev. Lett.* 66(1991), 1228.
37. Stechel, E. B., Jennison, D. R., Electronic structure of  $\text{CuO}_2$  sheets and spin-driven high- $T_c$  superconductivity, *Phys. Rev. B* 38(1988), 4632.
38. Annett, J. F., Martin, R. M., McMahan, A. K., Satpathy, S., Electronic Hamiltonian and antiferromagnetic interactions in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , *Phys. Rev. B* 40(1989), 2620.
39. Eremin, M. V., Rakitin, Y. V., Kinetic exchange at low charge transfer energies, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 14(1981), 247-253.

## КОНДЕНСАЦИЯ КЛАСТЕРОВ ЛИТИЯ

А.В. Попов

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,  
каф. современных специальных материалов, *Popov.Barnaul@mail.ru*

В последние годы появился определенный интерес к возможности создания новых материалов с использованием кластеров в качестве альтернативных строительных блоков [1, 2]. Наибольшие успехи были достигнуты в теоретическом изучении кластеров лития ввиду его самой простой электронной конфигурации из всех щелочных металлов. Это позволило исследователям накопить знания и опыт для целенаправленного усовершенствования свойств литийсодержащих материалов и производства на их основе новых материалов с заранее заданными свойствами. Несмотря на это, многие вопросы синтеза новых материалов на основе лития остаются нерешенными, в частности, отсутствует полное, четкое и ясное понимание процессов формирования наноструктур, в том числе в процессе самосборки. Наиболее популярными являются методы расчета электронной структуры вещества в основном состоянии. Однако больший интерес представляют возбуждения: тепловые, вакансионные, примесные, электромагнитные и др., в которых пребывают электроны реального вещества. Более того, измерить какие-либо характеристики электронов, находящихся в основном состоянии, означает: оказать на них воздействие, перевести их в возбужденное состояние. К сожалению, проблема описания возбужденных электронных состояний в многоатомных системах на сегодняшний день полностью не решена. Особую актуальность данная проблема приобретает при изучении кластеров ввиду их высокой реакционной способности. Для их дальнейшего эффективного применения необходимо иметь понимание, при каких условиях происходит стабилизация наноразмерных элементов лития.

Наиболее полное и глубокое понимание процессов, проходящих при переходе из одного промежуточного состояния в другое, может быть достигнуто лишь на основе такой теории, которая позволила бы в рамках единой схемы рассчитать большую совокупность различных свойств материала, достаточно надежно подтвержденных экспериментом. В работе [3] была предложена оригинальная методика описания конденсации кластеров в ситуации, когда взаимодействие с окружающими кластерами мало, но пренебречь им нельзя. Данная методика позволяет учесть вклад сплошного спектра без введения виртуальных орбиталей и при этом существенно уменьшить трудоемкость расчетов. На примере бериллия была продемонстрирована работоспособность расчетного метода, поэтому он был взят для моделирования кристаллизации лития.

Известно, что металлический литий в кристаллическом состоянии имеет объемноцентрированную кубическую (ОЦК) кристаллическую решетку, поэтому все расчеты были выполнены для ОЦК-лития. Параметр  $a$  варьировался от сорока до трех боровских радиусов. Результаты вычислений, представленные на рис.1, показывают, что полная энергия электронной системы ОЦК-лития имеет минимум при значении  $a=6.597$  боровских радиусов. Отметим, что это значение лежит в пределах разброса

экспериментальных данных, полученных разными авторами. На рис.2

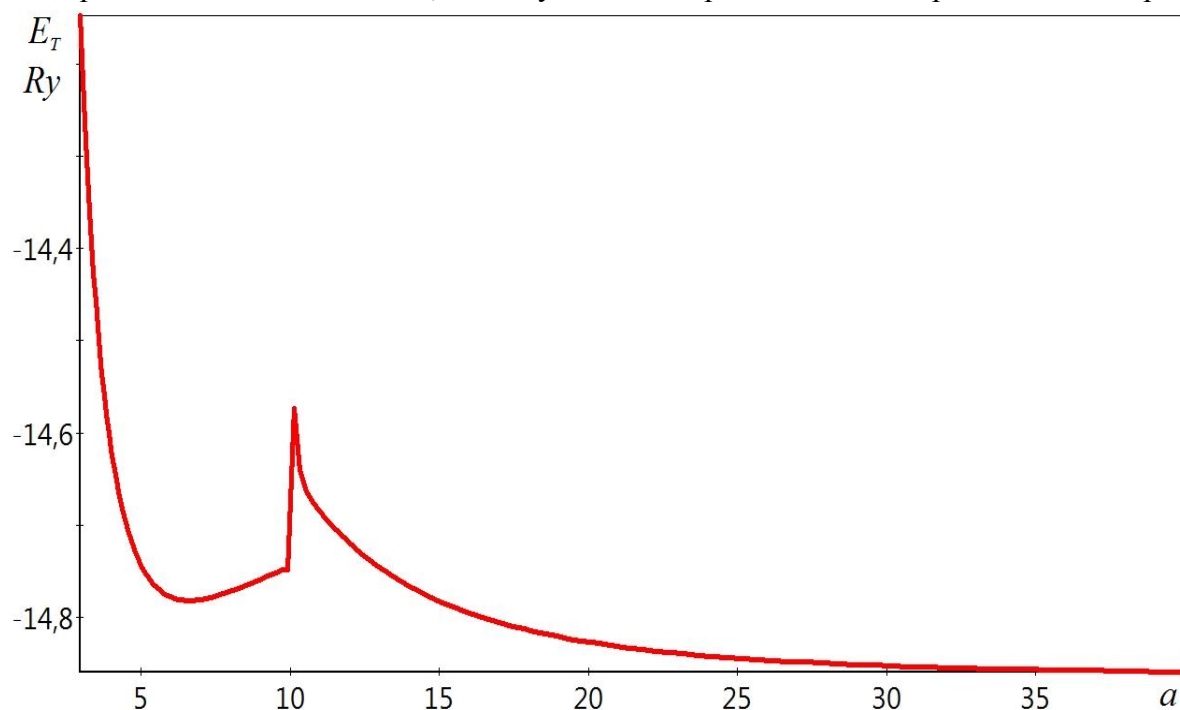


Рис.1. Полная энергия  $E_T$  в Ридбергах для электронов ОЦК-лития в зависимости от параметра решетки  $a$  – в боровских радиусах.

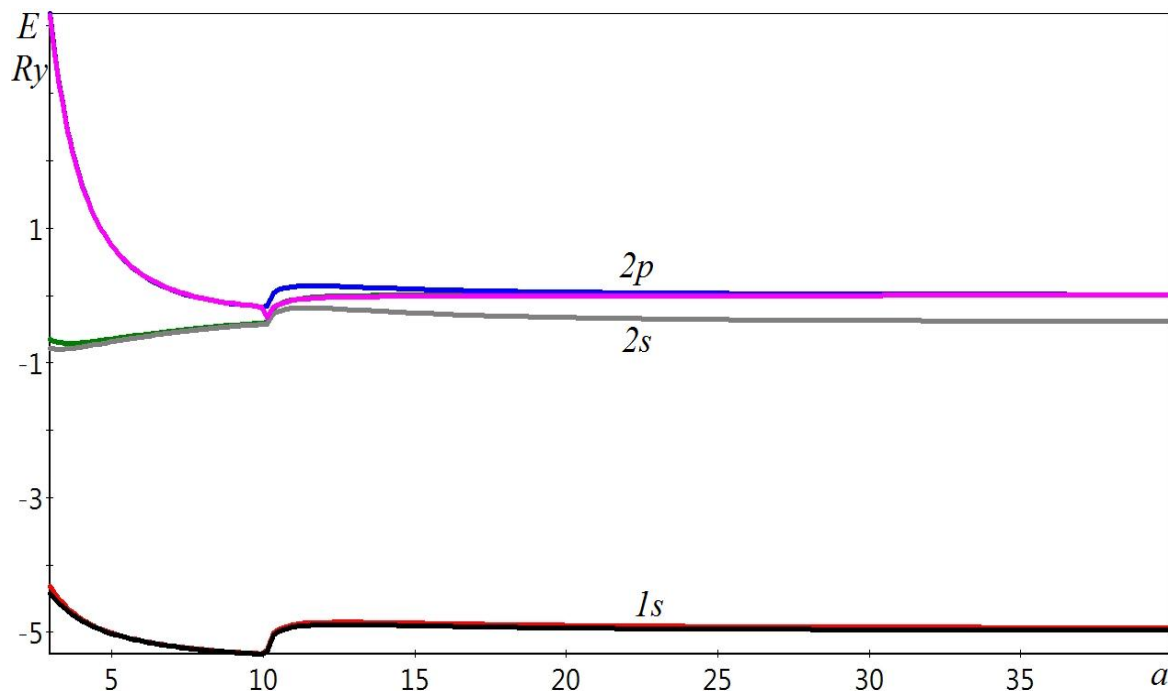
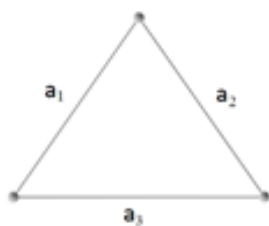


Рис.2. Энергетические уровни энергии  $E$  в Ридбергах для электронов ОЦК-лития в зависимости от параметра решетки  $a$  – в боровских радиусах.

приведены энергетические состояния электронов симметрии 1s, 2s, 2p со спином «вниз» и со спином «вверх» в ОЦК-литии. Прочие уровни энергии здесь не приводятся, чтобы не загромождать рисунок. Результаты расчета показывают, что при уменьшении значения параметра  $a$  начиная с десяти боровских радиусов наблюдается s-p гибридизация внешних состояний, повлиявшая и на состояния электронов 1s-симметрии. Именно при столь малых значениях  $a$  используемое в расчетах приближение «средней k-зоны» [3] может оказаться неоправданным для лития. Согласие вычисленного значения  $a$  – постоянной ОЦК решетки с экспериментом объясняется тем, что полная энергия, по минимуму которой было определено это значение, является интегральной характеристикой. В целом, полученные результаты не противоречат и данным работ [4, 5].

Наличие высокого потенциального барьера порядка 0.15 Ry при значении параметра  $a$  ОЦК-решетки вблизи десяти боровских радиусов (см. рис.1) показывает, что переход из газовой фазы напрямую в кристаллическую фазу (либо обратно) весьма затруднен. Более выгодный по энергии и, скорее всего, реализуется на практике переход через ряд возбужденных или метастабильных состояний с образованием многоатомных кластеров. На это указывают расчеты полной энергии равновесных конфигураций кластеров в решетке ОЦК с параметром  $a$  большим настолько, что взаимодействием между кластерами, находящимися в разных ячейках, можно пренебречь. Для этого достаточно взять  $a = 40$  боровским радиусам. Полные энергии в Ридбергах для малых кластеров лития в расчете на один атом приведены в табл.1. Здесь указаны энергии для наиболее стабильных структур из всех обнаруженных нами, т.е. обладающих наименьшими значениями полной энергии. Расчеты выполнены неограниченным по спину методом Хартри-Фока, а также в рамках теории функционала электронной плотности с использованием обменно-корреляционного потенциала Perdew-Wang 1991 (PW91). Оказывается, что существование двухатомного кластера  $Li_2$  энергетически более выгодно, чем существование этих атомов порознь. Еще более выгодным оказывается существование  $Li_3$ ,  $Li_4$ ,  $Li_6$ ,  $Li_7$ . Возможно, что через образование таких и, быть может, еще более тяжелых кластеров происходит кристаллизация [6]. Даже существование кластера  $Li_5$ , оказывается энергетически более выгодным, чем существование двух отдельных кластеров  $Li_3$  и  $Li_2$ , и даже двух отдельных кластеров  $Li_4$  и  $Li_1$ . Равновесные структуры кластеров  $Li_3$ ,  $Li_4$ ,  $Li_5$ ,  $Li_6$  изображены на рис. 3. В ходе расчетов выяснилось, что чем больше атомов в кластере, тем большим числом метастабильных состояний он обладает. Еще большее разнообразие структур кластеров возникает при рассмотрении неравновесных состояний. Роль неравновесности в электронной подсистеме для структурной перестройки рассмотрена в [7].

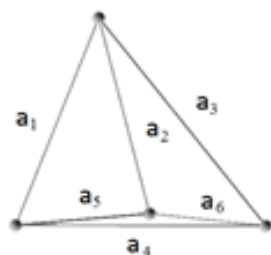


Li<sub>3</sub>

$$a_1=5.42$$

$$a_2=5.42$$

$$a_3=6.25$$



Li<sub>4</sub>

$$a_1=5.18$$

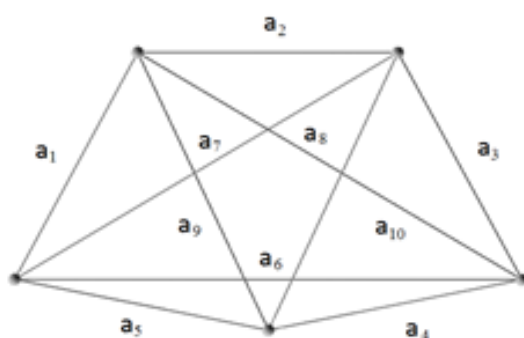
$$a_4=5.57$$

$$a_2=5.52$$

$$a_5=3.46$$

$$a_3=6.01$$

$$a_6=3.51$$



Li<sub>5</sub>

$$a_1=5.84$$

$$a_6=11.49$$

$$a_2=5.90$$

$$a_7=10.09$$

$$a_3=5.84$$

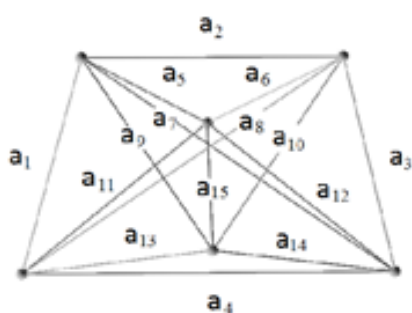
$$a_8=10.09$$

$$a_4=5.86$$

$$a_9=6.92$$

$$a_5=5.86$$

$$a_{10}=6.92$$



Li<sub>6</sub>

$$a_1=6.83$$

$$a_6=5.66$$

$$a_{11}=5.74$$

$$a_2=6.22$$

$$a_7=10.09$$

$$a_{12}=5.74$$

$$a_3=6.83$$

$$a_8=10.09$$

$$a_{13}=5.74$$

$$a_4=8.87$$

$$a_9=5.66$$

$$a_{14}=5.74$$

$$a_5=5.66$$

$$a_{10}=5.66$$

$$a_{15}=4.94$$

Рис.3. Равновесные структуры малых кластеров лития. Расстояния между атомами приведено в боровских радиусах.

Таблица 1

Значения полных энергий  $E_T$  в Ридбергах на атом для равновесных конфигураций малых кластеров лития в приближении Хартри-Фока ( $E_T^{HF}$ ) и в приближении теории функционала плотности ( $E_T^{DFT}$ ).

| Кластер              | $Li_1$  | $Li_2$  | $Li_3$  | $Li_4$  | $Li_5$  | $Li_6$  | $Li_7$  |
|----------------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|
| $E_T^{HF}, Ry/atom$  | -14.863 | -14.869 | -14.876 | -14.886 | -14.883 | -14.887 | -14.889 |
| $E_T^{DFT}, Ry/atom$ | -14.943 | -14.950 | -14.955 | -14.992 | -14.996 | -15.004 | -15.011 |

## Список литературы

1. Jena P. Beyond the Periodic Table of Elements: The Role of Superatoms / P. Jena // The Journal of Physical Chemistry Letters — 2013. — V.4. — P.1432.
2. Brito B.G.A. A quantum Monte Carlo study of the structural and electronic properties of small cationic and neutral lithium clusters / B.G.A. Brito, G.-Q.Hai, and Ladir Cândido // The Journal of Chemical Physics. — 2017. — V.146. — P. 174306.
3. Попов А.В. Конденсация кластеров бериллия / А.В. Попов // Физика твердого тела. — 2008. — V.50. — P. 759.
4. Callaway J. Total energy of metallic lithium / J. Callaway, X. Zou, D. Bagayoko // Physical Review B. — 1983. — V.27. — P. 631.
5. Попов В.А. Температурная зависимость энергетической зонной структуры электронов металлического лития / В.А. Попов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1996. — Т.110. — С. 1474.
6. Попов А.В. Применение несамосопряженных операторов для описания электронных возбуждений в металлическом литии / А.В. Попов // Кристаллография. — 2016. — Т.61. — С. 5.
7. Кащенко М. П. Динамическая модель сверхзвукового роста мартенситных кристаллов / М.П. Кащенко, В.Г. Чашина // Успехи физических наук. — 2011. — Т.181. — С. 345.

# КВАНТОВАЯ МОДЕЛЬ НАРОДОНАСЕЛЕНИЯ

В.А. Попов

Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова,  
*pva379@mail.ru*

Известно, что социальное, экономическое, культурное, политическое развитие какого-либо региона тесно связано с демографическим прогнозом, часто используемым в качестве основы для планирования [1]. При этом особое внимание уделяется выбору метода прогнозирования показателей народонаселения в условиях возможного изменения внешних и внутренних факторов, влияющих на развитие региона.

Проанализируем лишь некоторые из методов исследований и прогнозирования. Все они обладают достоинствами и недостатками. Например, регрессионные методы прогнозирования не позволяют построить регрессионную модель на длительный период с необходимой точностью. В методе нечетких систем отсутствует стандартная методика конструирования и возможность математического анализа таких систем. Метод деревьев решений сталкивается с проблемой получения оптимального дерева решений. Методы на базе цепей Маркова не позволяют моделировать процессы с длинной памятью, имеют узкую область применимости. Нейросетевые методы предъявляют жесткие требования к обучающей выборке, достаточно сложны при выборе архитектуры и алгоритма обучения, обладают высокой ресурсоемкостью процесса обучения. Все эти подходы, в том числе и популяционно-генетические [2], опираются на статистические данные [3]. Перспективным считается создание комбинированных моделей с целью повышения точности прогноза, тем не менее, и они не дают ожидаемого результата [4].

На наш взгляд, создание модели состоит не в подгонке уравнений к тем или иным данным [5], а в поиске математических образов, которые выражают поведение системы и соответствуют поставленной задаче [6]. Этот процесс последовательного построения модели лучше всего развит в теоретической физике. Для построения демографической модели достаточно опираться на следующие два положения:

1. Народонаселение представляет собой совокупность переменного числа людей, рождающихся, умирающих, мигрирующих и проживающих в данном регионе, либо на Земле в целом.
2. Население региона представляет собой совокупность людей без каких-либо отличительных признаков, подчиняется статистике Бозе-Эйнштейна (в одном и том же состоянии, как и для Бозе-частиц, может находиться любое количество человек).

Теперь, опираясь на эти два положения, вместо слов «население» и «человек» можно употреблять слова «система» и «частица» соответственно. Вместо слов «регион, либо Земля в целом» будем употреблять слова «область определения». Математический метод описания таких систем, состоящих из большого, но переменного числа одинаковых частиц, известен как метод вторичного квантования. Согласно этому методу функцию, описывающую состояние произвольного числа  $N$  частиц системы, представим в виде:

$$\psi_{N_1 N_2 \dots} = \left( \frac{N_1! N_2! \dots}{N!} \right)^{1/2} \sum \psi_{p_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{p_2}(\mathbf{r}_2) \dots \psi_{p_N}(\mathbf{r}_N). \quad (1)$$

Здесь суммирование проводится по всем перестановкам различных состояний с номерами  $p_1, p_2, \dots, p_N$ , а числа  $N_1, N_2, \dots$  указывают на то, сколько из  $N$  состояний одинаковых, причем,  $N_1 + N_2 + \dots = N$ .  $\psi_1(\mathbf{r}_1), \psi_2(\mathbf{r}_2), \dots, \psi_N(\mathbf{r}_N)$  – ортонормированные функции различных состояний, в которых может находиться каждая частица си-

стемы в отдельности в точках с радиус-векторами  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$  соответственно. Заметим, что функции (1) являются также ортонормированными, поскольку при интегрировании квадрата модуля этой функции по всем переменным  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ , обращаются в нуль все слагаемые двойной суммы по перестановкам, за исключением только тех слагаемых, в которых обнаруживаются квадраты модулей функций различных состояний. Общее число таких слагаемых, отличных от нуля, равно числу перестановок с повторениями  $N_1, N_2, \dots$  раз из  $N$  частиц.

Определим далее оператор  $\hat{f}_\alpha^{(1)}$ , действующий только на одну функцию переменной  $\mathbf{r}_\alpha$ . Вычислим матричные элементы следующего оператора:

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_\alpha \hat{f}_\alpha^{(1)} \quad (2)$$

на функциях (1). В (2) суммирование проводится по всем частицам системы. Поскольку каждый из операторов  $\hat{f}_\alpha^{(1)}$ , входящий в (2), действует только на одну функцию в произведении, стоящем под знаком суммы (1), то должны быть отличны от нуля только диагональные матричные элементы и недиагональные матричные элементы для состояний с числом частиц, отличающихся на единицу:

$$\langle N_1, N_2, \dots, N_i, \dots, N_k - 1, \dots | \hat{F}^{(1)} | N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots, N_k, \dots \rangle = f_{ik}^{(1)} \sqrt{N_i N_k}. \quad (3)$$

Здесь матричные элементы

$$f_{ik}^{(1)} = \int \psi_i^*(\mathbf{r}_\alpha) \hat{f}_\alpha^{(1)} \psi_k(\mathbf{r}_\alpha) dS_\alpha \quad (4)$$

вычисляются по всей области определения и не зависят от частицы  $\alpha$  системы.

Определим теперь оператор уничтожения  $\hat{a}_i$ , действующий не на функцию координат (1), а на функцию чисел заполнения  $|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$ , уменьшая значение переменной  $N_i$  на единицу, при этом умножая функцию чисел заполнения на  $\sqrt{N_i}$ :

$$\hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = \sqrt{N_i} |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots\rangle. \quad (5)$$

Заметим, что единственный отличный от нуля матричный элемент оператора уничтожения  $\hat{a}_i$  имеет вид:

$$\langle N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots | \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = \sqrt{N_i}. \quad (6)$$

Оператор, сопряженный к оператору уничтожения  $\hat{a}_i$  называют оператором рождения  $\hat{a}_i^+$ , по определению равный

$$\begin{aligned} \langle N_1, N_2, \dots, N_i, \dots | \hat{a}_i^+ |N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots\rangle = \\ = \langle N_1, N_2, \dots, N_i - 1, \dots | \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle^* = \sqrt{N_i}. \end{aligned} \quad (7)$$

Действуя на функцию чисел заполнения  $|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$ , оператор рождения  $\hat{a}_i^+$  увеличивает значение переменной  $N_i$  на единицу, при этом умножая функцию чисел заполнения на  $\sqrt{N_i + 1}$ :

$$\hat{a}_i^+ |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = \sqrt{N_i + 1} |N_1, N_2, \dots, N_i + 1, \dots\rangle. \quad (8)$$

Поскольку оператор уничтожения  $\hat{a}_i$  уменьшает значение переменной  $N_i$  на единицу, а оператор рождения  $\hat{a}_i^+$  возвращает ее к исходному значению, то непосредственное перемножение матриц с элементами (6) и (7) показывает, что матрица оператора  $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$  будет иметь диагональный вид с элементами

$$\langle N_1, N_2, \dots, N_i, \dots | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | N_1, N_2, \dots, N_i, \dots \rangle = N_i \quad (9)$$

в базисе собственных функций чисел заполнения  $|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$ :

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = N_i |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle. \quad (10)$$

Равенство (10) часто записывают в виде:  $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i = N_i$ , опуская собственную функцию  $|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$ , стоящую справа в каждой части равенства. Аналогично получим, что матрица оператора  $\hat{a}_i \hat{a}_i^+$  будет иметь также диагональный вид с элементами

$$\langle N_1, N_2, \dots, N_i, \dots | \hat{a}_i \hat{a}_i^+ | N_1, N_2, \dots, N_i, \dots \rangle = N_i + 1 \quad (11)$$

в базисе собственных функций чисел заполнения  $|N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle$ :

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle = (N_i + 1) |N_1, N_2, \dots, N_i, \dots\rangle, \quad (12)$$

или в сокращенной форме записи:  $\hat{a}_i \hat{a}_i^+ = N_i + 1$ .

Разность двух выражений (10) и (12) дает правило коммутации между операторами  $\hat{a}_i$  и  $\hat{a}_i^+$ , представимое в следующем сокращенном виде:

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = 1. \quad (13)$$

Операторы рождения и уничтожения с различными индексами  $i$  и  $k$ , действующие соответственно на различные переменные  $N_i$  и  $N_k$ , коммутируют:

$$\hat{a}_i \hat{a}_k = \hat{a}_k \hat{a}_i, \quad \hat{a}_i \hat{a}_k^+ = \hat{a}_k^+ \hat{a}_i, \quad \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ = \hat{a}_k^+ \hat{a}_i^+, \quad i \neq k. \quad (14)$$

Уже этих свойств операторов рождения и уничтожения, описанных выше, вполне достаточно, чтобы утверждать, что оператор (2) можно представить в виде:

$$\hat{F}^{(1)} = \sum_{i,k} \hat{f}_{ik}^{(1)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k, \quad (15)$$

поскольку все матричные элементы (3) оператора  $\hat{F}^{(1)}$  совпадают с матричными элементами оператора в правой части равенства (15), вычисленными с использованием соотношений (6) и (7). Вычислим матричные элементы более сложного оператора:

$$\hat{F}^{(2)} = \sum_{\alpha > \beta} \hat{f}_{\alpha\beta}^{(2)} \quad (16)$$

на функциях (1). В правой части равенства (16)  $\hat{f}_{\alpha\beta}^{(2)}$  – оператор, действующий на функции переменных  $\mathbf{r}_\alpha$  и  $\mathbf{r}_\beta$ . Непосредственной проверкой с использованием соотношений (6) и (7) можно убедиться в том, что

$$\hat{F}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i,k,l,m} \hat{f}_{iklm}^{(2)} \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_l \hat{a}_m, \quad (17)$$

где матричные элементы

$$\hat{f}_{iklm}^{(2)} = \iint \psi_i^*(\mathbf{r}_\alpha) \psi_k^*(\mathbf{r}_\beta) \hat{f}_{\alpha\beta}^{(2)} \psi_l(\mathbf{r}_\alpha) \psi_m(\mathbf{r}_\beta) dS_\alpha dS_\beta \quad (18)$$

представляют собой двойной интеграл по области определения и не зависят ни от частицы  $\alpha$ , ни от частицы  $\beta$  системы.

Оказывается, что операторы (2), (16) и др. можно представить в более компактном виде, если ввести  $\psi$ -операторы в виде:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i(\mathbf{r}) \hat{a}_i, \quad \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i^*(\mathbf{r}) \hat{a}_i^+, \quad (19)$$

напоминающие разложение функции по полному набору базисных функций. В этом представлении оператор  $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ , также как и  $\hat{a}_i$ , уменьшает полное число частиц системы на единицу. Оператор  $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$ , также как и  $\hat{a}_i^+$ , увеличивает полное число частиц си-

стемы на единицу. Из правил коммутации (13), (14) операторов  $\hat{a}_i$  и  $\hat{a}_i^+$  следуют правила коммутации  $\psi$ -операторов:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}') - \hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}) = 0, \quad (20)$$

$$\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}^+(\mathbf{r}') - \hat{\psi}^+(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \psi_i(\mathbf{r})\psi_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (21)$$

Тогда оператор (2) можно представить с помощью  $\psi$ -операторов в виде:

$$\hat{F}^{(1)} = \int \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{f}^{(1)}\hat{\psi}(\mathbf{r})dS. \quad (22)$$

Здесь оператор  $\hat{f}^{(1)}$  действует в  $\hat{\psi}(\mathbf{r})$  на функции  $\psi_i(\mathbf{r})$  параметров  $\mathbf{r}$ . Аналогичным образом получаем оператор (16) с помощью  $\psi$ -операторов в виде:

$$\hat{F}^{(2)} = \frac{1}{2} \iint \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}^+(\mathbf{r}')\hat{f}^{(2)}\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})dSdS'. \quad (23)$$

Если переменную  $\mathbf{r}$  рассматривать как параметр, то оператор  $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$  создает еще одну частицу системы в точке  $\mathbf{r}$ , поскольку в результате действия оператора  $\hat{a}_i^+$  создается частица в состоянии с функцией  $\psi_i(\mathbf{r})$ . Подобно произведению  $\psi_i^*(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r})$ , определяющему плотность вероятности обнаружить частицу в  $i$ -ом состоянии, оператор  $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})$ , построенный из  $\psi$ -операторов, называют оператором плотности частиц. Тогда оператор полного числа частиц можно представить в виде:

$$\hat{N} = \int \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})dS. \quad (24)$$

Убедиться в этом не представляет труда, если воспользоваться соотношениями (19). Получим в сокращенной форме записи

$$\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \sum_i N_i = N. \quad (25)$$

Отметим, что если система состоит из различных частиц, подчиняющихся статистике Бозе-Эйнштейна, то в методе вторичного квантования необходимо рассматривать свои операторы рождения и уничтожения  $\hat{a}_i$ ,  $\hat{a}_i^+$  для каждого вида частиц. При этом операторы, относящиеся к различным видам частиц, коммутируют.

В квантовой механике важное значение имеет понятие канонического преобразования, сохраняющего коммутационные соотношения операторов и форму уравнений движения. Часто, подобрав каноническое преобразование, можно перейти от взаимодействующих частиц к не взаимодействующим квазичастицам. Например, гамильтониан  $\hat{H}$ , квадратичный по операторам рождения и уничтожения, с помощью преобразования Боголюбова

$$\tilde{a}_i = \sum_j (U_{ij}\hat{a}_j + V_{ij}\hat{a}_j^+), \quad \tilde{a}_i^+ = \sum_j (V_{ij}^*\hat{a}_j + U_{ij}^*\hat{a}_j^+) \quad (26)$$

может быть приведен к диагональной форме:

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i \tilde{a}_i^+ \tilde{a}_i. \quad (27)$$

Здесь  $\varepsilon_i$  – спектр квазичастиц. Преобразования (26) являются каноническими, т.е. сохраняющими коммутационные соотношения

$$\tilde{a}_i \tilde{a}_j - \tilde{a}_j \tilde{a}_i = 0, \quad \tilde{a}_i \tilde{a}_j^+ - \tilde{a}_j^+ \tilde{a}_i = \delta_{ij} \quad (28)$$

при условии

$$U_{ki}V_{kj} - V_{ki}U_{kj} = 0, \quad U_{ki}^*V_{kj} - V_{ki}^*U_{kj} = \delta_{ij}. \quad (29)$$

Заменяя  $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$  собственными значениями  $N_i$ , получим для энергии системы выражение:

$$E = \sum_i \varepsilon_i N_i. \quad (30)$$

Последующее вычисление изменений, происходящих в системе с течением времени под действием возмущений, можно выполнить следуя работе [7]. Приведем результаты таких вычислений в качестве примера. Рассмотрим начнем с описания простейшего хорошо известного стационарного движения свободной частицы. Спектр такой частицы является непрерывным, а собственные функции оператора (27), описывающие ее поведение, пропорциональны экспоненте мнимого аргумента  $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$  с волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Нас же интересует движение частиц по сферической поверхности (Земли) постоянного радиуса  $r$ . В этом случае от оператора (27) останется только сферическая часть:

$$-\Delta_{\theta,\phi} = -\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) - \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}, \quad (31)$$

для которой собственные значения, равные  $l(l+1)$ , и собственные функции  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  известны:

$$-\Delta_{\theta,\phi} Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (32)$$

Здесь функции  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ , называемые сферическими гармониками, регулярны при  $0 \leq \theta \leq \pi$ ,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$  и  $Y_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\theta, \phi + 2\pi)$ . Зная решение задачи (32), построим функцию Грина

$$G_0(\theta, \phi; \theta', \phi'; \omega) = \sum_{lm} \frac{Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi')}{\omega - l(l+1) + i\delta}, \quad (33)$$

с помощью которой можно описать эволюцию свободной частицы начиная с момента времени  $t = 0$ :

$$G_t(\theta, \phi; \theta', \phi'; t) = \frac{1}{2\pi} \int G_0(\theta, \phi; \theta', \phi'; \omega) e^{-i\omega t} d\omega. \quad (34)$$

Здесь знак (+) при  $i\delta \rightarrow 0$  выбран так, чтобы функция Грина  $G_0(\theta, \phi; \theta', \phi'; \omega)$  была регулярной в верхней полуплоскости комплексной переменной  $\omega$  для обеспечения причинно-следственной связи при  $t > 0$ . Зная функцию Грина (34) можно описать эволюцию взаимодействующей частицы в поле, характеризуемым потенциальной функцией  $V(\theta, \phi; t)$ :

$$\psi(\theta, \phi; t) = \int G_t(\theta, \phi; \theta', \phi'; t - t') V(\theta', \phi'; t') \psi(\theta', \phi'; t') dt' \sin\theta' d\theta' d\phi'. \quad (35)$$

Наблюдения в вечернее (ночное) время за поверхностью Земли с помощью аппаратуры инфракрасного и оптического диапазона частот, находящейся на спутниках Земли, демонстрируют наличие на поверхности Земли точечных источников разной светимости. Будем считать, что социальная, экономическая, культурная, политическая и др. активность населения пропорциональна этой светимости. Выберем в качестве примера один такой точечный источник с энергетической светимостью, равной  $a$ . Тогда получим для  $\delta$ -образного потенциала  $V(\theta, \phi) = -a\delta(\theta)\delta(\phi)$  глубиной  $a$  на сферической поверхности

$$\psi(\theta, \phi) = -a\psi(0, 0) \sum_{lm} \frac{Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(0, 0)}{\omega - l(l+1)}. \quad (36)$$

Выражение (36) показывает, что решение задачи (35) о движении частиц по сферической поверхности можно искать в виде разложения по полному набору сферических

гармоник. Численные расчеты показывают, что лишь одно из собственных значений  $\omega$  является отрицательным. Полученный результат в приложении к миграции позволяет утверждать, что любой, даже сколь угодно малый ( $a$  - мало) населенный пункт привлекателен для мигранта, то есть способен захватить его (отрицательное значение  $\omega$  указывает на существование локализованного состояния).

Построить зависимость  $V(\theta, \phi; t)$  можно по многолетним данным переписи населения. Поскольку результаты переписи населения в разных странах проводятся в разное время и не всегда доступны [8], эти результаты могут быть унифицированы, опираясь на спутниковые данные ночных (вечерних) наблюдений поверхности Земли, считая, что потенциальная функция  $V(\theta, \phi; t)$  пропорциональна светимости поверхности Земли в ночное (вечернее) время суток. В этом случае  $V(\theta, \phi; t)$  представима в виде суперпозиции  $\delta$ -образных потенциалов, отличающихся глубиной  $a$ . Далее уравнение (35) нужно решать численно, используя, например, разложение по полному набору сферических гармоник. Либо можно использовать неравномерную сетку [9], выбирая большой шаг в областях с малой плотностью населения (в акваториях морей и океанов, на полюсах Земли) и мелкий шаг в густонаселенных районах.

Таким образом, предложенная квантовая модель народонаселения позволяет количественно описывать демографические процессы, происходящие в каком-либо регионе, или на Земле в целом. Аналогично тому, как это делается в квантовой физике, можно вычислять такие важные характеристики как плотность населения, скорость миграции и другие, корректировать результаты вычислений на основе мониторинга.

#### Список литературы

1. Акаев А.А., Соколов В.Н., Акаева Б.А., Сарыгулов А.И. Асимптотические модели для прогнозирования долгосрочной демографической и экономической динамики / Экономика и математические методы. – 2011. – Т. 47. – № 3. С. 56-67.
2. Quinzin M.C., Mayer F., Elvinger N., Mardulyn P. Theoretical expectations of the Isolation-Migration model of population evolution for inferring demographic parameters // Methods in Ecology and Evolution. – 2015. – V. 6. – N 5. – P. 610 – 620.
3. Heinz S. Uncertainty quantification of world population growth: A self-similar PDF model / Monte Carlo Methods and Applications. – 2014. – V. 20. – N 4. – P. 261 – 277.
4. Малаховская О.А. Использование моделей DSGE для прогнозирования: есть ли перспектива? / Вопросы экономики. – 2016. – № 12. – С. 129-146.
5. Kerckhove M. From Population Dynamics to Partial Differential Equations / The Mathematica Journal. – 2012. – V. 14. – P. 1-18.
6. Чернавский Д.С., Старков Н.И., Малков С.Ю., Косе Ю.В., Щербаков А.В. Об экономике и ее месте в современной теоретической экономике / Успехи физических наук. – 2011. – Т. 181. – № 7. – С. 767-773.
7. Арсеев П.И. О диаграммной технике для неравновесных систем: вывод, некоторые особенности и некоторые применения / Успехи физических наук. – 2015. – Т. 185. – № 12. – С. 1271-1321.
8. Андреев Е.М., Гамбурцев А.Г. Динамика демографических показателей в России, Франции, Германии и Финляндии во второй половине XX века / В кн.: Атлас временных вариаций природных, антропогенных и социальных процессов. – М.: "Янус-К". – 2013. – Т. 5. – С. 553-577.
9. Верходанов О.В., Дорошкевич А.Г. Системы пикселизации неба для анализа протяженного излучения / Успехи физических наук. – 2013. – Т. 183. – № 8. – С. 849-862.

# **ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ НОВЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ НА ОСНОВЕ АЛГОРИТМОВ РОЕВОГО ИНТЕЛЛЕКТА И ИММУННОСЕТЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ<sup>5</sup>**

Г.А. Самигулина, Ж.А. Масимканова

Институт информационных и вычислительных технологий КН МОН РК,  
***galinasamigulina@mail.ru***

Методы биоинформатики и искусственного интеллекта широко применяются в областях современной фармакологии и компьютерного моделирования лекарств для сбора и анализа данных о химических соединениях, классификации и построения новых лекарственных соединений с заданными свойствами. Исследование химических соединений связано с обработкой многомерных массивов данных. Прогнозирование зависимости структура-свойство/активность лекарственных веществ и выявление связей между структурой соединений и их активностью является актуальной проблемой фармакологии.

В настоящее время методы искусственного интеллекта успешно применяются для решения задачи прогнозирования зависимости структура-свойство/активность новых соединений [1]. Перспективным является применение интеллектуальных методов для обнаружения новых закономерностей в химических данных [2]. Под интеллектуальным анализом данных понимается систематизация данных, выявление закономерностей и прогнозирование свойств химических соединений. Интеллектуальные методы обеспечивают высокую точность прогнозирования химических соединений с заданными структурами. К ним относятся нейронные сети [3], эволюционные алгоритмы [4], искусственные иммунные системы [5], алгоритмы роевого интеллекта [6] и др. Актуальна разработка современных нетрадиционных информационных технологий для обработки больших объемов данных с целью повышения эффективности процесса построения лекарств.

Постановка задачи формулируется следующим образом: необходимо разработать интеллектуальную информационную систему ведения научных исследований для прогнозирования зависимости структура-свойство/активность на основе алгоритмов роевого интеллекта для дальнейшего иммунносетевого моделирования новых лекарственных препаратов. Применение интеллектуальных методов позволяет существенно упростить процесс отбора в кандидаты лекарственных препаратов новых химических соединений с заданными свойствами.

В работе [7] предложена интеллектуальная иммунносетевая технология, которая состоит из модулей предварительной обработки, распознавания образов, оценки энергетической погрешности и прогноза фармакологической активности химических веществ. Интеллектуальная иммунносетевая технология прогнозирования зависимости структура-свойство/активность позволяет анализировать скрытые взаимодействия между дескрипторами, сокращает время обучения иммунной сети и исключает малоинформативные дескрипторы. Выделение информативных дескрипторов выполняется на основе алгоритмов роевого интеллекта в соответствии с концепцией мультиалгоритмического подхода [8], при котором после иммунносетевого моделирования выбирается

---

<sup>5</sup> Работа выполнена по гранту КН МОН РК № ГР 0115РК00549 (2015-2017 гг.) по теме проекта: "Компьютерный молекулярный дизайн лекарственных препаратов на основе иммунносетевого моделирования".

алгоритм с наименьшей ошибкой обобщения. Целью построения оптимального набора дескрипторов является уменьшение размерности пространства поиска.

Разработан модуль предварительной обработки данных, который включает в себя отбор информативных дескрипторов на основе алгоритма муравьиной колонии и метода роя частиц [9].

Модуль предварительной обработки данных «SIIM (Swarm Intelligence for Immune network modeling)» реализован на языке программирования Python 3.6 с использованием PyQt. Представлен следующий алгоритм функционирования системы «SIIM».

Алгоритм:

Шаг 1. Подключение базы данных дескрипторов, описывающих химическое соединение.

Шаг 2. Выбор метода роевого интеллекта [10] (муравьиного алгоритма, метода роя частиц).

Шаг 3. Ввод коэффициентов (количество популяций, количество итераций, вес, скорость)

Шаг 4. Обработка данных и выделение информативных дескрипторов.

Шаг 5. Построение оптимального набора дескрипторов. Критерием оптимальности является сохранение максимальной информативности дескрипторов при минимальном их количестве. Избыточность и малоинформативность дескрипторов снижает качество прогноза, поэтому при отборе новых химических соединений в кандидаты лекарственных препаратов важно учитывать информативность дескриптора [11].

Шаг 6. Вывод результата работы алгоритма.

Интеллектуальная технология иммунносетевого моделирования включает в себя работу с базами данных дескрипторов химических соединений. В качестве примера базы данных для поиска новых лекарственных соединений используется база данных дескрипторов сульфаниламидов. Сульфаниламиды относятся к лекарственным средствам широкого антибактериального действия. Благодаря этим препаратам удалось значительно снизить смертность от воспаления легких, заражения крови и многих других бактериальных инфекций [12].

Так как при частном применении антибиотиков вызывают привыкание и аллергические реакции, то проведение научных исследований по созданию новых лекарственных препаратов сульфаниламидной группы с заданными свойствами является актуальной задачей.

В качестве примера были использованы 15 химических соединений сульфаниламидов и дескрипторы разных уровней. Химические соединения классифицированы на сульфаниламиды короткого действия, средней длительности действия и длительного действия. Рассмотрены такие дескрипторы, как: количество атомов, относительное количество атомов карбона, относительное количество атомов водорода, молекулярный вес, количество связей, индекс гравитации и т.д.

На рисунке 1 показаны результаты моделирования сульфаниламидов на основе муравьиного алгоритма. При моделировании размер популяции равен 100, количество итераций равно 50,  $c_1$  (количество феромона) = 1,  $c_2$  (испарение феромона) = 2, частота отчета равна 50. В результате из 1500 дескрипторов были выбраны 25 информативных дескрипторов.

Intellectual information system "SIIM"

Ant Colony Optimization

Population size: 100    Number of generations: 50    C1: 1

Database connection

|    | Class         | Number of atoms | ve number of C a | ve number of H a | ve number of O a | ve number of N a | ve num |
|----|---------------|-----------------|------------------|------------------|------------------|------------------|--------|
| 1  | short_acting  | 27.00           | 0.37             | 0.37             | 0.07             | 0.15             | 0.04   |
| 2  | short_acting  | 33.00           | 0.36             | 0.42             | 0.06             | 0.12             | 0.03   |
| 3  | short_acting  | 31.00           | 0.35             | 0.42             | 0.10             | 0.10             | 0.03   |
| 4  | short_acting  | 27.00           | 0.33             | 0.37             | 0.07             | 0.15             | 0.07   |
| 5  | short_acting  | 46.00           | 0.33             | 0.54             | 0.04             | 0.07             | 0.02   |
| 6  | short_acting  | 33.00           | 0.36             | 0.42             | 0.06             | 0.12             | 0.03   |
| 7  | short_acting  | 46.00           | 0.33             | 0.54             | 0.04             | 0.07             | 0.02   |
| 8  | medium_acting | 24.00           | 0.33             | 0.42             | 0.13             | 0.08             | 0.04   |
| 9  | medium_acting | 35.00           | 0.34             | 0.40             | 0.11             | 0.11             | 0.03   |
| 10 | medium_acting | 28.00           | 0.36             | 0.39             | 0.11             | 0.11             | 0.04   |
| 11 | medium_acting | 31.00           | 0.35             | 0.42             | 0.10             | 0.10             | 0.03   |
| 12 | Long_acting   | 35.00           | 0.34             | 0.40             | 0.11             | 0.11             | 0.03   |
| 13 | Long_acting   | 36.00           | 0.42             | 0.39             | 0.06             | 0.11             | 0.03   |
| 14 | Long_acting   | 31.00           | 0.35             | 0.39             | 0.10             | 0.13             | 0.03   |
| 15 | Long_acting   | 30.00           | 0.37             | 0.40             | 0.07             | 0.13             | 0.03   |

Visualization    Clear Screen

Particle Swarm Optimization

C2: 2    Report frequency: 50

Run

|    | d3 (atomic Sande | correlation d3 (ato | logical distances t | multiple path co | ilation d8 (atomic | d7 (atomic Sande | ilation c |
|----|------------------|---------------------|---------------------|------------------|--------------------|------------------|-----------|
| 1  | -0.30            | 0.93                | 0.00                | 22.09            | 1.02               | -0.53            | 0.49      |
| 2  | 0.09             | 1.48                | 8.00                | 31.46            | 0.93               | -0.33            | -0.03     |
| 3  | -0.19            | 1.35                | 14.00               | 24.93            | 1.14               | 0.55             | -0.26     |
| 4  | -0.05            | 0.82                | 9.00                | 29.16            | 1.09               | 0.00             | -0.03     |
| 5  | -0.34            | 1.14                | 0.00                | 15.36            | 0.45               | -0.08            | -0.06     |
| 6  | 0.09             | 1.48                | 8.00                | 31.46            | 0.93               | -0.33            | -0.03     |
| 7  | -0.34            | 1.14                | 0.00                | 15.36            | 0.45               | -0.08            | -0.06     |
| 8  | -0.40            | 1.41                | 14.00               | 8.69             | 1.40               | 0.76             | -0.26     |
| 9  | -0.02            | 0.47                | 39.00               | 28.95            | 0.64               | 0.08             | -0.33     |
| 10 | -0.42            | 0.88                | 16.00               | 16.81            | 0.80               | -0.44            | -0.02     |
| 11 | -0.37            | 1.36                | 8.00                | 21.05            | 0.02               | 0.15             | 0.27      |
| 12 | -0.02            | 0.47                | 39.00               | 28.95            | 0.64               | 0.08             | -0.33     |
| 13 | -0.09            | 0.82                | 7.00                | 33.34            | 1.07               | 0.19             | -0.10     |
| 14 | -0.12            | 1.57                | 22.00               | 19.73            | 0.45               | 0.09             | -0.10     |
| 15 | 0.16             | 1.06                | 3.00                | 27.27            | 1.65               | -0.28            | -0.17     |

HELP    Exit

Рис. 1. Результаты моделирования дескрипторов на основе муравьиного алгоритма при размере популяции 100

На рисунке 2 представлена визуализация выбранных информативных дескрипторов сульфаниламидной группы.

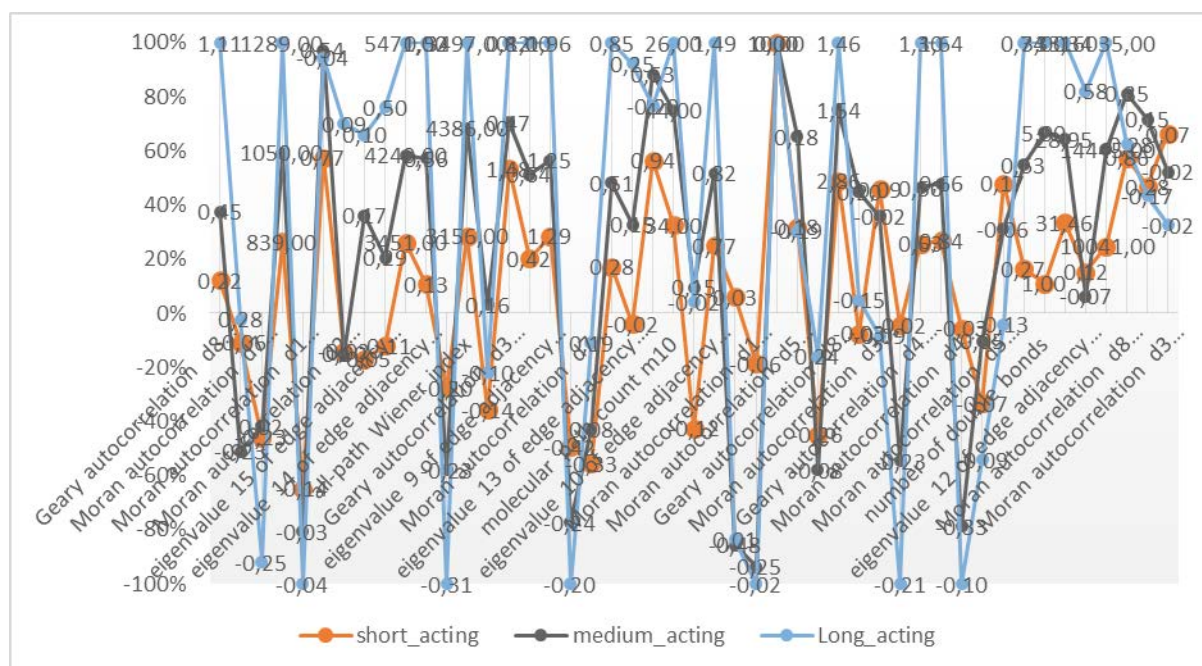


Рис. 2. Визуализация выбранных информативных дескрипторов на основе муравьиного алгоритма при размере популяции 100

Если при моделировании размер популяции равен 200, количество итераций равно 100, c1 (количество феромона) = 1, c2 (испарение феромона) = 2, частота отчета = 50, то в результате из 1500 дескрипторов выделено 17 информативных дескрипторов.

На рисунке 3 представлена визуализация выбранных информативных дескрипторов сульфаниламидов.

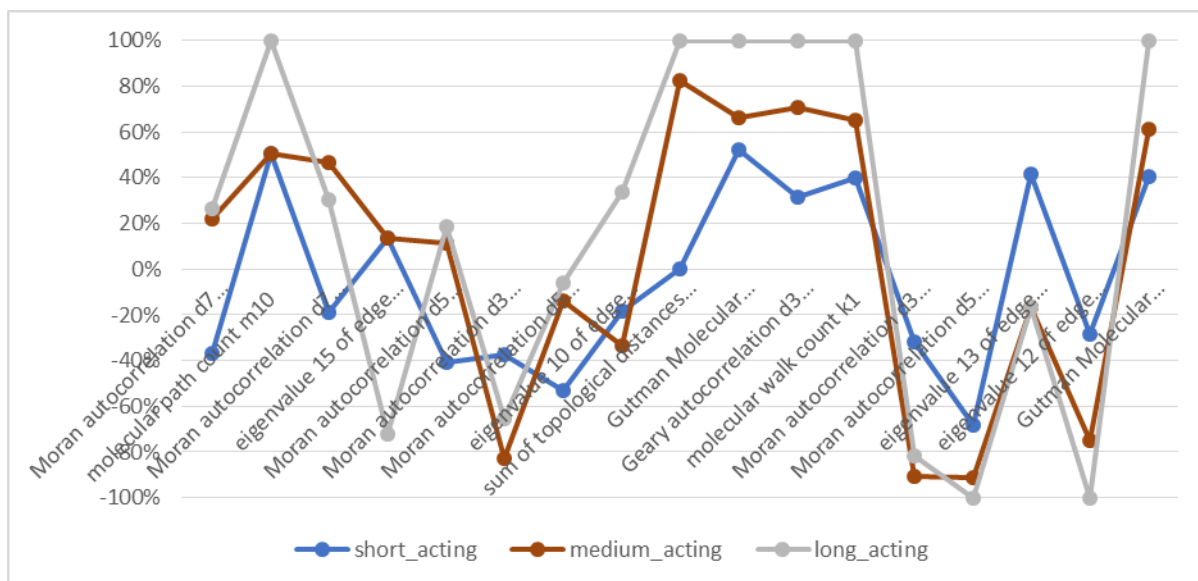


Рис. 3. Визуализация выбранных информативных дескрипторов на основе муравьиного алгоритма при размере популяции 200

Аналогично интеллектуальная система работает с методом роя частиц. Выбирается тот алгоритм, который после иммунносетевого моделирования показывает наилучшие прогностические результаты.

На рисунке 4 показаны результаты моделирования сульфаниламидов на основе алгоритма роя частиц. При моделировании размер популяции равен 100, количество итераций равно 50,  $c_1$  (вес) = 1,  $c_2$  (скорость) = 2, частота отчета = 50. В результате из 1500 дескрипторов были выбраны 49 информативных дескрипторов.

| Ant Colony Optimization |                 |                  |                  |                  |                  |                  |                  |                  |                   | Particle Swarm Optimization |                   |                    |                  |                  |                   |         |  |
|-------------------------|-----------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|-------------------|-----------------------------|-------------------|--------------------|------------------|------------------|-------------------|---------|--|
| Population size: 100    |                 |                  |                  |                  |                  |                  |                  |                  |                   | Report frequency: 50        |                   |                    |                  |                  |                   |         |  |
| Database connection     |                 |                  |                  |                  |                  |                  |                  |                  |                   | Run                         |                   |                    |                  |                  |                   |         |  |
| Class                   | Number of atoms | ve number of C a | ve number of H a | ve number of O a | ve number of N a | ve number of S a | ve number of P a | ve number of I a | ve number of Br a | ve number of Na             | ber of aromatic b | f Gravitation inde | index by valence | index by valence | index (Barysz dis | i-modif |  |
| 1 short_acting          | 27,00           | 0,37             | 0,37             | 0,07             | 0,15             | 0,04             |                  |                  |                   | 1 0,15                      | 12,00             | 12,56              | 214,33           | 214,33           | 3,07              | 11,65   |  |
| 2 short_acting          | 33,00           | 0,36             | 0,42             | 0,06             | 0,12             | 0,03             |                  |                  |                   | 2 0,12                      | 10,00             | 12,42              | 259,00           | 259,00           | 2,39              | 13,90   |  |
| 3 short_acting          | 31,00           | 0,35             | 0,42             | 0,10             | 0,10             | 0,03             |                  |                  |                   | 3 0,10                      | 6,00              | 12,33              | 259,33           | 259,33           | 2,43              | 13,18   |  |
| 4 short_acting          | 27,00           | 0,33             | 0,37             | 0,07             | 0,15             | 0,07             |                  |                  |                   | 4 0,15                      | 6,00              | 12,29              | 236,33           | 236,33           | 2,59              | 11,44   |  |
| 5 short_acting          | 46,00           | 0,33             | 0,54             | 0,04             | 0,07             | 0,02             |                  |                  |                   | 5 0,07                      | 8,00              | 13,27              | 169,00           | 169,00           | 2,50              | 16,44   |  |
| 6 short_acting          | 33,00           | 0,36             | 0,42             | 0,06             | 0,12             | 0,03             |                  |                  |                   | 6 0,12                      | 10,00             | 12,42              | 259,00           | 259,00           | 2,39              | 13,90   |  |
| 7 short_acting          | 46,00           | 0,33             | 0,54             | 0,04             | 0,07             | 0,02             |                  |                  |                   | 7 0,07                      | 8,00              | 13,27              | 169,00           | 169,00           | 2,50              | 16,44   |  |
| 8 medium_acting         | 24,00           | 0,33             | 0,42             | 0,13             | 0,08             | 0,04             |                  |                  |                   | 8 0,08                      | 3,00              | 11,21              | 186,67           | 186,67           | 3,70              | 11,12   |  |
| 9 medium_acting         | 35,00           | 0,34             | 0,40             | 0,11             | 0,11             | 0,03             |                  |                  |                   | 9 0,11                      | 11,00             | 13,39              | 266,33           | 266,33           | 2,32              | 15,48   |  |
| 10 medium_acting        | 28,00           | 0,36             | 0,39             | 0,11             | 0,11             | 0,04             |                  |                  |                   | 10 0,11                     | 9,00              | 12,49              | 175,33           | 175,33           | 3,49              | 13,34   |  |
| 11 medium_acting        | 31,00           | 0,35             | 0,42             | 0,10             | 0,10             | 0,03             |                  |                  |                   | 11 0,10                     | 10,00             | 12,83              | 219,33           | 219,33           | 3,30              | 12,93   |  |
| 12 Long_acting          | 35,00           | 0,34             | 0,40             | 0,11             | 0,11             | 0,03             |                  |                  |                   | 12 0,11                     | 11,00             | 13,39              | 266,33           | 266,33           | 2,32              | 15,48   |  |
| 13 Long_acting          | 36,00           | 0,42             | 0,39             | 0,06             | 0,11             | 0,03             |                  |                  |                   | 13 0,11                     | 15,00             | 12,84              | 294,67           | 294,67           | 1,96              | 16,08   |  |
| 14 Long_acting          | 31,00           | 0,35             | 0,39             | 0,10             | 0,13             | 0,03             |                  |                  |                   | 14 0,13                     | 6,00              | 12,52              | 294,00           | 294,00           | 2,42              | 13,84   |  |
| 15 Long_acting          | 30,00           | 0,37             | 0,40             | 0,07             | 0,13             | 0,03             |                  |                  |                   | 15 0,13                     | 9,00              | 12,26              | 273,67           | 273,67           | 2,45              | 12,95   |  |

Рис. 4. Результаты моделирования на основе метода роя частиц при размере популяции 100

На рисунке 5 представлена визуализация выбранных информативных дескрипторов.

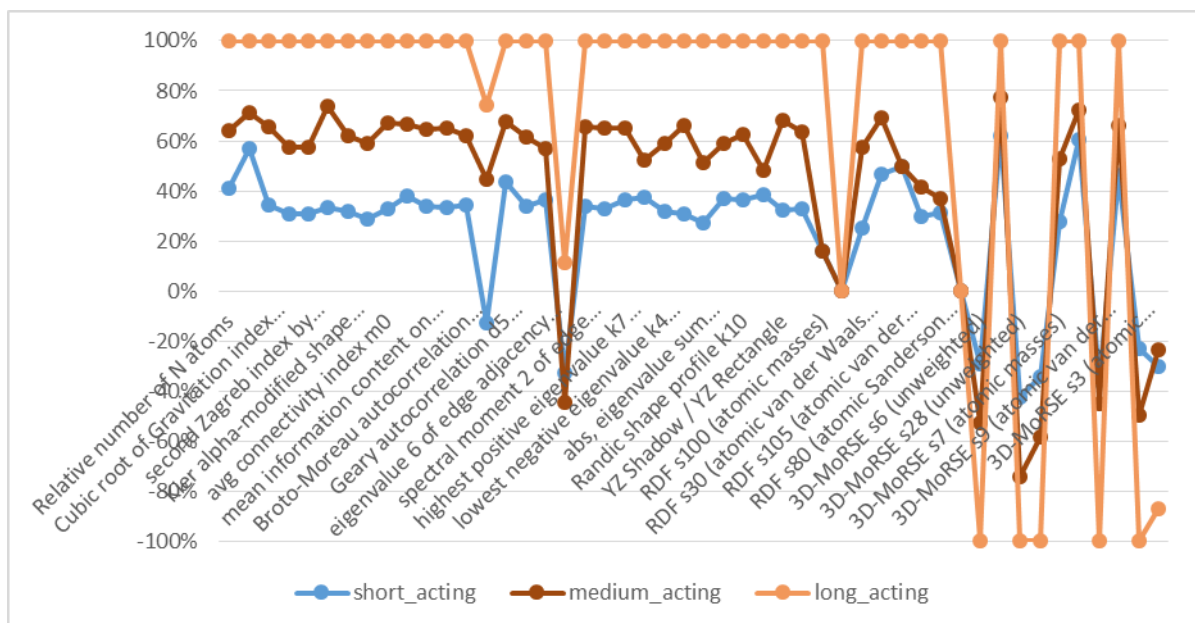


Рис. 5. Визуализация информативных дескрипторов выбранных на основе метода роя частиц при размере популяции 100

Если при моделировании размер популяции равен 200, количество итераций равно 100,  $c_1$  (вес) = 1,  $c_2$  (скорость) = 2, частота отчета = 50, то в результате из 1500 дескрипторов отобрано 11 информативных дескрипторов. На рисунке 6 приведена визуализация результата моделирования.

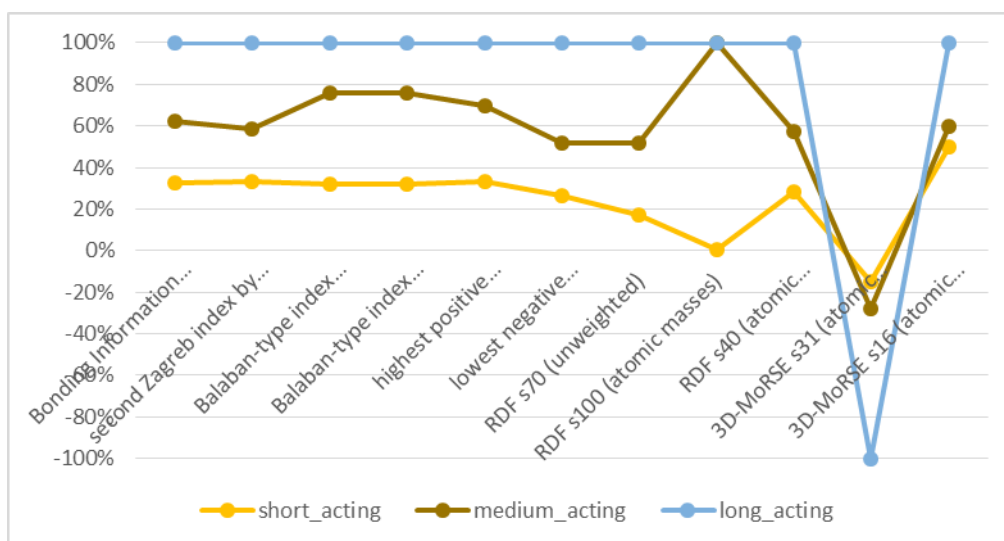


Рис. 6. Визуализация выбранных дескрипторов на основе метода роя частиц при размере популяции 200

Размер популяций и итераций влияют на производительность работы системы и на результаты моделирования. При большом количестве популяций и итераций уменьшается количество выбранных информативных дескрипторов. Агенты более детально исследуют пространство поиска, поэтому алгоритмы показывают наилучшие результаты.

Таким образом, разработанная интеллектуальная информационная система ведения научных исследований и прогнозирования зависимости структура-

свойства/активность новых лекарственных препаратов позволяет исключить малоинформативные дескрипторы и построить оптимальный набор дескрипторов для дальнейшего иммуносетевого моделирования. В настоящее время не существует универсальных методов для построения оптимального набора дескрипторов. Мультиалгоритмический подход позволяет выбрать алгоритм с наилучшими прогностическими свойствами после иммуносетевого моделирования. Результаты моделирования отличаются в зависимости от размера и типа данных, наличия независимых дескрипторов, критериев оптимальности и останова.

#### Список литературы

- 1 J.Gertrudes, V. Maltarollob, R. Silva, P. Oliveiraa, K. Honórioa, A. da Silva. Machine Learning Techniques and Drug Design // Current Medicinal Chemistry. – 2012. – №19. – P. 4289-4297.
- 2 Sliwoski, G., Kothiwale, S., Meiler, J., Lowe, E.W. Computational Methods in Drug Discovery // Pharmacological reviews. – 2014. – 386 p.
- 3 Гальберштам Н.М., Баскин ИМ., Палюлин В.А., Зефирова П.С. Нейронные сети как метод поиска зависимостей структура-свойство органических соединений // Успехи химии. – 2003. – №7. – С. 86-96.
- 4 Sliwoski, G., Kothiwale, S., Meiler, J., Lowe, E.W. Computational Methods in Drug Discovery // Pharmacological reviews. – 2014. – 386 p.
- 5 Samigulina G.A. Immune network modeling technology for complex objects intellectual control and forecasting systems. – Monograph, USA: Science and Publishing House, 2015. – 172 p.
- 6 Самигулина Г.А., Масимканова Ж.А. Онтологические модели алгоритмов роевого интеллекта для иммуносетевого моделирования лекарственных препаратов // Вестник КазНУ им. аль-Фараби. – Алматы, 2017. – № 1 (93). – ISSN 1563-0285. – С. 92-104.
- 7 Samigulina G.A., Samigulina Z.I. Immune Network Technology on the basis of random forest algorithm for computer-aided drug design. – Bionformatics and biomedical engineering. – 2017. – P. 50-61.
- 8 Самигулина Г.А., Самигулина З.И. Построение оптимальной иммуносетевой модели для прогнозирования свойств неизвестных лекарственных соединений на основе мультиалгоритмического подхода // Проблемы информатики. - Новосибирск, 2013. - №2. - С.21-29.
- 9 Самигулина, Г.А., Масимканова Ж.А. Выделение информативных признаков на основе муравьиных алгоритмов для иммуносетевого моделирования новых лекарственных препаратов, // Труды XVIII Всесибирского семинара «Моделирование неравновесных систем (MNS-15)». – Красноярск, 2015. – С. 89-93.
- 10 Самигулина Г.А., Масимканова Ж.А. Обзор современных методов роевого интеллекта для решения задачи выделения информативных признаков при создании новых лекарственных препаратов // Проблемы информатики. – Новосибирск, 2016. – № 2.– С.50-61.
- 11 Самигулина Г.А., Масимканова Ж.А. Построение онтологических моделей алгоритмов роевого интеллекта для иммуносетевого моделирования лекарств // Труді XVII Міжнародна наукова конференція імені Т. А. Таран (IAI-2017). – Киев, 2017.
- 12 Surhone L., Timpledon M., Marseken S. Sulfanilamide (Medicine). – New York: Betascript publishing, 2012. – 64 p.

## КАКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ АКТУАЛИЗИРУЮТ РАЗВИТИЕ?

В.П.Сизиков<sup>1</sup>, В.И. Разумов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Омский государственный университет путей сообщения, [v\\_p\\_sizikov@mail.ru](mailto:v_p_sizikov@mail.ru)

<sup>2</sup>Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского,  
[razumov@omsu.ru](mailto:razumov@omsu.ru)

**1. Введение.** В работе [1] актуализировалось понятие теории всего ( $\wedge$ ТВ). И на данный момент сформированы качественные модели уже четырёх  $\wedge$ ТВ: рода базовых дисциплин, модернизации как стратегии развития, рода измерительной процедуры [1], рода знания как стратегии познания. А в работе [2] осуществлён системный анализ на уровне процесса информационного функционирования (ПИФ) динамической информационной системы (ДИС) на примере  $\wedge$ ТВ, описывающей модернизации, с серией выводов на тему развития общества.

Накопленный материал позволяет признать  $\wedge$ ТВ фундаментальным понятием, тесно увязать его с понятием развития и позаботиться о формировании соответствующей математической базы. Здесь сосредоточим внимание на уровне ПИФ  $\wedge$ ТВ.

В отличие от развития на уровне смыслов, прорабатываемого через качественные модели  $\wedge$ ТВ, развитие на уровне ПИФ инвариантно относительно содержания моделей  $\wedge$ ТВ. Это даёт возможность проводить интерпретацию результатов по развитию на уровне ПИФ на весьма широком многообразии прикладных ситуаций, статус которых ассоциирует с  $\wedge$ ТВ, и делать соответствующие выводы по адекватности и актуальности проводимых исследований.

**2. Простейшая задача по функционированию в теории всего.** Исходим из того, что каждая  $\wedge$ ТВ включает четыре рода – *аспектный, инструментальный, экспериментальный и элементный* род (Ас-, ИН-, Эк- и Эл-Род). Причём на смысловом уровне эти рода увязаны схемой когнитивной ячейки (рис. 1).

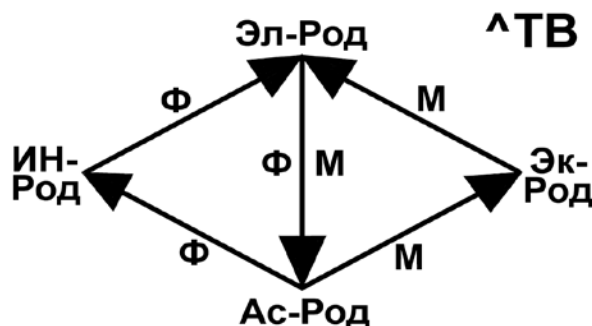


Рис. 1. Рода теории всего ( $\wedge$ ТВ): Ас- – аспектный, ИН- – инструментальный, М – математика, Ф – физика, Эк- – экспериментальный, Эл- – элементный.

В целом восприятие  $\wedge$ ТВ предполагает её обозрение на всех четырёх родах, а внимание к этим родам выражается распределением смыслового ресурса в согласии с ПИФ ДИС как когнитивной ячейки. Здесь вполне уместно говорить о функциональных параметрах, каковыми являются значения постоянных мотиваций взаимодействия и уровней трансформации пассива в актив [3] при каждом роде как вершине ДИС. Далеко не редко бывает, что исследователь ограничивается вниманием лишь к одному из родов  $\wedge$ ТВ, практически полностью игнорируя осмысления в рамках остальных родов. Однако при таком подходе все разговоры о развитии  $\wedge$ ТВ и её адекватном использовании в жизни рискуют оказаться иллюзией.

Итак, важно осуществить системный анализ на уровне ПИФ у когнитивной ячейки с рис. 1. Пример такого анализа был уже в работе [3], а в работе [2] осуществлён

полный аналог требуемого исследования, но на конкретной  $\wedge$ ТВ, представляющей модернизации как стратегии развития. Поэтому ограничимся просто переводом полученных в [2] результатов на случай произвольной  $\wedge$ ТВ, объединив их в теорему.

**Теорема.** *В русле функционального развития любой  $\wedge$ ТВ имеют место следующие закономерности.*

1. Факт серьёзной властности Ас- и Эл-Родов является губительным для развития  $\wedge$ ТВ, чего не скажешь относительно властности ИН- и Эк-Родов.

2. Даже при умеренной властности Ас- и Эл-Родов их превосходство в этом над ИН- и Эк-Родами неблагоприятно для развития  $\wedge$ ТВ.

3. Властность Ас-Рода резко сказывается на падении эффективности развития  $\wedge$ ТВ, чем властность Эл-Рода.

4. У Ас-Рода нет оснований остаться без работы и добиваться в своё благо роста властности Эл-Рода, если Ас-Род не желает стать «лодырем».

5. Наивысших показателей развития  $\wedge$ ТВ следует ожидать при относительно малых, но всё-таки отличных от 0, значениях уровней трансформации у всех родов, когда принятия решений ими оказываются актуальными и протекают без продолжительных задержек.

6. Как правило, эффективность развития  $\wedge$ ТВ оказывается выше в тех случаях, в которых степени властности у Ас- и Эл-Рода одинаковы. Это же касается ИН- и Эк-Рода, если только после выравнивания у них властности не явится превосходство над ними властности у Ас-Рода.

7. При отсутствии пренебрежения к родам  $\wedge$ ТВ, отличным от её Ас-Рода, актуализируется и набирает обороты факт функционального развития этой  $\wedge$ ТВ. Причём показатели развития в таких условиях находятся в обратной зависимости от властности Ас-Рода.

8. На среднестатистическом уровне первенство по актуальному принятию решений при развитии  $\wedge$ ТВ принадлежит её Ас-Роду. Однако при отсутствии пренебрежения к родам  $\wedge$ ТВ, отличным от её Ас-Рода, первенство по актуальному принятию решений переходит к Эл-Роду.

9. На среднестатистическом уровне первенство по теплу при развитии  $\wedge$ ТВ тоже принадлежит её Ас-Роду, хотя в этом не очень отстаёт и Эл-Род. А при отсутствии пренебрежения к родам  $\wedge$ ТВ, отличным от её Ас-Рода, первенство по теплу переходит к Эл-Роду, однако контраст тепла при этом с остальными родами оказывается на порядок меньше среднестатистического.

10. Эффективность функционального развития  $\wedge$ ТВ зависит, прежде всего, от проявления актуального принятия решений в ИН- и Эк-Родах и надёжности осмысления Эл-Рода у этой  $\wedge$ ТВ.

Таким образом, всем, кто заинтересован в стабильности развития  $\wedge$ ТВ, следует заботиться о наличии властности у её Эл-Рода (и/или у ИН-Рода). Иное дело, что эта властность не должна быть чрезмерной. Учёт этих моментов уже заставил пересмотреть отношение к модернизациям в развитии общества [2, 4], где на местах Ас-, ИН-, Эк-, Эл-Родов были соответственно демократизация, бюрократизация, секуляризация, индустриализация. Однако не менее серьёзные рекомендации из этого можно извлечь и во многих других тематиках, например, в развитии технических методов, родами для которых оказываются соответственно технология, инструмент, модель и задача, или в развитии теплопередачи, где родами оказываются представления соответственно о тепловом движении, о среде, об источнике тепла, о распространении тепла.

**3. К развитию через теории всего на функциональном уровне.** Здесь всё связано с формированием и анализом ПИФ на качественных моделях  $\wedge$ ТВ и их объеди-

нений. Само содержание структуры  $\wedge$ ТВ для поведения ПИФ значения не имеет, но является определяющим для интерпретации этого поведения при конкретных приложениях.

Первый шаг в работе с ПИФ у любой ДИС связан с формированием этого ПИФ и заключается в наведении определённости с выбором объективного и субъективного начала в работе каждого из рёбер и соответствующих этому функциональных параметров данной ДИС [3]. В частности, такой момент требуется для работы с ПИФ на любой схеме типа ДИС, востребованной в рамках  $\wedge$ ТВ. Этот первый шаг можно назвать *вариантом актуализации и сущности развития на алгоритмическом уровне*.

Второй шаг в работе с ПИФ у любой ДИС связан с анализом этого ПИФ и заключается в выборе целей под такой анализ. Многообразие возможных целей практически неисчерпаемо, поэтому далее ограничимся лишь несколькими, наиболее актуальными для темы  $\wedge$ ТВ целями. А в целом второй шаг можно назвать *вариантом актуализации и сущности развития на целевом (телеологическом) уровне*.

Первая цель анализа ПИФ в связи с  $\wedge$ ТВ заключается в исследовании поведения ПИФ на схеме любого из родов данной  $\wedge$ ТВ как ДИС. Такое исследование за счёт варьирования функциональными параметрами ДИС может ограничиваться частью схемы, например, представителем или даже объективным законом  $\wedge$ ТВ [1]. Случай первой цели можно назвать *вариантом актуализации и сущности развития на онтологическом целевом уровне*.

Вторая цель анализа ПИФ в связи с  $\wedge$ ТВ заключается в исследовании поведения ПИФ у схем, получающихся дешифровкой до мини-категорий из номологической базы [1, 5] любой из схем, представляющей рода данной  $\wedge$ ТВ. Оно тоже может ограничиваться частью схемы, в роли которой могут выступать уже простые и производные законы  $\wedge$ ТВ. Случай второй цели можно назвать *вариантом актуализации и сущности развития на номологическом целевом уровне*.

Наконец, отмеченные в п. 2 и осуществлённые в [2] исследования дают пример третьей, особой цели анализа ПИФ в связи с  $\wedge$ ТВ. Дело в том, что ПИФ здесь работает не на самой  $\wedge$ ТВ, не на поле номологической базы, как оно было при первой и второй цели, а на поле синтеза родов одной  $\wedge$ ТВ. Здесь и ресурс по природе качественно новый, выражающий распределение сосредоточений по родам  $\wedge$ ТВ, например, внимания, заботы в обществе, в коллективе, а то и у отдельного индивида. Целью здесь является обеспечение возможно большей активности на месте Эл-Рода  $\wedge$ ТВ. Как-никак, но Эл-Род является проводником к первичному синтезу  $\wedge$ ТВ в циклы и классы их сопряжённости, так что указанная цель обеспечивает одновременно поддержку развития на структурном уровне. В итоге случай третьей цели анализа ПИФ уместно назвать *вариантом актуализации и сущности развития на стратегическом уровне*.

Итак, получились 4 качественно различных варианта актуализации и сущности развития на функциональном уровне – на алгоритмическом, два на телеологическом (онтологический и номологический) и на стратегическом уровнях. При этом телеологический и стратегический уровни при необходимости могут получить детализацию или, наоборот, расширение поля действия.

Вот так понятие развития оказывается тесно связанным с  $\wedge$ ТВ. И его суть становится более определённой вслед за раскрытием сути самих  $\wedge$ ТВ. А обеспечение развития вполне можно сделать неотъемлемой функцией технологий моделирования.

**4. Заключение.** Каковы масштабы моделируемых систем и инструментов моделирования? Насколько универсальной для систем любых масштабов может быть методология моделирования? В русле развития теории ДИС, ДИС-технологии решение данных вопросов уместно соотнести с представлениями о  $\wedge$ ТВ в универсальном мас-

штабе, не ограничиваясь только задачами квантовой и релятивистской физики. Базой для конструирования ^ТВ выступает универсум категорий, организованных как полно-связная система, но доступная для пополнения новыми категориями, – номологическая база [5], включающая сейчас около 2500 категорий, и эта информация хранится и регулярно обновляется на сайте <http://thoughttring.com/ViewForm.aspx?id=421>.

Проработка ^ТВ предполагает четыре рода – аспектный, инструментальный, экспериментальный и элементный рода. Структурный уровень далее дополняется функциональным подходом. На смысловом уровне перечисленные рода увязаны схемой когнитивной ячейки (рис. 1). Сформулирована теорема, регламентирующая правила перераспределения ресурсов на языке ПИФ ДИС, что позволяет нетривиальным образом обсуждать сценарии развития систем, к примеру, модернизаций в обществе.

Анализ ^ТВ позволяет конструктивно подойти к теме развития. Выявлены 4 качественно различных варианта актуализации и сущности развития на функциональном уровне – на алгоритмическом, два на телеологическом (онтологический и номологический) и на стратегическом уровнях. Полученные представления способны послужить средством для дополнения ускоренно развивающихся в XXI в. технологий адекватной этому методологией моделирования.

#### Список литературы

1. Сизиков В.П. Измерительные процедуры и теории всего / В.П. Сизиков, В.И. Разумов // Современные тенденции развития науки и технологий: Сб. науч. тр. по матер. XXV Междун. науч.-прак. конф. 29 апреля 2017 г.: в 5 ч. / Под общ. ред. Ж.А. Шаповал. – Белгород: ООО АПНИ, 2017. – № 4. Ч. I. – С. 23–36. То же [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.issledo.ru>.
2. Сизиков В.П. Системный анализ стратегий развития общества / В.П. Сизиков, В.И. Разумов // Современные тенденции развития науки и технологий: Сб. науч. тр. по матер. XXIV Междун. науч.-прак. конф. 31 марта 2017 г. – Белгород: ИП Ткачёва Е.П., 2017. – № 3–11. – С. 14–23. То же [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.issledo.ru>.
3. Сизиков В.П. Общество в ракурсе турбулентности / В.П. Сизиков, В.И. Разумов // Нейроинформатика, её приложения и анализ данных: Матер. XXIII Всерос. сем. – Красноярск: ИВМ СО РАН, 2015. – С. 90–96.
4. Сизиков В.П. Какие экономика и финансы нужны России? / В.П. Сизиков, В.И. Разумов // Проблемы и перспективы развития гуманитарных и социально-экономических наук: Сб. науч. тр. по матер. Междун. науч.-прак. конф. 31 мая 2017 г.: в 4 ч. / Под общ. ред. Ж.А. Шаповал. Белгород: ООО Агентство перспективных научных исследований (АПНИ), 2017. – Ч. IV. – С. 117–126. То же [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.issledo.ru>.
5. Разумов В.И. Приложения информационных основ синтеза систем: ДИС-развёртки и парадигма закона. Монография [Электронный ресурс] / В.И. Разумов, В.П. Сизиков. Электронное издание № 33934. № гос. регистр. 0321304636, ФГУП НТЦ «Информрегистр». – Омск. 2014.

# ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ИОНИЗАЦИИ И РЕКОМБИНАЦИИ МЕЗОСФЕРНОГО НАТРИЯ

С.А. Симинчук, Н.И. Косарев<sup>1</sup>

Сибирский федеральный университет,  
Институт цветных металлов и материаловедения, кафедра фундаментального  
естественнонаучного образования,

<sup>1</sup>*kosarev\_nikolai@mail.ru, swet0076@mail.ru*

Среди всех химических элементов, находящихся в земной атмосфере, для натрия имеются наиболее полные данные о высотном профиле плотности и других параметрах [1]. Слой атомарного натрия толщиной около 10 км находится на высоте примерно 92 км. Ввиду относительно большой его плотности в атмосфере по отношению к другим элементам, натрий играет значительную роль в химических реакциях и в излучательных свойствах нижней ионосферы Земли. Исследование кинетики ионизации нейтрального натрия солнечным излучением и рекомбинации его иона в ночное время суток является весьма актуальной задачей.

В представленной работе методом компьютерного моделирования исследуется химическая и фотокинетика мезосферного натрия с учетом лазерной подсветки атомов на резонансном переходе с длиной волны 589нм. Для решения этой задачи в соответствии с известными методиками рассчитаны сечения фотоионизации натрия с этих уровней, скорости прямых и обратных фотопроцессов. Рассчитана кинетика ионизации натрия и его рекомбинации в оптически тонком случае.

Модель балансных уравнений, учитывающая образование комплексных ионов с участием натрия, фотовозбуждение 3P состояния резонансного перехода в натрии  $3S \leftrightarrow 3P$  солнечным светом и фотоионизацию атомов натрия для приближения оптически тонкого слоя, в соответствии с работами [2, 3], имеет вид:

$$\frac{d[Na]_1}{dt} = -(\alpha_{v1} + \alpha_{Na, O_2^+, N_2^+} + B_{12} \cdot J_{12}) \cdot [Na]_1 + (B_{21} \cdot J_{21} + A_{21}) \cdot [Na]_2 + \alpha_{Na^+ CO_2, e} \cdot [Na^+ CO_2] + \alpha_{Na^+ H_2O, e} \cdot [Na^+ H_2O] \quad (1)$$

$$\frac{d[Na]_2}{dt} = -(\alpha_{v2} + \alpha_{Na, O_2^+, N_2^+} + B_{21} \cdot J_{21} + A_{21}) \cdot [Na]_2 + B_{12} \cdot J_{12} \cdot [Na]_1 \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[Na]_+}{dt} = & -(\alpha_{Na^+, N_2} + \alpha_{Na^+, CO_2, N_2}) \cdot [Na]_+ + (\alpha_{v1} + \alpha_{Na, O_2^+, N_2^+}) \cdot [Na]_1 + \\ & + (\alpha_{v2} + \alpha_{Na, O_2^+, N_2^+}) \cdot [Na]_2 + \alpha_{Na^+ N_2, N_2} \cdot [Na^+ N_2] + \\ & + \alpha_{Na^+ CO_2, N_2} \cdot [Na^+ CO_2] \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{d[Na^+ N_2]}{dt} = -(\alpha_{Na^+ N_2, N_2} + \alpha_{Na^+ N_2, CO_2}) \cdot [Na^+ N_2] + \alpha_{Na^+, N_2} \cdot [Na]_+ \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{d[Na^+ CO_2]}{dt} = & -(\alpha_{Na^+ CO_2, N_2} + \alpha_{Na^+ CO_2, e} + \alpha_{Na^+ CO_2, H_2O}) \cdot [Na^+ CO_2] + \\ & + \alpha_{Na^+, CO_2, N_2} \cdot [Na]_+ + \alpha_{Na^+ N_2, CO_2} \cdot [Na^+ N_2] \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{d[\text{Na}^+\text{H}_2\text{O}]}{dt} = -(\alpha_{\text{Na}^+\text{H}_2\text{O},e} + \alpha_{\text{уход}}) \cdot [\text{Na}^+\text{H}_2\text{O}] + \alpha_{\text{Na}^+\text{CO}_2,\text{H}_2\text{O}} \cdot [\text{Na}^+\text{CO}_2], \quad (6)$$

где в квадратных скобках обозначены плотности соответствующих компонент:  $[\text{Na}]_1$  - плотность атомов в основном состоянии 3S;  $[\text{Na}]_2$  - плотность атомов в возбужденном состоянии 3P;  $[\text{Na}]_+$  - плотность ионов натрия;  $[\text{Na}^+\text{N}_2]$ ,  $[\text{Na}^+\text{CO}_2]$  и  $[\text{Na}^+\text{H}_2\text{O}]$  - плотности комплексных ионов  $\text{Na}^+ \cdot \text{N}_2$ ,  $\text{Na}^+ \cdot \text{CO}_2$  и  $\text{Na}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  соответственно;  $B_{12} \cdot J_{12}$  - частота фотовозбуждения, а  $B_{21} \cdot J_{21}$  - частота девозбуждения уровня 3P атома натрия под действием солнечной радиации;  $\alpha_{v1}$  - частота фотоионизации с основного уровня;  $\alpha_{v2}$  - частота фотоионизации с возбужденного уровня натрия;  $\alpha_{\text{уход}}$  - частота ухода комплексных ионов  $\text{Na}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  в нижние слои;  $\alpha_{\text{Na},\text{O}_2^+,\text{N}_2^+}$  - частота ионизации натрия при столкновениях с молекулярными ионами  $\text{O}_2^+$  и  $\text{N}_2^+$ ;  $\alpha_{\text{Na}^+\text{CO}_2,e}$  - частота рекомбинации комплексного иона  $\text{Na}^+ \cdot \text{CO}_2$  при столкновении с электронами;  $\alpha_{\text{Na}^+\text{H}_2\text{O},e}$  - частота рекомбинации комплексного иона  $\text{Na}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  при столкновении с электронами и т.д. Уравнения (1) - (6) были дополнены начальными условиями

$$N_{\text{Na}}(t_0) = N_0, \quad N_{\text{Na}^+}(t_0) = 0, \quad N_{\text{Na}^+\text{N}_2}(t_0) = 0, \quad N_{\text{Na}^+\text{CO}_2}(t_0) = 0, \quad N_{\text{Na}^+\text{H}_2\text{O}}(t_0) = 0, \quad (7)$$

соответствующими тому, что в момент времени  $t_0 = 0$  плотность атомарного натрия составляет  $N_0$ , а комплексных ионов нет. Методика расчета коэффициентов уравнений (1) – (6) подробно описана в работе [2]. В итоге для характерного времени фотоионизации с возбужденного уровня получено значение  $\tau_{\phi,2} = (\alpha_{v,2})^{-1} = 9.8\text{с}$ , а для фотоионизации с основного состояния характерное время составило  $\tau_{\phi,1} = (\alpha_{v,1})^{-1} = 18165\text{секунд}$ .

Построенная система уравнений (1) - (6) с начальными условиями (7) решалась численно.

Кинетика поведения плотности нейтрального натрия, иона натрия и комплексных ионов, участвующих в реакциях с натрием показана на рисунке 1 в логарифмическом масштабе. В предварительных расчетах учитывалось фотовозбуждение только солнечным светом без участия лазерной подсветки натрия. Расчетные данные показали, что значения населённости атома натрия – кривая 1, его иона – кривая 2 и комплексного иона  $\text{Na}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  выходят на стационарные значения 0.87, 0.1 и 0.035 соответственно. Плотности молекулярных ионов  $\text{Na}^+ \cdot \text{N}_2$  и  $\text{Na}^+ \cdot \text{CO}_2$ , как видно из рисунка 1, гораздо меньше плотности иона  $\text{Na}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$ . Результаты расчетов также показали, что учёт в модели процессов фотовозбуждения солнечным светом состояния 3P, кривая 6, и фотоионизации уровней 3S и 3P не приводит к существенному изменению населённости всех вышеназванных компонент. Населенность состояния 3P можно было бы значительно увеличить, используя лазерное излучение с длительностью превосходящей характерное время ионизации возбуждённого состояния 3P в атоме натрия. В соответствии с вышесказанным моделировалось воздействие на резонансный переход лазерным излучением вида

$$I_{\text{л}}(\nu, t) = I_0 \cdot \frac{(\Delta\nu_{\text{л}}/2)^2}{(\nu - \nu_{\text{л}})^2 + (\Delta\nu_{\text{л}}/2)^2} \cdot \frac{t}{\tau_{\text{имп}}} \cdot \exp\left(1 - \frac{t}{\tau_{\text{имп}}}\right).$$

Здесь  $\tau_{\text{имп}}$  - длительность импульса – время, значение которого варьировалось по отношению к характерному времени фотоионизации атомов натрия с возбужденного ЗР состояния,  $I_0$  - интенсивность, а  $\Delta\nu_{\text{л}}$  - частотная ширина лазерного излучения. Использовались следующие значения для  $I_0=1 \text{ Вт/см}^2$ , а  $\Delta\nu_{\text{л}}=100 \Delta\nu_{\text{Д}}$ , где  $\Delta\nu_{\text{Д}}$  доплеровская ширина линии [3].

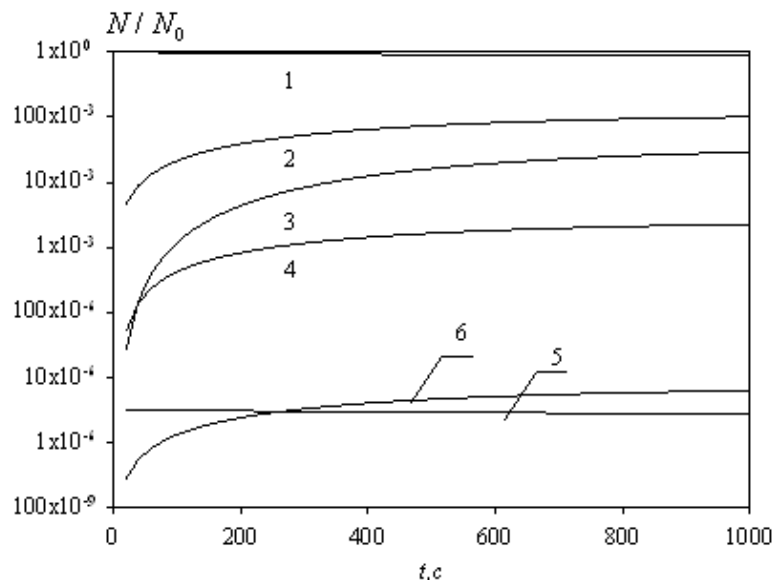


Рис. 1. Динамика плотности атомов натрия в основном состоянии – кривая 1, ионов натрия – кривая 2, комплексного иона  $\text{Na}^+ \cdot \text{H}_2\text{O}$  – кривая 3, комплексных ионов  $\text{Na}^+ \cdot \text{N}_2$  и  $\text{Na}^+ \cdot \text{CO}_2$  – кривые 4,5. Населенность возбужденного уровня резонансного перехода натрия – кривая 6.

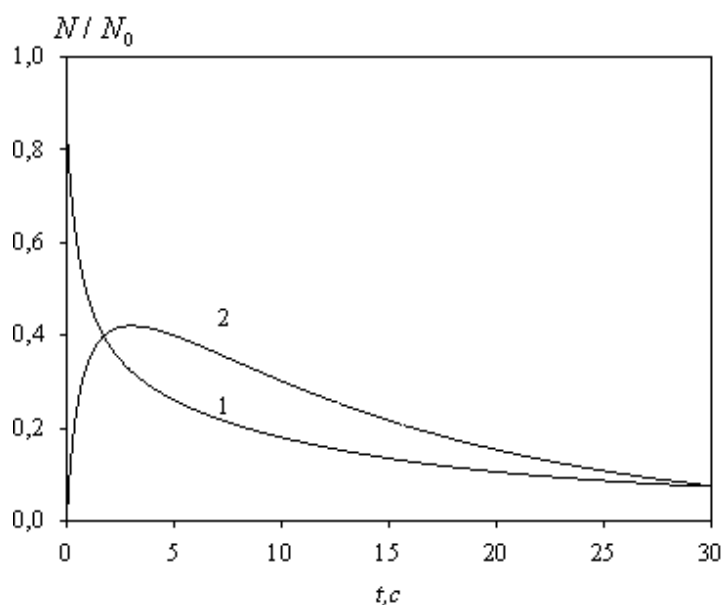


Рис. 2. Кинетика поведения концентрации атомов натрия в основном состоянии – кривая 1, и в возбужденном – кривая 2 состояниях при воздействии лазерным импульсом длительностью  $\tau_{\text{имп}} = 10 \text{ с}$ .

На рис 2 приведена зависимость изменения концентрации атомов в основном и в возбужденном состояниях при длительности лазерного импульса 10 с, что примерно

равно характерному времени фотоионизации (9,8 с). Видно, что при воздействии на резонансный переход атома натрия лазерным излучением большой длительности (больше  $\tau_{ф,2}$ ), населенность уровня 3P значительно возрастает. Это приводит к эффективной ионизации атомов натрия под действием солнечного света именно с этого возбужденного уровня.

Зависимость плотности ионов от длительности лазерного излучения показана на рис.3. Из него видно, что ионизация атомов меньше 50% при длительностях лазерного излучения меньших 3 с. При  $\tau_{имп}$  больших 12с получена почти полная ионизация атомов натрия солнечным светом.

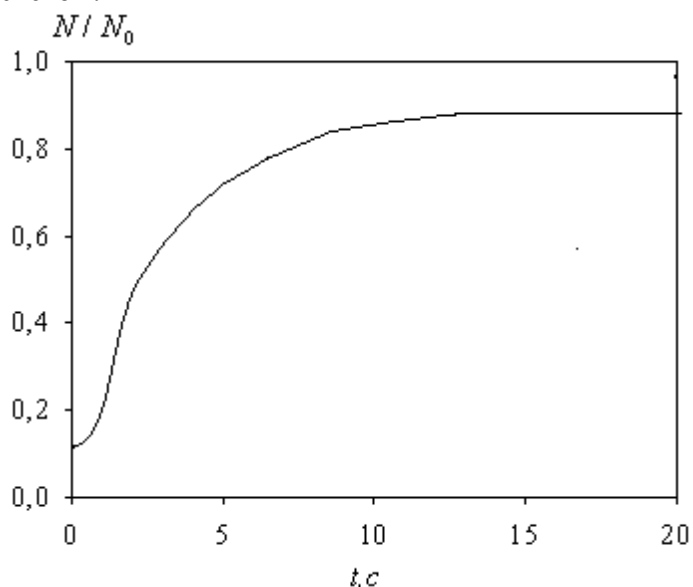


Рис. 3. Кинетика изменения доли ионов натрия в зависимости от длительности импульса лазерного излучения.

В заключение отметим, что результаты моделирования химической и фото кинетики мезосферного натрия показали, что в дневное же время суток более 80% атомов находится в атомарном состоянии. При воздействии на резонансный переход атома натрия лазерным излучением, длительностью порядка и большего, чем характерное время фотоионизации с возбужденного состояния, населенность возбужденного состояния 3P значительно возрастает. Это приводит к эффективной ионизации атомов натрия под действием солнечного света. Полученные выводы могут быть использованы при проведении экспериментов по созданию искусственных лазерно–индуцированных звезд на мезосферном натрии для решения задач адаптивной атмосферной оптики.

#### Список литературы

1. Фриш С.Э. Спектроскопия газоразрядной плазмы / Под. ред. С.Э. Фриша –Л.:Наука. 1970.–372 с.
2. Косарев Н.И. Кинетика ионизации и рекомбинации атмосферного натрия / Н.И. Косарев // Оптика атмосферы и океана.–2013.–Т.26.–№9.С.766-772.
3. Косарев Н.И. Моделирование ионизации мезосферного натрия солнечным светом / Косарев Н.И., Симинчук С.А., Байкалова С.И.//Междисциплинарные исследования в области математического моделирования и информатики: материалы 7-й междунар. научн-практ. конф (Тольятти 30-31 марта, 2016г) – Ульяновск, 2016. –. С 65-71

# НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ ПАРАМЕТРОВ РЕЖИМОВ ИСПЫТАНИЯ ГАЗОТУРБИННЫХ АВИАДВИГАТЕЛЕЙ

С.А. Субботин, А. В. Корниенко, А.А. Олейник

Запорожский национальный технический университет, каф. программных средств,  
*subbotin@zntu.edu.ua*

Проведение испытаний авиационных двигателей связано со значительными затратами, обусловленными большой стоимостью горючего, используемого для исследования работы авиадвигателей в различных режимах. Кроме расхода топлива, процесс испытаний авиадвигателей связан со значительными затратами времени в условиях ограниченной пропускной способности испытательного центра, что также влияет на стоимость испытаний. Поэтому актуальной задачей является построение моделей зависимостей параметров газотурбинных авиадвигателей в различных режимах испытаний для дальнейшего уменьшения числа режимов и времени испытаний [1].

Одним из наиболее перспективным средств построения моделей по наблюдениям в условиях отсутствия известных аналитических зависимостей являются искусственные нейронные сети [2–7], которые способны во время обучения за счет обобщения извлекать знания из данных. Поэтому для построения моделей зависимостей параметров авиадвигателей целесообразно выбрать нейронные сети.

В качестве базиса для построения моделей были выбраны искусственные нейронные сети прямого распространения [8–11], которые являются универсальными аппроксиматорами и обладают высокими способностями к обучению и обобщения.

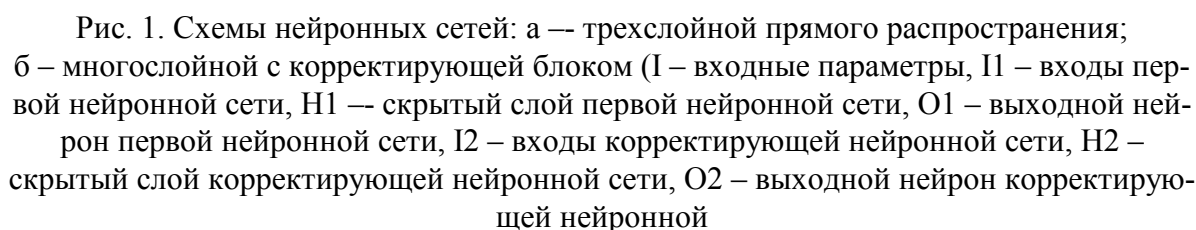
Для проведения вычислительных экспериментов использовалась разработанная авторами компьютерная программа "Библиотека классов ConvNet", предназначенная для построения и обучения нейросетей. Для работы с библиотекой необходимым компонентом является предварительно установленная платформа .NET framework версии 4.0 или выше. Программа позволяет строить модели на основе сверточных нейронных сетей и многослойных нейросетей прямого распространения с использованием градиентных методов обучения и техники обратного распространения ошибки, а также использовать их для автоматизации принятия решений и прогнозирования.

Библиотека содержит следующие классы: Kernel – обеспечивает хранение весовых коэффициентов одного слоя нейронной сети, а также возможность задания начальных значений для весовых коэффициентов; Layer – обеспечивает хранение всех метаданных о слоях нейронной сети; Dataset – обеспечивает хранение набора данных для обучения и тестирования, позволяет выполнять действия с данными: сложение, нормирование, исправление выбросов в данных, заполнение пропущенных значений, перемешивание выборки; Out – сохраняет результат одной итерации обучения; CNN – реализует методы для создания нейронной сети и для работы с ней, позволяет добавлять слои, проводить обучение с использованием обратного распространения ошибки, проводить классификацию данных, хранить и загружать нейронную сеть.

Для создания прикладного решения необходимо создать программу-приложение с использованием библиотеки. Сначала создается нейронная сеть заданного типа, после чего добавляется необходимое количество слоев с указанием их параметров. Далее задается выборка данных. После этого при необходимости данные нормируются, исправляются выбросы и заполняются пропущенные значения. Далее на основе выборки проводится обучение нейросети.

Вычислительные эксперименты проводились для выборки данных об испытаниях газотурбинных двигателей в четырех режимах работы: номинальном, взлетном, первом крейсерском, втором крейсерском [1]. Определение проходного сечения межлопа-

В первом эксперименте была построена модель на основе трехслойной нейронной сети с 23 входными нейронами и 18 выходными (рис. 1а).



Поскольку точность построенной единой нейромодели с множеством выходных параметров недостаточна, то для увеличения точности во второй серии экспериментов были построены отдельные модели для каждого из выходных параметров. В результате получено 18 нейронных сетей с 23 входными нейронами и 1 выходным.

Число нейронов в скрытом слое выбиралась экспериментально. На рис. 2а изображен график зависимости относительной ошибки от числа нейронов в скрытом слое для параметра  $T_3$  в режиме «взлетный».

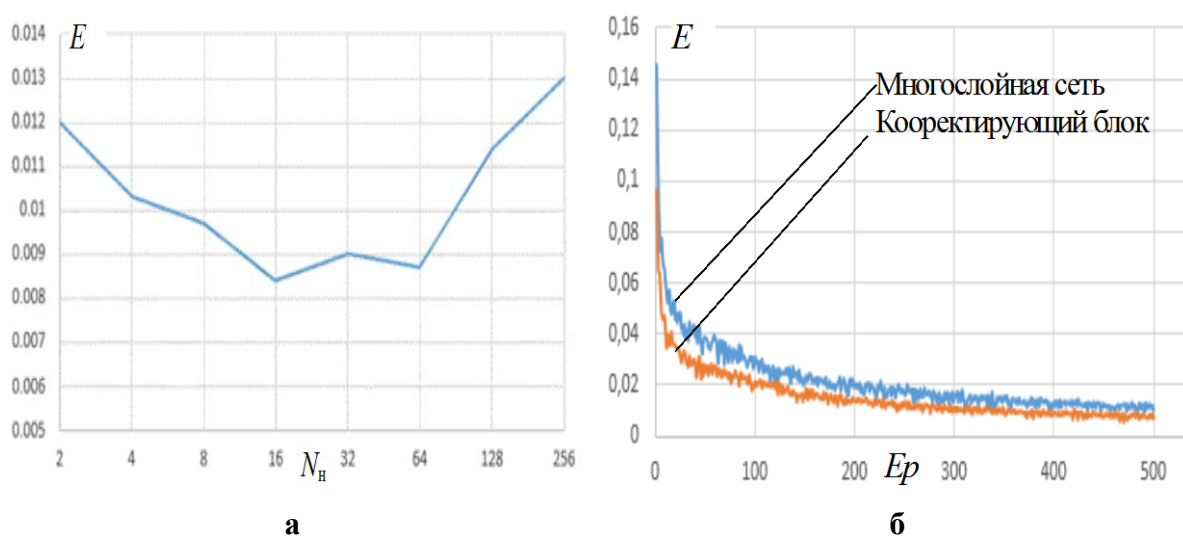


Рис. 2. График зависимости ошибки  $E$ :  
а – от числа нейронов  $N_n$  во второй серии экспериментов;  
б – от общей численности эпох обучения  $E_p$  в третьей серии экспериментов

Для каждого из параметров наименьшее значение ошибки достигалось 16–64 нейронах в скрытом слое. Наилучшие результаты были достигнуты при 32 нейронах в скрытом слое: получены относительные ошибки от 0,14% до 1,61% в зависимости от типа выходного параметра.

Для увеличения точности построенных моделей в третьей серии экспериментов предложено использовать нейронные сети с корректирующим блоком. При этом используются две нейронные сети: первая работает как и предыдущие модели, а вторая нейронная сеть исправляет результаты работы первой. Для этого значение выхода первой сети передается на вход второй вместе с входными параметрами (рис. 1б). Обучение каждой сети проводилось отдельно на основе градиентного метода и обратного распространения ошибки. После обучения первой нейронной сети рассчитывались выходные значения для обучающей и тестовой выборок. После этого так же обучалась корректирующая нейронная сеть.

На рис. 2б изображены графики зависимостей среднеквадратической ошибки от числа эпох обучения для первой и второй (корректирующей) нейронных сетей.

В табл. 1 приведен фрагмент полученных результатов. Здесь указаны реальные значения параметра  $n_{tk}$ , а также оценки, полученные с помощью построенных моделей ( $M_1$  – без корректирующей нейросети,  $M_2$  – с корректирующей нейросетью) и относительные ошибки ( $O_1$  – без корректирующей нейросети,  $O_2$  – с корректирующей нейросетью). Номер экземпляра обозначен как  $s$ .

В табл. 2 приведены усредненные результаты по всем прогнозируемым параметрам. Как видно из табл. 1 и табл. 2 предложенная архитектура нейросети с корректирующим блоком обеспечивает повышение точности оценивания значения прогнозируемого параметра по сравнению с использованием трехслойной нейросети без коррекции.

Таблица 1

Фрагмент результатов экспериментов для  $n_{tk}$ 

| s  | Режим «взлетный» |       |       |           |           | Режим «2 крейсерский» |       |       |           |           |
|----|------------------|-------|-------|-----------|-----------|-----------------------|-------|-------|-----------|-----------|
|    | $n_{tk}$         | $M_1$ | $M_2$ | $O_1, \%$ | $O_2, \%$ | $n_{tk}$              | $M_1$ | $M_2$ | $O_1, \%$ | $O_2, \%$ |
| 1  | 97,4             | 97,48 | 97,47 | 0,08      | 0,07      | 91,7                  | 92,06 | 91,97 | 0,39      | 0,29      |
| 2  | 98,1             | 98,06 | 98,09 | 0,05      | 0,01      | 92                    | 92,06 | 92,05 | 0,07      | 0,05      |
| 3  | 97,5             | 97,36 | 97,39 | 0,14      | 0,12      | 92,01                 | 91,8  | 91,88 | 0,23      | 0,14      |
| 4  | 97,6             | 97,45 | 97,49 | 0,16      | 0,11      | 91,9                  | 91,91 | 91,92 | 0,01      | 0,02      |
| 5  | 97,4             | 97,49 | 97,48 | 0,09      | 0,08      | 91,6                  | 91,85 | 91,78 | 0,27      | 0,2       |
| 6  | 98               | 97,64 | 97,77 | 0,37      | 0,24      | 91,7                  | 91,77 | 91,74 | 0,07      | 0,05      |
| 7  | 98               | 97,89 | 97,95 | 0,11      | 0,05      | 92,1                  | 92,15 | 92,12 | 0,06      | 0,02      |
| 8  | 97,6             | 97,49 | 97,53 | 0,11      | 0,07      | 91,7                  | 91,85 | 91,81 | 0,16      | 0,12      |
| 9  | 98               | 97,82 | 97,9  | 0,18      | 0,1       | 91,65                 | 91,72 | 91,69 | 0,07      | 0,04      |
| 10 | 98               | 97,8  | 97,9  | 0,2       | 0,11      | 91,7                  | 91,81 | 91,8  | 0,12      | 0,1       |
| 11 | 98,1             | 97,67 | 97,82 | 0,44      | 0,28      | 91,7                  | 91,79 | 91,75 | 0,09      | 0,06      |
| 12 | 98               | 97,88 | 97,95 | 0,12      | 0,05      | 91,8                  | 91,97 | 91,93 | 0,18      | 0,14      |
| 13 | 97,4             | 97,58 | 97,55 | 0,18      | 0,15      | 91,8                  | 91,97 | 91,93 | 0,18      | 0,14      |
| 14 | 97,7             | 97,59 | 97,64 | 0,12      | 0,06      | 91,8                  | 91,83 | 91,83 | 0,03      | 0,04      |
| 15 | 97,9             | 97,61 | 97,72 | 0,29      | 0,19      | 91,8                  | 91,96 | 91,93 | 0,18      | 0,14      |
| 16 | 98               | 97,82 | 97,9  | 0,18      | 0,1       | 91,8                  | 91,83 | 91,83 | 0,04      | 0,03      |
| 17 | 97,6             | 97,59 | 97,61 | 0,01      | 0,01      | 91,9                  | 92,12 | 92,05 | 0,24      | 0,16      |
| 18 | 98               | 97,72 | 97,83 | 0,28      | 0,18      | 92                    | 92,13 | 92,08 | 0,15      | 0,09      |
| 19 | 97,65            | 97,71 | 97,71 | 0,06      | 0,06      | 91,8                  | 92,02 | 91,96 | 0,24      | 0,18      |
| 20 | 97,9             | 97,88 | 97,91 | 0,02      | 0,01      | 91,8                  | 92,01 | 91,96 | 0,23      | 0,17      |
| 21 | 97,8             | 97,79 | 97,8  | 0,01      | 0         | 91,8                  | 91,85 | 91,86 | 0,05      | 0,07      |
| 22 | 98               | 98,06 | 98,06 | 0,07      | 0,06      | 92,3                  | 92,02 | 92,1  | 0,3       | 0,21      |
| 23 | 98               | 97,84 | 97,91 | 0,16      | 0,09      | 91,8                  | 91,99 | 91,94 | 0,21      | 0,15      |
| 24 | 97,8             | 97,78 | 97,81 | 0,02      | 0,01      | 92,15                 | 92,02 | 92,06 | 0,14      | 0,1       |
| 25 | 97,75            | 97,61 | 97,66 | 0,15      | 0,09      | 91,6                  | 91,54 | 91,55 | 0,07      | 0,05      |

Таблица 2

Усредненные результаты экспериментов

| Параметр       | Режим «взлетный» |           | Режим «2 крейсерский» |           |
|----------------|------------------|-----------|-----------------------|-----------|
|                | $O_1, \%$        | $O_2, \%$ | $O_1, \%$             | $O_2, \%$ |
| $n_{tk}$       | 0,14             | 0,09      | 0,15                  | 0,11      |
| $T_3$          | 0,86             | 0,57      | 0,43                  | 0,38      |
| $G_t$          | 0,57             | 0,41      | 0,64                  | 0,43      |
| $t_{вх}$       | 0,5              | 0,33      | 0,66                  | 0,34      |
| $N_{ст}$       | 0,28             | 0,19      | 0,46                  | 0,32      |
| $\alpha_{ВНА}$ | 0,91             | 0,52      | 0,15                  | 0,08      |
| $N_{пр}$       | 0,91             | 0,54      | 0,37                  | 0,25      |
| $C_B$          | 1,61             | 0,97      | 1,39                  | 1,3       |
| $\pi_k$        | 1,36             | 0,95      | 0,65                  | 0,51      |

Предложенная в работе архитектура нейронной сети, содержащая блок коррекции, позволяет по результатам проведенных экспериментов достигать приемлемой точ-

ности при решении задачи моделирования зависимостей параметров различных режимов испытаний газотурбинных авиадвигателей.

Дальнейшие исследования могут быть направлены на сокращение размерности входа моделей [12–16] и редукцию моделей посредством контрастирования [2, 9].

#### Список литературы

1. Прогрессивные технологии моделирования, оптимизации и интеллектуальной автоматизации этапов жизненного цикла авиационных двигателей : монография / [А. В. Богуслаев, Ал. А. Олейник, Ан. А. Олейник, Д. В. Павленко, С. А. Субботин] ; под ред. Д. В. Павленко, С. А. Субботина. – Запорожье : ОАО "Мотор Сич", 2009. – 468 с.
2. Интеллектуальные средства диагностики и прогнозирования надёжности авиадвигателей : монография / [В. И. Дубровин, С. А. Субботин, А. В. Богуслаев, В. К. Яценко]. – Запорожье : ОАО "Мотор-Сич", 2003. – 279 с.
3. Kumar K. V. Neural networks and fuzzy logic / K. V. Kumar. – New Delhi: S. K. Kataria & Sons, 2009. – 300 p.
4. Рутковская Д. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечёткие системы / Д. Рутковская, М. Пилиньский, Л. Рутковский ; пер. с польск. И. Д. Рудинского. – М.: Горячая линия – Телеком, 2004. – 452 с.
5. Интеллектуальные информационные технологии проектирования автоматизированных систем диагностирования и распознавания образов : монография / [С. А. Субботин, Ан. А. Олейник, Е. А. Гофман, С. А. Зайцев, Ал. А. Олейник] ; под ред. С. А. Субботина. – Харьков : Компания СМИТ, 2012. – 318 с.
6. Rao V. B. C++ neural networks and fuzzy logic / V. B. Rao. – Foster City: M&T Books, 1995. – 549 p.
7. Bishop C. Neural networks for pattern recognition / C. Bishop. – New York: Oxford University Press, 1995. – 482 p.
8. Круглов В. В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика / В. В. Круглов, В. В. Борисов. – М.: Горячая линия – Телеком, 2001. – 382 с.
9. Миркес Е. М. Нейроинформатика : учеб. пособие / Е. М. Миркес. – Красноярск: ИПЦ КГТУ, 2002. – 347 с.
10. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации / С. Осовский. – М.: Финансы и статистика, 2004. – 344 с.
11. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс / С. Хайкин. – СПб: Вильямс, 2005. – 1104 с.
12. Ravindran A. Engineering optimization: methods and applications / A. Ravindran, K. M. Ragsdell, G. V. Reklaitis. – New Jersey: John Wiley & Sons, 2006. – 688 p.
13. Dash M. Feature selection for classification / M. Dash, H. Liu // Intelligent data analysis. – 1997. – №1. – P. 131–156.
14. Dong M. Feature subset selection using a new definition of classifiability / M. Dong, R. Kothari // Pattern recognition letters. – 2003. – № 24. – P. 1215–1225.
15. Guyon I. An introduction to variable and feature selection / I. Guyon, A. Elisseeff // Journal of machine learning research. – 2003. – № 3. – P. 1157–1182.
16. John G. H. Irrelevant features and the subset selection problem / G. H. John, R. Kohavi, K. Pfleger // Machine Learning : Eleventh international conference, New Brunswick, 10-13 July 1994 : proceedings / eds.: W.W. Cohen, H. Hirsh. – San Francisco : Morgan Kaufmann Publishers, 1994. – P. 121–129.

# СВЕТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ, ПОРОЖДАЕМЫЕ ГИГАНТСКИМИ АТМОСФЕРНЫМИ БОЛИДАМИ

<sup>1</sup>Титов А.К., <sup>1</sup>Хренников Д.Е., <sup>1,2</sup>Ершов А.Е., <sup>1,3</sup>Карпов С.В.

<sup>1</sup>Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева,

<sup>2</sup>Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

<sup>3</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН  
*alexander.ershov@icm.krasn.ru*

**Аннотация:** Исследуются условия проникновения в атмосферу Земли из межпланетного пространства крупных космических тел (КТ). На основе расчетов траектории крупного КТ определяется температура воспламеняющихся материалов на поверхности Земли, которые нагреваются за счет поглощения оптического излучения головы болида за время его пролета при различных значениях минимальной высоты траектории, размера КТ и температуры излучающей поверхности. Полученные результаты сопоставляются с наблюдательными данными по Тунгусскому космическому явлению для получения доказательств того, что именно световое излучение высокой интенсивности могло способствовать возникновению пожаров в районе эпицентра. Данное утверждение выдвигается в качестве новой концепции и подвергается в работе экспериментальной проверке.

## 1. Введение

Проблеме проникновения в атмосферу Земли из межпланетного пространства малых космических тел и физике метеорных явлений посвящены десятки монографий, изданных за последние десятилетия (см., напр., [1-4]). Между тем, исследования сверхъярких атмосферных болидов ограничены чрезвычайной редкостью таких событий и дефицитом наблюдательного материала, что, в свою очередь, препятствует развитию теоретических моделей столь экстремальных явлений. В этой связи наблюдение Челябинского метеорита 2013 года предоставило уникальный экспериментальный материал [3,4], который позволил по-новому взглянуть на проблему гигантских болидов и предложить новые интерпретации известных в истории метеоритики явлений, не получивших объяснения и до сегодняшнего дня. К наиболее известным из них относится Тунгусское космическое тело 1908 года [1,2]. В частности, до настоящего времени не установлена его истинная природа и не названа сколько-нибудь убедительная причина пожаров, охвативших территорию эпицентра с площадью более 160 квадратных километров.

Целью настоящей работы является расчет траектории крупного КТ при его сквозном прохождении через плотные слои атмосферы Земли со скоростью несколько десятков километров в секунду на минимальной высоте, соответствующей верхней границе тропосферы, а также определение условий достижения температуры воспламенения горючих материалов на поверхности Земли, которые нагреваются при поглощении оптического излучения от головы болида за время пролета.

Полученные результаты сопоставляются с наблюдательными данными по Тунгусскому космическому явлению для получения свидетельств в пользу новой концепции, состоящей в том, что именно световое излучение высокой интенсивности способствовало появлению пожаров в районе эпицентра. Полученные в работе расчетные данные и подвергается экспериментальной проверке.

## 2. Физическая модель

Прежде всего, представим схему, поясняющую вход КТ в атмосферу Земли относительно выбранной системы координат (рис. 1). Высота входа КТ в атмосферу отсчитывается от значения  $h = 160$  км, при котором температура КТ начинает возрастать [2].

Этот слой атмосферы обозначен на рис. 1 величиной  $h$  (этим же параметром обозначается текущая высота КТ относительно поверхности Земли). Угол входа в атмосферу ( $\beta$ ) в данной точке поверхности Земли является важным параметром, поскольку его значением определяется характер траектории. В диапазоне значений  $8^\circ \leq \beta \leq 12^\circ$  возможно сквозное прохождение атмосферы, а значения  $\beta > 12^\circ$  соответствуют траектории падения.

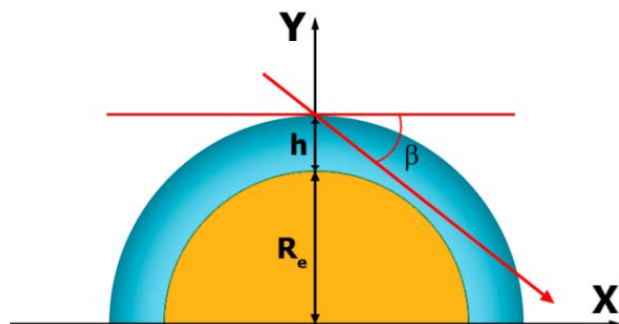


Рис. 1. Схема движения космического тела в атмосфере Земли и угол входа в атмосферу ( $\beta$ ) в данной точке относительно плоскости горизонта в системе координат ХУ (траектория КТ обозначена стрелкой).

## 2.1. Уравнение движения космического тела с переменной массой в атмосфере

Одним из важнейших параметров задачи является время пролета ( $t_0$ ) болида над эпицентром явления. Для его расчета и, соответственно, определения световой энергии от головы болида, накопленной единичной контрольной площадкой (КП) на поверхности Земли за время  $t_0$ , необходимо рассчитать траекторию КТ. Баллистика КТ определяется системой уравнений, включающих в себя уравнение движения под действием приложенных сил – силы аэродинамического сопротивления  $F_f$  и силы тяжести  $F_g$  [1]:

$$M \frac{dV}{dt} = \frac{-1}{2} c_d \rho_a(h) V^2 S \cdot \frac{V}{V} + Mg, g = \frac{-GM_e}{r^3} \cdot r, V = \frac{dr}{dt}. \quad (1)$$

Здесь  $M$  – масса КТ,  $V$  – скорость КТ,  $V$  – модуль скорости,  $g$  – ускорение свободного падения,  $c_d$  – коэффициент сопротивления,  $\rho_a(h)$  – плотность атмосферы на высоте  $h$  [5],  $S$  – площадь миделева сечения тела,  $G$  – гравитационная постоянная,  $M_e$  – масса Земли,  $r$  – радиус-вектор КТ,  $r$  – модуль радиус-вектора (расстояние до центра Земли с радиусом  $R_e$ ).

Отметим, что в уравнении (1) пренебрегается вкладом в баллистику КТ подъемной силы, возникающей в случае тел сильно несферической (плоской) формы (принимая, что форма КТ близка к сферической), а также реактивной силы, возникающей из-за несимметричного сублимационного потока.

В соответствии с имеющимися представлениями [1], основной вклад в силу аэродинамического сопротивления вносит разность давлений между фронтальной и тыловой частью поверхности КТ (в условиях образования вакуумной полости вблизи тыловой поверхности). Выражение для силы сопротивления имеет следующий вид [1]

$$F_f = \frac{-1}{2} c_d \rho_a(h) V^2 S \frac{V}{V}, \quad (2)$$

где  $c_d$  – коэффициент аэродинамического сопротивления, площадь миделева сечения тела  $S$ , зависящая от его текущей массы и размера, описывается выражением

$$S(t, M) = S_0 \left( \frac{M(t)}{M_0} \right)^{\frac{2}{3}}. \quad (3)$$

В этом выражении начальные значения площади сечения и массы КТ обозначены как  $S_0$  и  $M_0$ . (показатель  $2/3$  соответствует частному случаю – форме КТ близкой к сферической) [2].

Реальный учет зависимости  $S(t, M)$  осуществляется при численном решении дифференциального уравнения (1) на каждом шаге итерации при изменении массы КТ.

Коэффициент аэродинамического сопротивления  $c_d$  может быть найден из известных экспериментальных данных [6]. Экспериментально измеренная величина  $c_d$

зависит от числа Рейнольдса  $Re = \frac{VR}{\nu}$ . Применительно к решаемой задаче здесь  $\nu$  – кинематическая вязкость воздуха.

При скорости  $V$  от 10 до 40 км/с, радиусе ( $R$ ) КТ порядка нескольких десятков метров и коэффициенте кинематической вязкости воздуха на высоте полета от  $5 \cdot 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с и более, значение числа Рейнольдса превышает  $10^{10}$  [2]. В соответствии с [9], если число Рейнольдса превышает  $1.5 \cdot 10^5$ , наблюдается значительное падение  $c_d$  до 0.1, которое не превосходит это значение при дальнейшем увеличении  $Re$ . В расчетах использовалось максимальное значение  $c_d = 0.1$ , которое соответствует наиболее экстремальным условиям движения КТ в атмосфере. Отметим использование в литературе значения  $c_d = 1$  со ссылкой на работу [7], в которой выполнены теоретические расчеты сверхзвукового движения в газовой среде сферического тела, однако полученные результаты не согласуются с экспериментальными данными [6].

Уравнение (4) описывает потерю массы КТ при движении в атмосфере с учетом изменения ее плотности по высоте

$$\frac{dM}{dt} = \frac{-c_h \rho_{a(h)} V^3 S}{2H}, \quad (4)$$

где  $H$  – суммарная теплота сублимации материала КТ, которая в рамках упрощений нашей модели не зависит от  $h$ ,  $c_h$  – коэффициент лучистого теплообмена [2]. В соответствии с существующими представлениями, основной вклад в процесс потери массы КТ вследствие его нагрева существенно выше температуры плавления вносит лучистый теплообмен между КТ и пограничным слоем ударной волны [1], температура которого у поверхности КТ может превышать десять тысяч градусов [2]. При высоких скоростях (десятки километров в секунду) и температурах основным механизмом потери массы является сублимация материала КТ.

Одним из сложных вопросов в расчетах лучистого теплообмена является определение значения коэффициента лучистого теплообмена. На его величину влияет скорость движения в атмосфере, высота полета, плотность воздуха, температура пограничного слоя и характер процессов в нем (диссоциация и ионизация молекул воздуха), степень черноты излучающей и поглощающей поверхностей и т.д. В зависимости от высоты и скорости полета, значения этого параметра лежат в диапазоне  $0.01 \leq c_h \leq 0.1$  [1,3]. Максимальное значение достигается на высоте около 10 км с дальнейшим резким снижением этого параметра на один два порядка на меньших высотах от 6 до 3 км [3]. В диапазоне высот от 10 до 70 км значение  $c_h$  почти не изменяется и лежит в пределах 0.11–0.08. На больших высотах до 160 км  $c_h$  снижается до 0.01. С учетом того, что ско-

рость потери массы достигает максимума именно на малых высотах в плотных слоях атмосферы при  $c_h = 0.1$ , в расчетах будет использоваться именно это экстремальное значение. Степень черноты для излучающей и поглощающей поверхности в расчетах принималась равной единице из-за высокой температуры поверхностей и образования плотной высокотемпературной плазмы [2].

Отметим, что в разработанной модели не анализируется процесс фрагментации КТ [9-11], поскольку его начальные размеры принимаются значительными (от 50 до 200 метров), при которых основная часть тела сохраняется, несмотря на экстремальные внешние воздействия. В первую очередь это касается железных КТ, что связано с высокой однородностью их внутренней структуры. Решение дифференциального уравнения (1) с учетом уравнения (4) выполнялось методом Эйлера, а также явным методом Рунге-Кутты 4-го порядка.

## 2.2. Лучистый теплообмен между болидом и контрольной площадкой

Порождаемый космическим телом с диаметром до 200 м и скоростью 20-30 км/с болид нагревается в верхней тропосфере до температуры 10000К и выше. Это делает его мощным источником оптического излучения с планковским спектром, соответствующим абсолютно черному телу. Полная мощность, излучаемая поверхностью такого КТ, описывается выражением

$$W_0 = \varepsilon \sigma T_s^4 \cdot 4\pi R_i^2, \quad (5)$$

где  $W_0$  – интенсивность светового потока,  $\varepsilon$  – степень черноты поверхности,  $\sigma$  – постоянная Стефана-Больцмана,  $T_s$  – абсолютная температура КТ,  $R_i(t) = k \cdot R(t) = k \cdot \sqrt[3]{3M(t) / 4\pi\rho_m}$  – радиус излучающей поверхности КТ, изменяющийся на длине траектории вследствие потери массы, здесь множитель  $k$  приобретает в расчетах значение 1, 2 и 3 для имитации увеличения площади излучающей поверхности при образовании плазменного облака вокруг КТ с начальным радиусом  $R$ ;  $\rho_m$  – плотность материала КТ. Принимаем, что излучающая поверхность характеризуется значением  $\varepsilon=1$ .

Мощность излучения, падающего на контрольную площадку (КП) на поверхности Земли, оценивается выражением:

$$W = \frac{W_0}{4\pi l^2} \cdot S_a \cos\theta. \quad (6)$$

Здесь  $\theta$  – угол между прямой, соединяющей центры КП и КТ, и перпендикуляром к КП (рис. 2),  $l$  – расстояние от центра КТ до центра КП, – площадь КП. Принимаем коэффициент поглощения КП равным 1.

Положение КП выбиралось таким, чтобы высота траектории КТ над поверхностью Земли в районе эпицентра была минимальной.

## 2.3. Теплопроводность в объеме материала контрольной площадки

При падении излучения болида на контрольную площадку, представляющую в реальных условиях поверхность древесины или сухих листьев, нагревается ее внешняя поверхность, при этом часть энергии отводится в глубину образца за счет теплопроводности. Это способствует снижению температуры на внешней поверхности КП, из-за потерь во внутренних слоях древесины. Такие процессы требуют дополнительной поглощаемой энергии, при которой достигается критическое значение температуры воспламенения на поверхности КП – 430-600 С (в зависимости от влажности материала). Именно в этом диапазоне температур происходит воспламенение древесины (рис. 2)

[12], хотя имеются данные с меньшими значениями температур воспламенения (250-300 С).

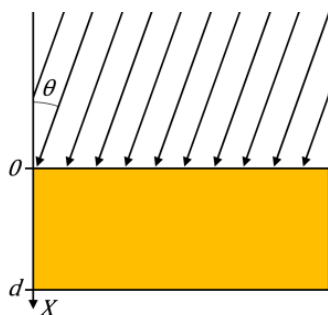


Рис. 2. Схема нагрева фрагмента образца из дерева падающим световым излучением.

Для определения температуры на внешней поверхности образца с учетом отвода тепла в его внутренние слои необходимо решить уравнение теплопроводности

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \quad \text{или} \quad \frac{\partial T}{\partial t} - \chi \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0. \quad (7)$$

Здесь  $\rho$  – плотность материала КП,  $c_p$  – изобарная удельная теплоёмкость,  $T(x,t)$  – температура в градусах Цельсия,  $\kappa$  – коэффициент теплопроводности,  $x$  – координата, вдоль которой распространяется тепло,  $\chi = \frac{\kappa}{\rho c_p}$  – температуропроводность.

Определим начальные и граничные условия задачи:

$$T(t=0, x) = 30^\circ\text{C}, \quad \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=0} = \frac{-q(t)}{\kappa}, \quad \left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{x=d} = 0, \quad (8)$$

$q(t) = W(t) / S_a$  – поток тепла на верхней границе контрольной площадки,  $d$  – толщина КП (см. рис. 2). Первое условие в (8) соответствует случаю метеоусловий 30 июня 1908 года в районе Подкаменной Тунгуски – ясный солнечный день с предшествовавшим длительным периодом ясной погоды.

В работе решение уравнения теплопроводности производилось явным методом конечных разностей:

$$T_i^j = T(x_i, t_j) \quad (1 \leq i \leq n, j \geq 1),$$

$$T_i^{j+1} = T_i^j + \chi \frac{T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j}{\Delta x^2} \cdot \Delta t \quad (1 < i < n)$$

$$T_n^j = T_{n-1}^j, \quad T_1^j = T_2^j - \frac{q(t)}{\kappa} \Delta x.$$

### 3. Результаты и их обсуждение

Прежде всего, определим время воздействия излучением болида на контрольную площадку при пролете на минимальной высоте над поверхностью Земли (10-15 км). В угол входа в атмосферу подбирался таким образом, чтобы минимальная высота траектории КТ лежала в диапазоне от 10 до 10,1 км. Эти значения лежат в диапазоне, соответствующем оценкам высоты вспышки Тунгусского болида. Рис. 3 позволяет получить оценку времени пролета КТ над эпицентром на минимальной высоте и времени максимального воздействия излучением ( $t_0$ ) на КП. На этом рисунке изображена зависимость угла падения излучения на КП (см. обозначения на рис. 2) от времени пролета вдоль

всей траектории  $\theta(t)$ . Как видно из рисунка, время пролета в области максимального сближения с Землей и углах падения от  $45^\circ$  до  $-45^\circ$  ( $t_0$ ) составляет около 1 секунды (момент пролета над эпицентром соответствует значению  $\theta=0^\circ$ ). Именно в течение времени  $t_0$  воздействие светового излучения на КП должно привести к воспламенению ее материала за время накопления световой энергии.

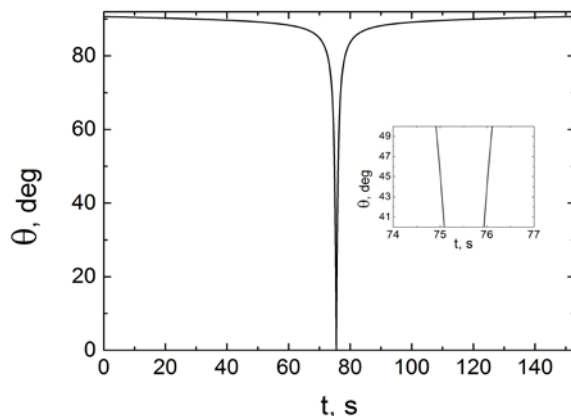


Рис. 3. Зависимость угла падения лучей на КП от времени пролёта. На врезке изображена область, соответствующая минимальной высоте пролёта.

В зависимости от радиуса излучающей поверхности (радиусы равны одному, двум и трем радиусам исходного КТ) за время воздействия на КП порядка 1 секунды, среднее значение интенсивности излучения, падающего на КП, при котором происходит воспламенение ее материала, начинает превышать значение  $50Q$  при абсолютной температуре излучающей поверхности приблизительно  $6000K$ ,  $8000K$  и  $10000K$ . Здесь  $Q$  – солнечная постоянная  $1400W/cm^2$ . Двух- и трехкратное увеличение радиуса излучающей поверхности имитирует в данном случае образование вокруг КТ плотной высокотемпературной плазменной оболочки.

На рис. 4 показана зависимость температуры КП ( $T_c$ ) от температуры излучающей поверхности КТ ( $T_s$ ) с начальным радиусом 100 м за время воздействия на КП на всей траектории пролета. Расчеты выполнены для трёх переменных значений радиуса излучающей поверхности –  $R(t)$ ,  $2R(t)$  и  $3R(t)$ , а также для двух значений толщины поглощающего слоя контрольной площадки.

Из этого рисунка видно, что вне зависимости от радиуса излучающей поверхности КТ и толщины КП достигается температура воспламенения древесины – от  $250^\circ C$  до  $430-600^\circ C$ . Причём на площадке меньшей толщины (рис. 4б), имитирующей сухой лист дерева, температура воспламенения достигается при любых значениях радиуса излучающей поверхности.

Исследованный диапазон температур КТ на рис. 4 достигает  $12000K$ , что можно обосновать ссылкой на монографию [13], в которой показано, что заметная ионизация газа в ударной волне получается только при весьма большой ее амплитуде. Например, при числе Маха  $M=18$  и начальной температуре  $T_0 = 300K$ , что соответствует скорости ударной волны в аргоне  $D = 5,75 км/с$ , температура за скачком уплотнения достигает  $30000K$  [13].

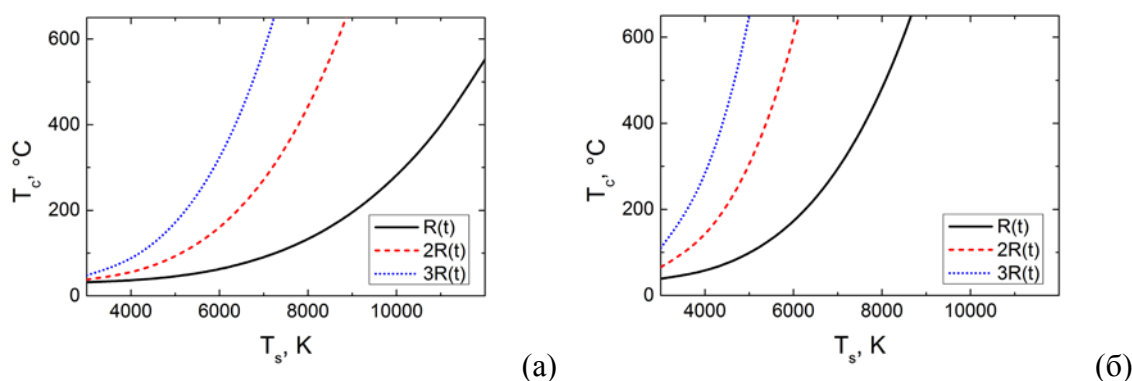


Рис. 4. Зависимость температуры КП от температуры излучающей поверхности КТ для различных радиусов плазменной оболочки вокруг КТ. Материал КТ – железо, начальный радиус КТ – 100 м, начальная скорость КТ – 20 км/с, толщина КП 0,5 мм (а) и 0,1 мм (б). Радиусы излучающей поверхности указаны на врезке. Минимальная высота траектории 10 км.

Для проверки расчетов температуры поверхности КП для заданной интенсивности падающего излучения и времени его воздействия выполнен простейший эксперимент с положительной линзой диаметром 100 мм и фокусным расстоянием 150 мм. В предфокальном положении на расстоянии 22 мм диаметр светового пучка от Солнца составляет 14 мм. В этих условиях на контрольной площадке достигается требуемая интенсивность 50Q. В соответствии с приведёнными на рис. 4 расчётами, среднее время воздействия на КП в этих условия составляет около 1 секунды. То есть, за время воздействия сфокусированным солнечным излучением на материал КП последний должен воспламениться. Эксперименты были выполнены для нескольких видов материалов: чёрная бумага, сухой лист растения, чёрная хлопчатобумажная ткань темная сухая поверхность дерева. Показано, что во всех трёх случаях за время облучения, порядка 1 с, наблюдается воспламенение образцов.

Таким образом, мы продемонстрировали, что наши расчёты времени воздействия световым излучением на легковоспламеняющиеся материалы и интенсивности этого излучения согласуются с экспериментальными данными. Это позволяет сформулировать заключительные выводы нашей работы в следующем виде:

### Заключение

1. Представлено описание физической модели, позволяющей оценивать воздействие оптического излучения от ярких атмосферных болидов различных размеров, скорости движения в атмосфере, температуры излучающей поверхности и минимальной высоты полёта на легковоспламеняющиеся материалы, находящиеся на поверхности Земли. Модель позволяет рассчитать температуру внешней поверхности таких материалов с учётом их теплопроводности и отвода тепла к внутренним слоям.
2. Оптимальная траектория КТ, позволяющая ему породить мощное оптическое излучение, которое способно вызвать воспламенение горючих материалов на поверхности Земли, при минимальной высоте траектории 10-15 км и сквозном прохождении КТ атмосферы Земли соответствует углу входа в атмосферу 8–12° при начальном радиусе КТ 100 м с формой близкой к сферической и температуре его излучающей поверхности 8000K и более [14]. При этом двух- и трехкратное увеличение толщины плазменной оболочки позволяет снизить требования на температуру излучающей поверхности до 5500 и 4600K, соответственно.

3. Основным результатом настоящей работы является утверждение о том, что источником масштабных пожаров в эпицентре Тунгусского космического явления являлось мощное световое излучение, порождаемое головой болида на минимальной высоте полёта (10-15 км).

#### Список литературы

1. Стулов В.П. Аэродинамика болидов / В.П. Стулов, В.Н. Мирский, А.И. Вислый – М.: Наука. Физматлит, 1995.
2. Бронштэн В.А. Физика метеорных явлений / В.А. Бронштэн – М.: Наука, 1981.
3. Андрущенко В.А. Моделирование падения Челябинского метеорита / В.А. Андрущенко, Н.Г. Сызранова, Ю.Д. Шевелев – Компьютерные исследования и моделирование. Т.5, № 6, 2013, С. 927-940.
4. Nemchinov I.L. Penetration of large meteoroids into the atmosphere: theory and observations / I. L. Nemchinov, O. P. Popova, O. V. Teterev – Journal of Engineering Physics and Thermophysics. V. 72, 2013, P. 1194-1223
5. U.S. Standard Atmosphere, Washington: U.S. Government Printing Office. 1976.
6. Кутателадзе С.С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление/ С.С. Кутателадзе – М.: Энергоатомиздат, 1990.
7. Lunev V. V. Hypersonic streamline flow past a sphere in equilibrium with dissociable air / V. V. Lunev, V. G. Pavlov and S.G. Sinchenko – J. Comp. Math. and Phys. 1966. V.6(1) P.121-129
8. Стулов В.П. Сравнительный анализ моделей дробления метеорных тел / В.П. Стулов, Л.Ю. Титова – Астрономический вестник. 2001. Т.35. № 4. С. 345-349.
9. Дудоров А. Е. Движение и разрушение челябинского метеороида в атмосфере / А. Е. Дудоров, А.Е. Майер – Вестник Челябинского госуниверситета. 2014. №1, С. 47-57.
10. Григорян С. С. О движении и разрушении метеоритов в атмосфере планет / С. С. Григорян – Космич. исслед. 1979. Т. 17, №6. С. 875–873.
11. Теплоэнергетика и теплотехника: Справочная серия: В 4 кн. / под общ. ред. А.В. Клименко и В.М. Зорина. М.: Издательский дом МЭИ, 2007. Кн. 1. Теплоэнергетика и теплотехника. Общие вопросы: справочник. 528 с.
12. Зельдович Я.Б. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений (2-е издание) / Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер – М.: Наука, 1966.
13. Хренников Д.Е. Об условиях сквозного прохождения астероидных тел через атмосферу Земли без столкновения с ее поверхностью. / Д.Е. Хренников, А.К. Титов, А.Е. Ершов, С.В. Карпов – Сборник трудов. XIX Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем (МНС-2016)». Красноярск. 7-9 октября 2016. С. 123-130.

# КИНЕТИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ДЛЯ СВЕРХТЕКУЧЕГО ГЕЛИЯ

В.Н. Удодов, А.А. Попов

Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова, Институт естественных наук и математики, кафедра физики и информационных технологий, Россия, Хакасия, г. Абакан, пр. Ленина, д. 90, 655017 [udodov@khsu.ru](mailto:udodov@khsu.ru)

Предложены интерполяционные формулы для кинетических индексов для смеси изотопов сверхтекучего гелия на случай возможного приближения критической температуры к нулю. Классические результаты получаются из этих формул как предельный частный случай при асимптотической близости к положительной критической температуре. Показано, что динамический индекс  $y$  для смеси изотопов гелия  $^3\text{He}$  и  $^4\text{He}$  при температуре, стремящейся к нулю  $T_c \rightarrow 0$ , может быть в несколько раз больше обычного значения. Получены также новые формулы для динамического индекса  $z$ . Результаты могут быть проверены экспериментально (или путем численных расчетов) для смеси сверхтекучих изотопов гелия.

## 1. Введение

Гипотеза подобия (скейлинга) лежит в основе современной теории критических явлений и фазовых переходов (ФП) [1-16]. Оказывается, можно получить некоторые соотношения между динамическими и статическими (термодинамическими) критическими индексами путем распространения на кинетические явления гипотезы статического скейлинга [4]. В классических работах считалось, что критическая температура положительна. Однако, в последние десятилетия значительное внимание привлекали так называемые квантовые ФП [5, 6, 8], для которых температура ФП  $T_c = 0$ . В данной работе получены новые следствия гипотезы динамического подобия при равенстве нулю температуры ФП или при критической температуре, стремящейся к нулю, для многокомпонентного параметра порядка для смеси изотопов сверхтекучего гелия.

## 2. Индекс $z$ для многокомпонентного параметра порядка

Дадим сначала определения динамических (кинетических) критических индексов  $y$  и  $z$  [4] для времени релаксации параметра порядка  $\tau$

$$\tau \propto (-\varepsilon)^{-y}, \quad \varepsilon \rightarrow -0, \quad k = 0, \quad y > 0, \quad (1)$$

где  $k = 2\pi/\lambda$  – волновое число,  $\lambda$  – длина волны,

$$\varepsilon = T - T_c, \quad (2)$$

$$\tau \propto k^{-z}, \quad \varepsilon = 0, \quad z > 0. \quad (3)$$

Рассмотрим системы, в которых параметр порядка имеет несколько компонент  $\eta_i$ , но эффективный гамильтониан зависит (в однородной системе) только от суммы их квадратов [4]. Другими словами, если рассматривать параметр порядка  $\eta_i$  как вектор, то эффективный гамильтониан не зависит от его направления [4]. Примером является чисто обменный изотропный гейзенберговский ферромагнетик, энергия которого не зависит от направления вектора намагниченности (в нулевом магнитном поле), который является трехкомпонентным параметром порядка [4]. Другой пример – сверхтекучий гелий-4, у которого роль параметра порядка  $\eta$  играет волновая функция конденсата ( $\Phi$  – фаза конденсата Эйнштейна атомов  $^4\text{He}$ ) [4, 16]

$$\eta = (n_0)^{1/2} e^{i\Phi}, \quad (4)$$

где  $n_0$  – плотность конденсата Эйнштейна атомов гелия. Эта комплексная функция представляет собой совокупность двух независимых величин (вещественная и мнимая части), но энергия однородной жидкости зависит только от квадрата модуля (двухкомпонентный параметр порядка) [4]

Рассмотрим сверхтекучий гелий-4 [4], когда мягкой модой является второй звук. Вблизи точки перехода он представляет собой совместные колебания сверхтекучей скорости и энтропии. Колебания этой скорости означают колебания фазы конденсатной волновой функции [4]. Закон дисперсии этих колебаний в сверхтекучей фазе имеет вид [4]

$$\omega = u_2 k, \quad (5)$$

$$u_2 = \left( \frac{TS^2 \rho_s}{C_p \rho_n} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

$u_2$  – скорость второго звука,  $S$  – энтропия,  $C_p$  – теплоемкость единицы объема жидкости,  $\rho_s$  ( $\rho_n$ ) – плотность сверхтекучей (нормальной) компоненты. При приближении к точке перехода  $T \rightarrow T_c$  плотность  $\rho_s$  стремится к нулю по закону [4, 9]

$$\rho_s \propto (T_\lambda - T)^{\frac{2-\alpha}{3}} = (-\varepsilon)^{\frac{2-\alpha}{3}}, \quad (7)$$

где  $\alpha$  – критический индекс теплоемкости [1-4]:

$$C_p \propto |\varepsilon|^{-\alpha}.$$

(7) верно для трехмерного пространства, при произвольной размерности  $d$  найдем

$$\rho_s \propto (-\varepsilon)^{\frac{(2-\alpha)(d-2)}{d}} \quad (T_c > 0). \quad (8)$$

Закон стремления к нулю скорости  $u_2$  зависит от знака индекса  $\alpha$ .

Если  $\alpha \leq 0$ , то теплоемкость стремится к конечному пределу [4], тогда из формулы (6) найдем [4]

$$u_2 \propto |\varepsilon|^{\frac{((2-\alpha)(d-2))/(2d)}{2}} \propto \omega, \quad \alpha \leq 0, \quad T_c = T_\lambda > 0. \quad (9)$$

Рассмотрим случай  $\alpha < 0$ , что соответствует многим системам при низких температурах, в частности, жидкому гелию-4, для которого [4, 9, 16]

$$\alpha \approx -(0.025 \pm 0.005) < 0. \quad (10)$$

Согласно более новым данным [10]  $\alpha \approx -0.012 < 0$ .

Применим теперь гипотезу динамической масштабной инвариантности, согласно которой вблизи точки ФП закон дисперсии должен иметь форму [4]

$$\omega = k^z f(k\xi).$$

Далее аналогично [4] можно показать (в [4]  $d = 3$ ), что для сверхтекучей фазы верна формула

$$\nu(z-1) = ((2-\alpha)(d-2))/(2d), \quad T_c > 0 \quad (\alpha \leq 0). \quad (11)$$

Известна формула, следующая из гипотезы статического скейлинга [1-3, 12]

$$2-\alpha = d\nu, \quad (T_c > 0), \quad (12)$$

где  $d$  – размерность пространства. Из последних двух формул получим [4] (в [4]  $d = 3$ )

$$z = \frac{d}{2} \quad (\alpha \leq 0, \quad T_c > 0). \quad (13)$$

Известно, что в смеси сверхтекучих  $^3\text{He}$  и  $^4\text{He}$  критическая температура может стремиться к нулю [9]. В этом случае найдем [12, 16]

$$\nu d = 1 + S_I - \alpha = r , \quad (14)$$

где  $S_I$  – функция имеет форму [12, 16]

$$S_I = ((T_C)/T)^n , \quad n = \text{const} > 0 . \quad (15)$$

Здесь  $n$  – положительная константа, которая может быть найдена из сопоставления с экспериментом или из микроскопической теории, или путем компьютерного моделирования. Можно предполагать, что  $n$  зависит от размерности пространства. Величина  $r$  в формуле (14) – род ФП в смысле Бэкстера [2, 12]. Формулы (14) и (15) являются интерполяционными [12] и они косвенно подтверждаются расчетами в [13]. Формулы (14) и (15) дают правильные результаты в двух предельных случаях:

1.  $T_C > 0, T \rightarrow T_C$ , тогда получим классическую формулу (12).
2.  $T_C = 0, T > 0$ , тогда получим другую формулу [12]

$$\nu d = 1 - \alpha = r, \quad T_C = 0, T > 0 . \quad (16)$$

Можно предполагать, что (14) и (15) дают качественно верные результаты и при промежуточных температурах, в частности, при  $T_C \rightarrow 0$ , когда критическая температура является переменной.

Случай  $T_C \rightarrow 0$ , что возможно для многих квантовых ФП, требует отдельного рассмотрения. Здесь необходимо учесть третье начало термодинамики [1-4]. В сверхтекучем гелии при низких температурах основную роль играют фононы. Это приводит к следующим зависимостям от температуры [3] для энтропии и теплоемкости

$$S \propto T^d ,$$

$$C_p \propto T^d \propto \varepsilon^{-\alpha} = T^{-\alpha} , \quad T \rightarrow 0 , ,$$

откуда следует, что в этом случае критический индекс теплоемкости для равновесных (или почти равновесных) состояний стремится

$$\alpha \rightarrow (-d) , \quad T \rightarrow T_C = 0 . \quad (17)$$

Здесь учтено, что при  $T_C = 0$

$$\varepsilon = T - T_C = T > 0 . \quad (18)$$

Тогда найдем для скорости второго звука

$$u_2 \propto \left( \frac{T T^{2d} T^{((1-\alpha)(d-2))/d}}{T^d} \right)^{1/2} \propto T^{\frac{d^2-1}{d}} , \quad T_C = 0, \alpha < 0 . \quad (19)$$

Для  $d = 3$  получим

$$u_2 \propto T^{\frac{8}{3}} , \quad T_C = 0, T \rightarrow 0, \alpha \rightarrow (-3) < 0 . \quad (20)$$

Общая формула имеет вид

$$u_2 \propto x^A , \quad A = ((1+d)/2)(1-S_I) + \nu(d-2)/2, \quad x = |\varepsilon|, \quad T \rightarrow T_C \geq 0, \alpha \leq 0 , \quad (21)$$

где критический индекс корреляционной длины  $\nu$  определяется из (14). Для чистого гелия  $^4\text{He}$  сверхтекучая фаза является низкотемпературной, следовательно

$$x = |\varepsilon| = T_C - T, \quad T \rightarrow T_C > 0,$$

если же  $T_C \rightarrow 0$ , то сверхтекучая фаза в смеси двух изотопов гелия является высокотемпературной [15], тогда верна формула (18). Используя (21), придем к новому результату для сверхтекучей фазы (в реальной фазе  $d = 3$ )

$$\nu(z-1) = A = \frac{(1+d)(1-S_I)}{2} + \frac{(1+S_I-\alpha)(d-2)}{2d} , \quad T_C \geq 0, \alpha \leq 0, \quad (22)$$

который верен при любом значении критической температуры и описывает переход  $T_\lambda = T_c \rightarrow 0$ . Новизна ситуации заключается в том, что критический индекс  $z$  зависит от температуры и  $T_c$  (от которых зависит  $S_I$ -функция (15)), причем критическая температура является в данном случае новой независимой переменной. Если  $T_c > 0$ ,  $T \rightarrow T_c$ , то  $S_I$ -функция (15) стремится к единице и из (22) получим классический результат (11) [4].

Если критическая температура  $T_\lambda = 0$ ,  $T > 0$ , что возможно для смеси жидких  $^3\text{He}$  и  $^4\text{He}$  (и во многих других случаях), то  $S_I$ -функция (15) равна нулю и формула (22) примет вид (для сверхтекучей фазы)

$$\nu(z-1) = (d^2-1)/(2d), \quad T_c = T_\lambda = 0, \quad (T > 0, T \rightarrow T_c, \alpha = -d < 0). \quad (23)$$

Обратим внимание, на то, что в этом случае индекс  $z$  не зависит от температуры, как считается обычно.

Теперь найдем общее выражение для индекса  $z$

$$z = \frac{d}{2} + [(1+d)(1-S_I)]/(2\nu), \quad T_c \geq 0, \quad T \rightarrow T_c, \quad \alpha \leq 0. \quad (24)$$

Если  $T_c > 0$ ,  $T \rightarrow T_c$ , то  $S_I$ -функция (15) стремится к единице и получим классический результат (13); если же  $T_c = 0$ , то  $S_I$ -функция равна нулю и получим новый результат

$$z = \frac{d}{2} + (1+d)/(2\nu), \quad T_c = 0, \quad T \rightarrow T_c + 0, \quad \alpha \rightarrow (-d). \quad (25)$$

Используя (16) и (25), найдем

$$\nu = (1+d)/d, \quad z = d, \quad T \rightarrow T_c = 0, \quad (26)$$

что для трехмерного пространства дает

$$z = 3, \quad T \rightarrow T_c = 0, \quad \alpha = -3 = -d < 0. \quad (27)$$

Это значение индекса  $z$  в два раза больше обычного результата (13) [4]. Если критическая температура переменная и  $T \rightarrow T_c \rightarrow 0$ , то динамический индекс  $z$  должен непрерывно изменяться от  $3/2$  до  $3$  ( $T > T_c$ ). Это возможно для смеси изотопов сверхтекучего гелия [9]. Эти результаты верны, если состояния близки к равновесным.

### 3. Динамический индекс $y$

Можно показать, что в рамках гипотезы подобия верна формула [4]

$$y = \nu z = \nu' z. \quad (28)$$

Дальнейшие результаты зависят от знака индекса теплоемкости  $\alpha$ . Если  $\alpha \leq 0$  (ограничимся этим случаем), то получим для многокомпонентного параметра порядка при условии справедливости гипотезы статического скейлинга для произвольной размерности пространства (в [4]  $d = 3$ )

$$y = \frac{(1+d)(1-S_I)}{2} + \frac{d\nu}{2} \quad (T_c \geq 0, \alpha \leq 0). \quad (29)$$

Если  $T_c > 0$ ,  $T \rightarrow T_c$ , то  $S_I$ -функция (15) стремится к единице и получим классический результат [4] для произвольной размерности пространства [4]

$$y = \frac{d\nu}{2} = 1 - \frac{\alpha}{2} \quad (T_c > 0, \alpha \leq 0). \quad (30)$$

Формулы для произвольной размерности пространства имеют методический интерес, так как, например, возможен фазовый переход в двумерной бозе-жидкости конечного размера [14].

В случае  $T \rightarrow T_c = 0$  найдем

$$y = 1 + d \quad (T_c = 0, T \rightarrow T_c + 0, \alpha = -d) . \quad (31)$$

Для трехмерного пространства получим

$$y = 4, \quad (T_c = 0, T \rightarrow T_c + 0, d = 3) , \quad (32)$$

что в четыре раза больше классического результата [4]. Это значит, что для смеси изотопов сверхтекучего гелия зависимость времени релаксации параметра порядка от температуры при  $T_c \rightarrow 0$  становится существенно более сильной, чем при  $T_c > 0$  для обычного изотопа  $^4\text{He}$  (см. определение (1) [4]). Результат (32) не достигим экспериментально, так как верен для равновесных состояний, а время релаксации при приближении к абсолютному нулю стремится к бесконечности (см. ниже). Однако можно утверждать, что при понижении температуры кинетический индекс  $y$  становится существенно больше обычного значения  $y = 1$ .

Остановимся на условиях применимости ключевой формулы (6) [4]. Из [15] следует, что эта формула верна только для достаточно низких частот

$$\omega\tau \ll 1 , \quad (33)$$

где  $\tau$  – время релаксации параметра порядка. Ограничимся случаем  $\alpha \leq 0$ , что соответствует сверхтекучему гелию. Используя (1) (и вводя обозначение  $|\varepsilon| = x$ ), найдем

$$\omega\tau \propto \frac{1}{\lambda} \left( x^{\frac{(2-\alpha)(d-2)}{2d}} \right) x^{-y} = \frac{1}{\lambda} \left( x^{\frac{(2-\alpha)(d-2)}{2d} - y} \right) \ll 1, \quad T_c > 0 . \quad (34)$$

Поскольку для обычного гелия-4  $\alpha \approx 0$  (см. (10)), то при  $T \rightarrow T_c > 0$ ,  $x \rightarrow 0$ , как можно показать, последнее неравенство может выполняться только для больших длин волн  $\lambda \rightarrow +\infty$ ,  $k \rightarrow 0$ . Время релаксации при этом стремится к бесконечности (см. (1)-(3)).

Рассмотрим теперь случай  $T_c \rightarrow 0$ . Используя (5) и (19) получим ( $S_i \rightarrow 0$ )

$$\lambda \gg x^{(1+d)/(-d)}, \quad x = T \rightarrow T_c = 0 . \quad (35)$$

Таким образом, и в этом случае формула (6), на которой основаны многие результаты этой статьи, справедлива (при приближении к точке ФП) только при длинах волн, стремящихся к бесконечности.

#### 4. Заключение

Предложена новая интерполяционная формула для индекса  $z$ , справедливая для фазовых переходов (ФП) с многокомпонентным параметром порядка  $\eta_i$  (когда свободная энергия зависит только от модуля  $|\eta_i|$ ) при изменении температуры, как при  $T_c > 0$ , так и при  $T_c = 0$ . Кроме того получены формулы для кинетического индекса  $y$ . Эти интерполяционные формулы описывают также случай  $T_c \rightarrow 0$  и могут быть проверены для смеси сверхтекучих изотопов гелия  $^3\text{He}$  и  $^4\text{He}$  при температурах, близких к абсолютному нулю. Следует ожидать, что динамические индексы  $y$  и  $z$  существенно увеличиваются по сравнению с классическими значениями при критической температуре, стремящейся к нулю, то есть, зависимость времени релаксации параметра порядка от температуры становится значительно сильнее, чем для обычного изотопа гелия-4.

Кроме того, полученные результаты, возможно, могут быть развиты для других квантовых ФП [6] при  $T_c \rightarrow 0$  (а также при  $T_c > 0$ ), например, для сверхпроводников или для ферромагнетика  $\text{Ce}_{2.15}\text{Pd}_{1.95}\text{In}_{0.9}$  [8], для гейзенберговских ферромагнетиков, а

также путем численных расчетов на моделях. Возможна экспериментальная проверка новых результатов по динамическим индексам  $y$  и  $z$ , значения которых существенно отличаются от классических значений при критической температуре, стремящейся к нулю. Обратим внимание на то, что в [16] приведены неверные значения индексов  $y$  и  $z$  при температуре, стремящейся к абсолютному нулю.

Выражаем благодарность Рецензенту журнала ЖЭТФ за существенные замечания, которые способствовали значительному улучшению статьи.

#### Список литературы

1. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления / Г.Стенли. — М. Мир, 1973. — 425 с.
2. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. М. Мир (1985). 488 с.
3. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1. 4-е изд. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М., Наука, 1995. — 608 с.
4. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 10. Физическая кинетика. / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М., Наука, 1979. — 528 с.
5. Rechester A.B. Contribution to the theory of second-order phase transitions at low temperatures / A.B.Rechester // Soviet physics JETP. — 1971. — Т.33. — № 2. С.782 – 796.
6. Sachdev S. Quantum phase transitions / S.Sachdev. — Yale University, New Haven, USA, 1999. —
7. Абрикосов А.А. Основы теории металлов / А.А.Абрикосов. — М., ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 598 с.
8. Sereni J.G. Searching for a Quantum Critical Point in Rh doped ferromagnetic  $Ce_{2.15}Pd_{1.95}In_{0.9}$  / J.G.Sereni, M.Giovannini, M.Gormez Berisso, A.Saccone // Journal of Physics: Conference Series. — 2012. — Т.391. — С.012062.
9. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. — М., Наука, 1982. — 382 с.
10. Погорелов А.А. О критических индексах для  $\lambda$ -перехода в жидком гелии / А.А.Погорелов, И.М.Суслов // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — Т.86. — Вып.1. — С. 41-47.
11. Удодов В.Н. Динамическая масштабная инвариантность при низких температурах. / В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных систем // материалы 18 Всерос. семинара. Ред.М.Г.Садовского. — Красноярск: ИВМ СО РАН, ИПК СФУ. — 2015. — С. 112-118.
12. Удодов В.Н. Новые следствия гипотезы статического подобия при низких температурах / В.Н.Удодов // Физика твердого тела. — 2015. — Т. 57. — Вып.10. — С. 2018-2022.
13. Муртазаев А.К. Критические свойства фрустрированных спиновых систем на слоистой треугольной решетке / А.К.Муртазаев // УФН. — 2008. — Т. 178. — №9. — С. 1001-1006.
14. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 9. Статистическая физика. Ч. 2 / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М., Наука, 1978. — 448 с.
15. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М., Наука, 1988. — 736 с.
16. Удодов В.Н. Новые следствия гипотезы динамического скейлинга при низких температурах для многокомпонентного параметра порядка/ В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных систем // материалы 19 Всерос. семинара. Ред.М.Г.Садовского. — Красноярск: ИВМ СО РАН, ИПК СФУ. — 2016. — С. 112-118.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТАКТНОЙ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ЭКСТРАКЦИИ РАНЕВОГО СОДЕРЖИМОГО И СОЗДАНИЕ СРЕДСТВ ДЛЯ ЕГО РЕАЛИЗАЦИИ

Хмелёв В.Н.<sup>1</sup>, Голых Р.Н.<sup>1</sup>, Педдер В.В.<sup>2</sup>, Нестеров В.А.<sup>1</sup>, Боброва Г.А.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Бийский технологический институт, г. Бийск, [romangl90@gmail.com](mailto:romangl90@gmail.com)

<sup>2</sup>ООО «НПП «Метромед», г.Омск, [metromed@mail.ru](mailto:metromed@mail.ru)

В 35-45 % случаев у пациентов хирургических стационаров и больных онкологического профиля проявляется раневая инфекция, что в последующем приводит к послеоперационным раневым осложнениям, которые сопровождаются синдромом эндотоксической интоксикации (СЭИ) [1]. При СЭИ происходит накопление эндотоксинов (ЭТ), приводящих в конечном итоге к гибели клеток организма. Одним из перспективных подходов к местному удалению раневого содержимого, включающего ЭТ, является возможность использования энергии ультразвука (УЗ).

Экстракция раневого содержимого под действием УЗ колебаний осуществляется за счёт возникновения «обратного» ультразвукового капиллярного эффекта (ОУЗКЭ) [2]. Действие ОУЗКЭ вызывает массоперенос содержимого пор и капилляров биоткани на поверхность раны. Существующие в настоящее время исследования ОУЗКЭ, наблюдаемого при размерах капилляров менее  $10^{-5}$  м, характерных для биотканей, не позволяют объяснить механизм [2] и установить взаимосвязь скорости экстракции патологического содержимого с режимами и условиями УЗ воздействия для дальнейшей разработки средств практической реализации данного процесса.

Для выявления оптимальных режимов и условий УЗ воздействия необходимо провести теоретический анализ процесса УЗ экстракции раневого содержимого. Далее представлена разработанная физико-математическая модель массообменного процесса в биоткани.

## Модель массообменного процесса в биоткани

Представленная физико-математическая модель массообменного процесса в капиллярно-пористой системе «жидкость-твёрдое тело», позволит учесть эффекты и явления, приводящие к экстракции, и позволит выявить оптимальные режимы и условия экстракции по амплитуде УЗ колебаний, площади одновременно озвучиваемой раневой поверхности и количеству дренажных каналов волновода инструмента.

Теоретически рассматриваемый массообменный процесс в биоткани – капиллярно-пористой системе «жидкость-твёрдое тело» – может быть схематично представлен следующим образом (рис. 1).

Согласно представленной схеме, первоначально происходит массоперенос раневого содержимого из сети капилляров 1 в промежуток между излучателем 3 волновода-инструмента 4 и биотканью 2, образуя слой жидкой среды (инфектанта) 5. Затем раневое содержимое переносится в дренажные каналы 6 излучателя 3 волновода-инструмента 4, откуда поступает в технологическую полость УЗ экстрактора, осуществляющего дренирование очага инфекции. Наличие промежуточного слоя жидкой среды 5 между поверхностью раны и излучателем 3 волновода-инструмента 4 обусловлено явлениями смачивания, а также неплотным прилеганием излучателя 3 волновода-инструмента 4 к раневой поверхности, где на границе их раздела присутствует раневая экссудат.

Для определения оптимальных режимов и условий воздействия, обеспечивающих реализацию данного процесса с максимальной эффективностью, течение раневого содержимого описывается уравнениями Навье-Стокса (1–3) с граничными условиями (4–5) на поверхности биоткани:

$$\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0; \quad (1)$$

$$\rho \left( u \frac{\partial u}{\partial r} + v \frac{\partial u}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p}{\partial r} + \eta \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right); \quad (2)$$

$$\rho \left( u \frac{\partial v}{\partial r} + v \frac{\partial v}{\partial z} \right) = - \frac{\partial p}{\partial z} + \eta \left( \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right); \quad (3)$$

$$\rho \left( \left\langle u_1 \frac{\partial v_1}{\partial r} + v \frac{\partial v_1}{\partial z} \right\rangle + \frac{1}{4} \left\langle U_{us}^* \frac{\partial V_{us}}{\partial r} + U_{us} \frac{\partial V_{us}^*}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} (V_{us} V_{us}^*) \right\rangle \right) = \frac{F - F_B}{l S_c} + 2\eta \frac{\partial^2}{\partial z^2} \langle v_1 \rangle - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \langle p_1 \rangle; \quad (4)$$

$$u = \langle u_1 \rangle = \frac{G_{y\partial}}{\rho}; \quad (5)$$

где  $u$  и  $v$  – радиальная и осевая компонента скорости движения патологического содержимого в каналах излучателя волновода-инструмента соответственно, м/с;  $p$  – статическое давление в жидкости, м/с;  $\rho$  – плотность жидкости, кг/м<sup>3</sup>;  $\eta$  – вязкость жидкости, Па·с,  $u_1$  и  $v_1$  – радиальная и осевая скорость стационарного движения жидкости в отдельном капилляре биоткани соответственно, м/с;  $U_{us}$  и  $V_{us}$  – комплексная амплитуда радиальной и осевой колебательной скорости стенки капилляра соответственно, м/с;  $F$  – величина силы, действующей на жидкость в единичном капилляре, Н;  $F_B$  – сила Бьеркнеса, действующая на кавитационное облако в промежуточном слое и определяемая согласно работам [3-5], Н;  $S_c$  – площадь поперечного сечения капилляра, м<sup>2</sup>;  $l$  – длина капилляра, м;  $\langle \rangle$  – знак усреднения по площади поперечного сечения капилляра.

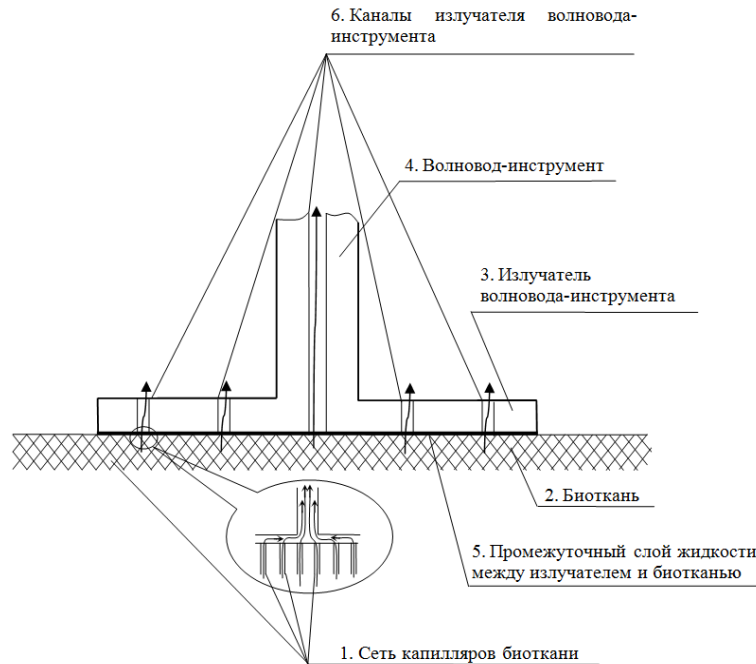


Рис.1. Схематичное изображение массообменного процесса в биоткани при контактном УЗ воздействии.

Решение данной системы уравнений позволяет рассчитать совокупную скорость экстракции в зависимости от режимов и условий воздействия на основании выражения (6):

$$G = N \frac{\pi d^2}{4} \langle V \rangle \rho; \quad (6)$$

где  $N$  – количество дренажных каналов в излучателе волновода-инструмента;  $d$  – диаметр отдельного канала, м;  $\langle V \rangle$  – усредненная скорость экстракции патологического содержимого по сечению отдельного дренажного канала, м/с;  $\rho$  – плотность раневого содержимого, кг/м<sup>3</sup>.

Далее представлено выражение для силы, действующей на жидкость в единичном капилляре, которое выглядит следующим образом:

$$F = \frac{\pi d^2 c^2 V_0^2}{2} \times \left[ \left( \frac{\partial h}{\partial \Pi} \left[ \frac{1}{\varepsilon_{10}^2} - \frac{\ln \varepsilon_{10}}{\varepsilon_{10}^2} \right] \frac{A_0}{A_1 + p_0} \right)^2 \times \left( 6\pi k q_e n_0^2 N_A h^2 z \rho_2 \right)^2 \times \right. \\ \left. \times \left( \frac{\rho_2 (\omega z_0)^2}{4R^2} + \frac{\sigma \cos \theta}{R^3} \right) + \frac{\sigma \cos \theta}{R} \left( \frac{4\nu}{\omega^2} \right)^2 \right] \quad ; \quad (7)$$

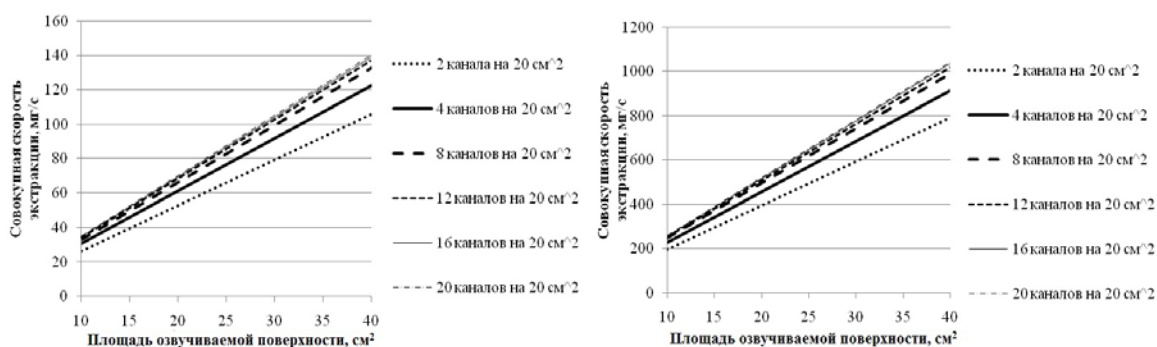
где  $z$  – валентность ионов в полимолекулярной плёнке;  $F$  – число Фарадея, равное 96485,33(85) Кл/моль;  $k$  – электростатическая постоянная, равная  $9 \cdot 10^9$  Дж·м/Кл<sup>2</sup>;  $q_e$  – заряд иона,  $1,6 \cdot 10^{19}$  Кл;  $\varepsilon_{10}$  – диэлектрическая проницаемость жидкости в капилляре;  $N_A$  – число Авогадро, равное  $6,02 \cdot 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>;  $n_0$  – концентрация ионов на границе между полимолекулярной плёнкой жидкости и внутренней полостью капилляра, моль/м<sup>3</sup>;  $h$  – толщина полимолекулярной плёнки, м;  $\Pi$  – расклинивающее давление в плёнке, Па;  $d$  – диаметр капилляра, м;  $c_2$  – скорость звука в раневом содержимом, м/с;  $V_0$  – амплитуда колебательной скорости раневого содержимого, м/с;  $\rho_2$  – плотность раневого содержимого, кг/м<sup>3</sup>;  $A_0$  (безразмерный) и  $A_1$  (Па) – постоянные коэффициенты, определяющие зависимость диэлектрической проницаемости жидкой фазы от давления;  $\sigma$  – поверхностное натяжение раневого содержимого, Н/м;  $\theta$  – угол смачивания между границей мениска и стенкой капилляра;  $\omega$  – круговая частота УЗ колебаний, с<sup>-1</sup>;  $z_0$  – длина капилляра, м;  $\nu$  – коэффициент Пуассона биоткани.

Подстановка данного выражения (7) в систему уравнений Навье-Стокса (1–5) позволяет определить совокупную скорость экстракции (расход) патологического содержимого, необходимую для выявления оптимальных режимов и условий УЗ воздействия.

#### **Результаты расчётов скорости экстракции раневого содержимого из биоткани**

Для выявления оптимальных режимов и условий УЗ воздействия были проведены расчёты совокупной скорости экстракции в зависимости от амплитуды УЗ колебаний, площади озвучиваемой раневой поверхности и количества дренажных каналов излучателя.

Далее представлены зависимости совокупной скорости экстракции от условий, режима воздействия и физических свойств экстрагируемого патологического содержимого (рис. 2-4) (диаметр пор модельной биоткани –  $10^{-7}$  м). Под условиями понимается площадь озвучиваемой поверхности биоткани и количество дренажных каналов в излучателе (рис. 2), а под режимом – амплитуда колебаний излучателя (рис. 3-4).



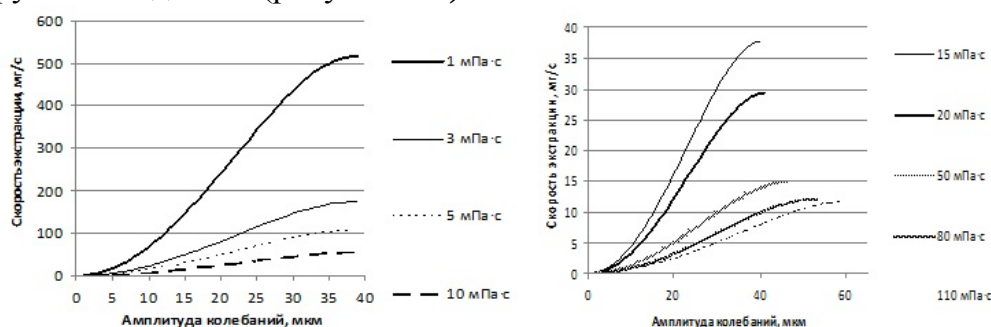
а) вязкость - 1 мПа·с, поверхностное натяжение - 72 Н/м; амплитуда колебаний - 10 мкм, частота  $f$  - 23,85 кГц

б) амплитуда колебаний - 35 мкм, частота  $f$  - 23,85 кГц

Рис.2. Зависимости скорости экстракции раневого содержимого, по физическим свойствам близкого к воде, от площади излучающей поверхности волновода-инструмента при разном количестве каналов в нем.

Представленные зависимости удельной скорости экстракции (рис.2), позволяют сделать вывод о том, что наиболее целесообразным является воздействие с помощью волновода-инструмента, содержащего не менее 12 каналов на излучающей поверхности площадью 20 см². Это обусловлено тем, что в данном случае скорость экстракции превышает 95% от максимально возможной. Использование меньшего количества каналов ведёт к снижению скорости экстракции до 20%. Максимальное количество каналов выбирается из условия, чтобы они не оказывали влияния на распределение амплитуд колебаний и циклическую прочность волновода-инструмента.

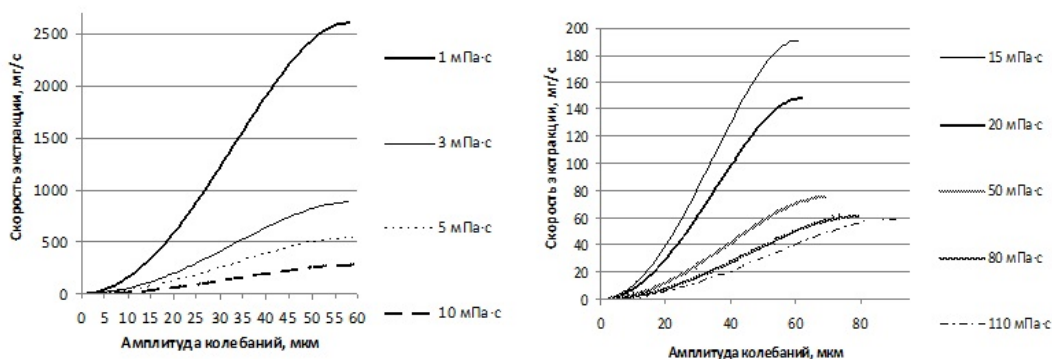
Далее представлены зависимости совокупной скорости экстракции от амплитуды колебаний излучателя волновода-инструмента при частоте  $f = 23,85$  кГц, выполненного в виде диска площадью 20 см² (диаметр 50 мм), содержащего 12 дренажных каналов при разных вязкостях и поверхностных натяжениях экстрагируемой жидкости (рисунки 3-4).



а) для диапазона вязкостей 1...10 мПа·с

б) для диапазона вязкостей 15...110 мПа·с

Рис.3. Зависимости скорости экстракции от амплитуды колебаний излучателя волновода-инструмента при различных вязкостях раневого содержимого (поверхностное натяжение 72 Н/м).



а) для диапазона вязкостей 1...10 мПа·с

б) для диапазона вязкостей 15...110 мПа·с

Рис. 4. Зависимости скорости экстракции от амплитуды колебаний излучателя волновода-инструмента при различных вязкостях раневого содержимого (поверхностное натяжение 32 Н/м).

Представленные графики (рис. 3-4) позволяют наряду с условиями воздействия (площадь излучателя и количество дренажных каналов) выбрать необходимую амплитуду колебаний, при которой достигается требуемая производительность экстракции раневого содержимого при использовании волновода-инструмента с излучателем диаметром 50 мм.

В частности, раневого содержимого, близкого по физическим свойствам к воде, обладающей малой вязкостью (1 мПа·с) и поверхностным натяжением 72 Н/м, скорость экстракции достигает 500 мг/с при амплитуде не более 35 мкм. А при амплитуде 12 мкм скорость экстракции составляет 100 мг/с. В то время как для раневого содержимого, по вязкости близкого к детриту (110 мПа·с) с поверхностным натяжением 32 Н/м, скорость экстракции достигает 60 мг/с.

Кроме того, представленные зависимости свидетельствуют о квадратичном росте скорости экстракции с увеличением амплитуды колебаний излучателя волновода-инструмента. Однако, начиная с некоторого порогового значения амплитуды, составляющего 39 мкм для жидкой среды вязкостью 1 мПа·с и поверхностным натяжением 72 Н/м, рост скорости экстракции прекращается из-за реализации кавитационного режима [4–5]. Это обусловлено действием сил Бьеркнеса на кавитационное облако вблизи поверхности озвучиваемой биоткани, препятствующих экстракции. Данные силы, как известно, приводят к возникновению ПУЗКЭ.

Поэтому исходя из полученных зависимостей, для озвучивания биотканей с раневым содержимым, имеющим вязкость в диапазоне 1...110 мПа·с, амплитуда колебаний не должна превышать 39...90 мкм.

Полученные результаты служат основой для выбора оптимальных режимов и условий УЗ воздействия, необходимых для обеспечения требуемой производительности экстракции.

#### **Создание волноводов-инструментов для реализации обратного ультразвукового капиллярного эффекта**

УЗ волноводы-инструменты, предназначенные для практической реализации УЗ экстракции раневого содержимого из биотканей, должны иметь определённый характер колебаний (продольный или изгибный) волноводного тракта и его рабочего окончания [6-7], а также обеспечивать требуемый диапазон амплитуд колебаний, который согласно результатам проведённых теоретических исследований, составляет 5– 90 мкм.

Поэтому рабочие инструменты могут быть выполнены в виде *стержня с дис-*

ковым окончанием (а,б), изгибно-колеблющегося диска (в,г) и продольно-колеблющегося стержня с центральным каналом (д) (рис.5).

Инструмент каждого типа должен иметь сквозные дренажные отверстия малого диаметра (0,5...1 мм). Если инструмент имеет форму диска, отверстия выполняются на участках диска [6], колеблющихся с максимальной амплитудой для обеспечения больше производительности. Если рабочий инструмент выполняется в виде стержня с окончанием малого диаметра (рис.5д), то он должен содержать один центральный канал диаметром не более 1 мм.

Согласно проведённым теоретическим исследованиям были рассчитаны геометрические параметры каждого из трёх перечисленных типов волноводов-инструментов для озвучивания участков раневых поверхностей капиллярно- диаметрами 9 мм, 20 мм, 30 мм, 50 мм и 75 мм. Все разработанные излучатели предназначены для использования в совокупности с пьезопреобразователем частотой 23,85 кГц.

Было осуществлено изготовление по одному образцу каждого из представленных рабочих инструментов для последующих экспериментальных исследований. Фото изготовленных рабочих инструментов приведены на рисунке 5.



Рис.5. Изготовленные рабочие инструменты: а,б – стержень с дисковым окончанием; в,г – изгибно-колеблющийся диск; д – стержень с центральным каналом

Созданные инструменты показали свою эффективность при экстракции раневого содержимого из биоткани.

В результате проведенных теоретических и практических исследований:

1) Была разработана физико-математическая модель обратного ультразвукового капиллярного эффекта, позволяющая выявить оптимальные режимы (по амплитуде колебаний) и условия (по площади и количеству дренажных каналов волновод-инструмента) УЗ воздействия, обеспечивающие максимальную производительность

экстракции раневого содержимого, в зависимости от его вязкости и поверхностного натяжения. Установлено, что скорость экстракции может достигать 500 мг/с при амплитуде колебаний волновода-инструмента, не превышающей 35 мкм.

2) На основании рассчитанного диапазона амплитуд колебаний были разработаны и изготовлены рабочие инструменты каждого из трёх перечисленных типов, обеспечивающие возможность экстракции патологического содержимого при помощи контактного УЗ воздействия.

Созданные инструменты рекомендованы к использованию в составе специализированных медицинских аппаратов для хирургии и консервативной терапии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 17-08-00227 А.

#### Список литературы

1. Косёнок, В.К. Новые подходы в паллиативном лечении больных злокачественными новообразованиями [Текст] / В.К. Косёнок, В.В. Педдер, В.Н. Мироненко, М.В. Набока, Румянцев Н.В., Рот Г.З., Попова С.П., Сургутскова И.В. // Паллиативная медицина и реабилитация. – М.: Фонд «Паллиативная медицина и реабилитация больных». – 2008. – С. 5-11.

2. Педдер, В.В. «Обратный» ультразвуковой капиллярный эффект и его использование в хирургии [Текст] / В.В. Педдер, Л.В. Лощилова, В.В. Бяллер, Г.В. Саврасов, Н.В. Шепелев // «Проблемы техники в медицине». Тезисы докладов IV Всесоюзной конференции – Тбилиси, 1986. – С. 90-91.

3. Китайгородский, Ю.И. Расчёт высоты и скорости подъёма жидкости в капиллярах при воздействии ультразвуковых колебаний [Текст] / Ю.И. Китайгородский, В.И. Дрожалова // Применение ультразвука в металлургии. – 1977. – Вып. 90. – С. 12–16.

4. Хмелёв, В.Н. Выявление оптимальных режимов и условий ультразвуковой кавитационной обработки высоковязких жидкостей [Текст] / В.Н. Хмелёв, Р.Н. Голых, С.С. Хмелёв, К.А. Карзакова // Научно-технический вестник Поволжья. – 2013. – №2. – С.249-251.

5. Хмелёв В.Н. Выявление режимов ультразвукового воздействия, обеспечивающих формирование кавитационной области в высоковязких и неньютоновских жидкостях [Электронный ресурс] / В.Н. Хмелёв, А.В. Шалунов, Р.Н. Голых, С.С. Хмелёв // Электронный журнал «Южно-Сибирский научный вестник». – 2014. – №1. – С. 22-27. – Режим доступа: [http://s-sibsb.ru/images/articles/2014/1/5\\_22-27.pdf](http://s-sibsb.ru/images/articles/2014/1/5_22-27.pdf)

6. Хмелёв, В.Н. Применение ультразвуковых колебаний высокой интенсивности для интенсификации процессов в газовых средах [Текст] / В.Н. Хмелёв, А.В. Шалунов, С.Н. Цыганок, Р.В. Барсуков, К.В. Шалунова // Химическая техника.- 2010. – № 1. – С.23–28.

7. Цыганок, С.Н. Исследование и совершенствование пьезоэлектрических ультразвуковых колебательных систем для интенсификации процессов химических технологий : автореф. дис. на соиск. учен. степ. канд. техн. наук: 05.17.08 / С. Н. Цыганок ; [Алт. гос. техн. ун-т им. И. И. Ползунова]. - Бийск, 2005. - 23 с. : ил.

# **АНАЛИЗ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО ОБЛАСТИ ЗНАНИЯ "МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, МЕХАНИКА", ПОДДЕРЖАННЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

Р.А. Чиженкова

Институт биофизики клетки РАН, [chizhenkova@mail.ru](mailto:chizhenkova@mail.ru)

## **Введение**

За последние десятилетия произошла переоценка значимости фундаментальной науки для развития цивилизации, а также политического и экономического благополучия современного общества [2, 5, 6, 8.]. Успехи в области прикладных наук приводят лишь к временным эффектам в сфере технического прогресса, поскольку для самого их существования требуется познание мира, проистекающее из фундаментальных разработок. Однако, результаты, получаемые при фундаментальных исследованиях, в принципе не могут быть непосредственно внедрены в какие-либо технологии и, следовательно, иметь "самоокупаемость". В связи с этим существует необходимость их экономической поддержки со стороны государства, которая и привела в середине XX столетия к организации соответствующих фондов в ряде стран [1, 2, 6].

Российский Фонд Фундаментальных Исследований (РФФИ) был создан в 1992 г. [1]. Материалы относительно 20-летнего юбилея РФФИ отражены в специальном выпуске журнала "Вестник РФФИ". Однако в открытых публикациях не был проведен анализ научных направлений проектов, поддержанных Фондом, что послужило причиной проведения наших библиометрических исследований [9-12].

Лидирующим видом конкурса РФФИ, несомненно, является конкурс инициативный проектов, созданный для финансовой поддержки проведения исследований. При этом получаемые в данных исследованиях результаты нуждаются в соответствующем опубликовании, что весьма затруднительно по экономическим причинам. В связи с этим, был параллельно организован конкурс издательских проектов.

Суммарные материалы результатов конкурсов издательских научных проектов по всем восьми рассмотренным областям знания уже были опубликованы в наших работах [10, 11]. Настоящие исследования посвящены детальному библиометрическому анализу издательских проектов по области знания "Математика, информатика, механика".

## **Материалы и методы**

Представленные здесь сведения основываются на данных, опубликованных в Информационных бюллетенях (ИБ) РФФИ, выходящих раз в год и освещающих итоги прошедшего конкурса

Для каждого года выделялись количественные сведения относительно конкурсов издательских проектов по всем областям знания, в том числе и по области "Математика, информатика, механика", в виде чисел выделенных грантов и поданных заявок. На основе этого вычислялась процентная вероятность поддержки проектов. Проводили объединение результатов по анализируемым рубрикам за весь временной период и вычисляли статистическую значимость различия величин, составляющих совокупности. Для статистического анализа использовали сравнение двух выборочных долей вариант. Кроме того, применяли корреляционный анализ.

## **Результаты и обсуждение**

Издательские проекты самостоятельно рассматривались в РФФИ с 1995 г. Число поддержанных РФФИ издательских проектов по области знания "Математика, информатика, механика" за 18 лет составляло 1085, что представляло 24.00% от общего числа

по всем издательским проектам - 4521. Динамика чисел соответствующих грантов за исследуемый период отражена в табл. 1.

Таблица 1

Динамика чисел поддержанных издательских научных проектов по области знания "Математика, информатика, механика" в течение 18-летнего периода

| Годы    | Издательские проекты.              |            |                    |                           |
|---------|------------------------------------|------------|--------------------|---------------------------|
|         | "Математика, информатика механика" | % от суммы | Все области знания | % от всех областей знания |
| 1993    |                                    |            |                    |                           |
| 1994    |                                    |            |                    |                           |
| 1995    | 86                                 | 7.93       | 304                | 28.29                     |
| 1996    | 87                                 | 8.02       | 273                | 31.87                     |
| 1997    | 63                                 | 5.81       | 246                | 25.61                     |
| 1998    | 72                                 | 6.63       | 323                | 22.29                     |
| 1999    | 57                                 | 5,25       | 179                | 31.84                     |
| 2000    | 65                                 | 5.99       | 224                | 29.02                     |
| 2001    | 61                                 | 5.62       | 240                | 25.42                     |
| 2002    | 89                                 | 8.20       | 265                | 33.58                     |
| 2003    | 74                                 | 6.82       | 232                | 31.90                     |
| 2004    | 63                                 | 5.81       | 214                | 29.44                     |
| 2005    | 64                                 | 5.90       | 232                | 27.59                     |
| 2006    | 49                                 | 4.52       | 237                | 20.68                     |
| 2007    | 57                                 | 5.25       | 255                | 22.35                     |
| 2008    | 71                                 | 6.54       | 296                | 23.99                     |
| 2009    | 57                                 | 5.25       | 393                | 14.50                     |
| 2010    | 30                                 | 2.76       | 255                | 11.76                     |
| 2011    | 24                                 | 2.21       | 199                | 12.06                     |
| 2012    | 16                                 | 1.47       | 154                | 10.39                     |
|         |                                    |            |                    |                           |
| Сумма   | 1085                               | 100        | 4521               | 24.00                     |
| Среднее | 60.28                              | 5.56       | 251.17             | 24.00                     |

Выделенных грантов приходилось на один год от 16 до 89 и в среднем равнялось 60.28. Из табл. 1 следует, что имели место их весьма выраженные колебания. Наибольшие числа поддержанных проектов рассматриваемого направления присутствовали в первую половину указанного периода при наличии пиковых значений в 1995, 1996 и 2002 гг. Наименьшие числа грантов отмечались в конце этого периода.

Число полученных заявок по издательским проектам в ИБ указано только за годы 2002-2012. За эти годы была получена 1261 заявка относительно проектов по области знания "Математика, информатика, механика", что составляет 21.86% от их общего числа по всем областям знания - 5768. Динамика чисел поданных заявок по области

знания "Математика, информатика, механика" за исследуемый период представлена в табл. 2.

Таблица 2

Динамика чисел поданных заявок по издательским научным проектам в области знания "Математика, информатика, механика" в течение рассматриваемого периода

| Годы    | Издательские проекты                |            |                    |                           |
|---------|-------------------------------------|------------|--------------------|---------------------------|
|         | "Математика, информатика, механика" | % от суммы | Все области знания | % от всех областей знания |
| 1993    |                                     |            |                    |                           |
| 1994    |                                     |            |                    |                           |
| 1995    |                                     |            |                    |                           |
| 1996    |                                     |            |                    |                           |
| 1997    |                                     |            |                    |                           |
| 1998    |                                     |            |                    |                           |
| 1999    |                                     |            |                    |                           |
| 2000    |                                     |            |                    |                           |
| 2001    |                                     |            |                    |                           |
| 2002    | 151                                 | 11.97      | 484                | 31.20                     |
| 2003    | 155                                 | 12.29      | 524                | 29.58                     |
| 2004    | 124                                 | 9.83       | 435                | 28.51                     |
| 2005    | 117                                 | 9.28       | 463                | 25.27                     |
| 2006    | 121                                 | 9.60       | 491                | 24.64                     |
| 2007    | 107                                 | 8.49       | 456                | 23.46                     |
| 2008    | 138                                 | 10.94      | 526                | 26.24                     |
| 2009    | 125                                 | 9.91       | 711                | 17.58                     |
| 2010    | 59                                  | 7.06       | 681                | 13.07                     |
| 2011    | 81                                  | 6.42       | 594                | 13.64                     |
| 2012    | 53                                  | 4.20       | 403                | 13.15                     |
|         |                                     |            |                    |                           |
| Сумма   | 1261                                | 100        | 5768               | 21.86                     |
| Среднее | 114.64                              | 9.09       | 524.36             | 21.86                     |

Числа поданных заявок за один год колебались от 53 до 155 при среднем значении 114.64. Табл. 2 показывает, что в начале анализируемого периода числа поданных заявок были преимущественно выше с пиковым значением в 2002 и 2003 гг. В конце его они были ниже, а также претерпевали значительные выраженные колебания.

Описанные здесь количественные характеристики выделенных грантов и представленных заявок позволили определить вероятность поддержки посылаемых материалов. В течение 11 лет, по которым в ИБ даны числа заявок, из 1261 заявки по области знания "Математика, информатика, механика" было поддержано 594 проекта, что составило 47.11%. Динамика процентных чисел проектов по годам продемонстрирована в табл. 3.

Таблица 3

Динамика процентных чисел поддержанных издательских научных проектов по области знания "Математика, информатика, механика" в течение рассматриваемого периода

| Годы        | Издательские проекты<br>"Математика, информатика, механика" |        |                   |
|-------------|-------------------------------------------------------------|--------|-------------------|
|             | Гранты                                                      | Заявки | %<br>поддержанных |
| 1993        |                                                             |        |                   |
| 1994        |                                                             |        |                   |
| 1995        |                                                             |        |                   |
| 1996        |                                                             |        |                   |
| 1997        |                                                             |        |                   |
| 1998        |                                                             |        |                   |
| 1999        |                                                             |        |                   |
| 2000        |                                                             |        |                   |
| 2001        |                                                             |        |                   |
| 2002        | 89                                                          | 151    | 58.94             |
| 2003        | 74                                                          | 155    | 47.74             |
| 2004        | 63                                                          | 124    | 50.81             |
| 2005        | 64                                                          | 117    | 54.70             |
| 2006        | 49                                                          | 121    | 40.50             |
| 2007        | 57                                                          | 107    | 53.27             |
| 2008        | 71                                                          | 138    | 51.45             |
| 2009        | 57                                                          | 125    | 45.60             |
| 2010        | 30                                                          | 89     | 33.71             |
| 2011        | 24                                                          | 81     | 29.63             |
| 2012        | 16                                                          | 53     | 30.19             |
|             |                                                             |        |                   |
| Сумма       | 594                                                         | 1261   | 47.11             |
| Средне<br>е | 54                                                          | 114.64 | 47.11             |

Годовые значения процентных чисел поддержанных проектов по области знания "Математика, информатика, механика" за данный период составляли от 29.63 до 58.94 при средней величине 47.11. Как видно из табл. 3, пикового значения процентные числа поддержанных проектов достигали в 2002 г. Наименьшие процентные числа приходились на последние годы анализируемого периода на фоне их значительных колебаний.

В настоящей работе проанализированы числа выделенных грантов, числа подаваемых заявок и процентные числа поддержанных издательских проектов по области знания "Математика, информатика, механика", что позволило установить следующее.

Во-первых, число поддержанных издательских проектов по области знания "Математика, информатика, механика" представляло весьма существенную величину -

1085, что составляло 24.00% от общего числа по всем восьми областям знания. Доля поданных заявок проектов по области знания "Математика, информатика, механика" в общем числе таковых обладала близким показателем - 21.86%. Процентное число поддержанных проектов по области знания "Математика, информатика, механика" равнялось 47.11, что приближалось к аналогичному процентному числу в суммарных данных по всем областям знания - 47.36 [11, 12].

Во-вторых, имели место выраженные колебания по годам чисел выделенных грантов, чисел подаваемых заявок и процентных чисел поддержанных проектов. Отмечалось некоторое сходство динамик величин этих трех показателей. Во всех трех случаях наибольшие значения приходились на начальные годы рассматриваемого временного периода, При этом отмечались значительные колебания соответствующих величин преимущественно в конце анализируемого периода. Колебания чисел грантов достигали 5.56 раз, сделанных заявок - 2.92 раза и процентов поддержанных проектов - в 1.99 раз.

Корреляционный анализ позволил выявить факт наличия некоторого параллелизма чисел выделенных грантов и чисел подаваемых заявок ( $r = 0.95$ ;  $p < 0.01$ ), что свидетельствует о значительной роли общего состояния внутренней возможности в поддержке научных проектов РФФИ. Кроме того, была установлена положительная корреляционная взаимосвязь чисел выделенных грантов по области знания "Математика, информатика, механика" с соответствующими величинами суммарных данных по всем областям знания ( $r = 0.48$ ;  $p < 0.05$ ). Что касается подаваемых заявок, данный феномен отсутствовал ( $r = 0.03$ ;  $p > 0.05$ ). Однако процентные числа поддержанных проектов по области знания "Математика, информатика, механика" обладали положительной корреляцией с таковыми суммарных данных по всем областям знания в конкурсе издательских проектов ( $r = 0.87$ ;  $p < 0.01$ ), что также позволяет предположить ведущее значение финансовых ресурсов РФФИ в результатах его деятельности.

Следует отметить некоторые отличия итогов конкурса издательских научных проектов по области знания "Математика, информатика, механика" от соответствующего конкурса инициативных проектов [12]. Числа выделенных грантов по данной области знания среди издательских проектов были значительно ниже, чем среди инициативных проектов. Среднее число поддержанных издательских проектов в год составляло 60.28, а инициативных 410.45, их различие в 6.81 раз. Существенно ниже у издательских проектов отмечались и количественные показатели заявок. Среднее число заявок по издательским проектам в год равнялось 114.64, а инициативных 1092.25, их различие в 9.53 раза. Тем не менее процентное число поддержанных издательских проектов (47.11) было выше такового у инициативных проектов (36.12) в 1.30 раз.

### **Заключение**

Создание РФФИ для поддержки работы научных коллективов и отдельных ученых явилось своевременным мероприятием только-что возникшей РФ. За два десятилетия деятельности РФФИ была оказана существенная поддержка публикации результатов фундаментальных исследований, в том числе и по области знания "Математика, информатика, механика". Для повышения возможности поддержки научных проектов весьма желательно увеличение финансового наполнения Фонда.

Предполагается, что российское правительство в ближайшее время может увеличить ресурсное наполнение Фонда. Об этом было сказано во время выступления В.В. Путиным на Общем собрании Российской академии наук в 2012 г., где он дал высокую оценку работе Фонда [7].

#### Список литературы

1. Алфимов М.В., Минин В.А., Либкинд А.Н. Страна наука - РФФИ // Вестник РФФИ. - 2000. - № 2(20). - С. 5-29.
2. Арутюнов В.С. Наука как один из важнейших институтов современного государства // В: Наука России. От настоящего к будущему / Ред В.С. Арутюнов, Г.В. Лисичкин, Г.Г. Малинецкий. - М.: Книжный дом "ЛИБРОКОМ", 2009. - С. 9-29.
3. Ефремов Ю.Н. Зачем нужна наука миру и России // Вестник РФФИ. - 2000. - № 1(19). - С. 40-43.
4. Коннов В.И. Самоуправление на "передовой": становление национального научного фонда США // Вестник РФФИ. - 2007. - №4(54). - С. 10-15.
5. Лебедев С.А. Праксиология науки // Вопросы философии. - 2012. - №4. - С. 52-63.
6. Обама Б. Выступление в Национальной академии наук 27-ого апреля 2009 г. // В защиту науки. Бюл. № 6. Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2009. - С. 185-198.
7. Путин В.В. Выступление на Общем собрании Российской академии наук 22 мая 2012 // В защиту науки. Бюл. № 11. Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2012. - С. 7-14.
8. Чиженкова Р.А. Динамика нейрофизиологических исследований действия неионизирующей радиации во второй половине XX-ого века. - М.: Издат. дом Акад. Естествознания, 2012. - 88 с.
9. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ научных проектов, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет: виды конкурсов // Успехи современного естествознания. - 2014. - №5. - С. 145-150.
10. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ издательских научных проектов по разным областям знания, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. - 2014. - №8. - С. 150-155.
11. Чиженкова Р.А. Российский фонд фундаментальных исследований. Библиометрический анализ поддержки научных проектов. - Germany: Palmarium Academic Publishing, 2015. - 88 с.
12. Чиженкова Р.А. Российский фонд фундаментальных исследований: Библиометрический анализ инициативных научных проектов. - М.: Изд. дом Акад. Естествознания, 2016. - 82 с.

# ГРАДИЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ТЕПЛООВОГО ПОЛЯ НА ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА

О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль

Учреждение образования «Гомельский государственный технический  
университет имени П.О. Сухого», *shablovsky-on@yandex.ru*

**Введение.** Процессы высокоскоростной кристаллизации глубоко переохлажденного расплава служат основой перспективных способов получения материалов с новыми функциональными свойствами. В настоящее время в экспериментальных условиях достигнуты скорости роста 20–70 м/с при глубине переохлаждения расплава до 300°K. История данного вопроса и библиография изложены в [1].

Важным аспектом проблемы роста является дендритное ветвление и анализ морфологической неустойчивости фазовой границы (ФГ). В настоящей статье рассматривается рост кристалла из однокомпонентного переохлажденного расплава с позиций теории локально-неравновесного теплопереноса [2]. Данная работа продолжает исследования [3]–[6] и имеет следующие цели: 1) изучить градиентные свойства теплового поля на линии роста; 2) проанализировать корреляцию «кривизна – скорость перемещения вершины дендрита».

**Нормальные производные температуры и компонентов вектора теплового потока.** Рассмотрим ФГ (двумерную плоскую либо осесимметричную), обладающую нестационарной кривизной. Уравнение линии роста постулируем в следующем виде:

$$f \equiv x + A(t) - [B(y)]^{p(t)} = 0.$$

Эта априорная зависимость основана на экспериментальных сведениях о нестационарных свойствах скорости и кривизны ФГ. Здесь  $t$  – время; в плоском ( $\nu = 0$ ) двухмерном случае  $x, y$  – прямоугольные декартовы координаты; в случае осевой симметрии ( $\nu = 1$ ) координата  $x$  соответствует оси симметрии;  $y$  – радиальная координата;  $B = B(y)$  – непрерывная функция;  $B(y) \geq 1$ ,  $\dot{B}(y) \equiv dB/dy \geq 0$  при  $y \geq 0$ , причем  $B(y=0) = 1$ . Закон движения вершины дендрита ( $y = 0$ ):  $x_j(t, y = 0) \equiv x_0(t) = 1 - A(t)$ ,  $t \geq 0$ . ФГ движется влево,  $dx_0/dt = -\dot{A}(t) < 0$ .

Геометрические свойства ФГ представляются формулами:

$$G = |\text{grad} f|, \quad G = [1 + p^2 B^{2(p-1)} \dot{B}^2]^{1/2}, \quad B_1 = p B^{p-1} \dot{B}, \quad p = p(t) \geq 1, \quad \sin \beta = \frac{1}{G}, \quad \cos \beta = \frac{B_1}{G}.$$

Алгоритм построения криволинейных координатных осей с ортогональным базисом  $\mathbf{s}$ ,  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{b}$  (касательная, главная нормаль и бинормаль к поверхности ФГ) изложен в [7], см. также [6]. ФГ  $x_j = B^p - A$  перемещается со скоростью  $N = (\dot{p} B^p \ln B - \dot{A})/G$  и обладает средней кривизной

$$K = K_1 + K_2, \quad K_1 = \frac{B_2}{G^3}, \quad K_2 = \frac{\nu B_1}{yG}, \quad B_2 = B_2(y, t) = p B^{p-1} \ddot{B} + p(p-1) B^{p-2} \dot{B}^2. \quad (1)$$

В случае  $p(t) \equiv 1$  получаем зависимости для ФГ стационарной формы. Работаем с двумерными уравнениями теплопереноса:

$$c \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q_1}{\partial x} + \frac{\partial q_2}{\partial y} + \frac{\nu}{y} q_2 = 0, \quad q_1 + \gamma \frac{\partial q_1}{\partial t} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \quad q_2 + \gamma \frac{\partial q_2}{\partial t} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y}; \quad \nu = 0, 1.$$

Основные обозначения:  $T$  – температура,  $\mathbf{q}(q_1, q_2)$  – вектор удельного теплового потока;  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности;  $c$  – объемная теплоемкость;  $\gamma$  – время релак-

сации теплового потока;  $w^2 = \lambda/(\gamma c)$  - квадрат скорости распространения тепловых возмущений. После перехода от аргументов  $(x, y, t)$  к  $(s, n, t)$  получаем уравнения для функций  $T, q_n, q_s$ :

$$\left(\frac{c\xi_{3t}}{G}\right)\frac{\partial T}{\partial n} + \frac{\partial q_n}{\partial n} = \Pi_1, \quad (2)$$

$$\Pi_1 = \frac{v}{y}(q_n \cos \beta - q_s \sin \beta) - c \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{cB_1}{G} \xi_{1t} \frac{\partial T}{\partial s} - q_s \frac{\partial}{\partial y}(\sin \beta) + q_n \frac{\partial}{\partial y}(\cos \beta) - \frac{\partial q_s}{\partial s};$$

$$\frac{\lambda}{G} \frac{\partial T}{\partial n} + \left(\gamma \sin \beta \frac{\xi_{3t}}{G}\right) \frac{\partial q_n}{\partial n} + \left(\gamma \cos \beta \frac{\xi_{3t}}{G}\right) \frac{\partial q_s}{\partial n} = \Pi_2, \quad (3)$$

$$\Pi_2 = -\frac{B_1}{G} \lambda \frac{\partial T}{\partial s} - \gamma \frac{B_1^2}{G^2} \xi_{1t} \frac{\partial q_s}{\partial s} - \gamma \cos \beta \frac{\partial q_s}{\partial t} - \gamma \frac{B_1}{G^2} \xi_{1t} \frac{\partial q_n}{\partial s} - \gamma \sin \beta \frac{\partial q_n}{\partial t} -$$

$$- \gamma \left( q_n \frac{\partial \sin \beta}{\partial t} + q_s \frac{\partial \cos \beta}{\partial t} \right) - q_n \sin \beta - q_s \cos \beta;$$

$$- \frac{\lambda B_1}{G} \frac{\partial T}{\partial n} - \left( \gamma \cos \beta \frac{\xi_{3t}}{G} \right) \frac{\partial q_n}{\partial n} + \left( \gamma \sin \beta \frac{\xi_{3t}}{G} \right) \frac{\partial q_s}{\partial n} = \Pi_3, \quad (4)$$

$$\Pi_3 = -\frac{\lambda}{G} \frac{\partial T}{\partial s} + \gamma \frac{B_1^2}{G^2} \xi_{1t} \frac{\partial q_n}{\partial s} - \gamma \frac{B_1}{G^2} \xi_{1t} \frac{\partial q_s}{\partial s} + \gamma \cos \beta \frac{\partial q_n}{\partial t} - \gamma \sin \beta \frac{\partial q_s}{\partial t} -$$

$$- \gamma \left( q_s \frac{\partial \sin \beta}{\partial t} - q_n \frac{\partial \cos \beta}{\partial t} \right) + q_n \cos \beta - q_s \sin \beta.$$

Здесь  $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{q}_n + \mathbf{q}_s$ ;  $q_1 = q_n \sin \beta + q_s \cos \beta$ ,  $q_2 = -q_n \cos \beta + q_s \sin \beta$ .

$$\xi_{1t} = \dot{A} + \frac{\partial}{\partial t} \int \frac{dy}{B_1(y, t)}, \quad \xi_{3t} = \dot{A} - \dot{p} B^p \ln B; \quad \frac{\partial G}{\partial t} = \frac{B_1}{G} \frac{\partial B_1}{\partial t}, \quad \frac{\partial B_1}{\partial t} = \dot{p} B B^{p-1} (1 + p \ln B),$$

$$\dot{p} = dp(t)/dt, \quad \dot{B} = dB(y)/dy.$$

Данные три уравнения образуют систему линейных неоднородных алгебраических уравнений по отношению к нормальным производным  $\frac{\partial T}{\partial n}$ ,  $\frac{\partial q_n}{\partial n}$ ,  $\frac{\partial q_s}{\partial n}$ . Определитель этой системы равен

$$\Delta = \frac{\lambda \gamma \xi_{3t}}{G} (M^2 - 1), \quad M^2 = \frac{N^2}{w^2}, \quad N = -\frac{\xi_{3t}}{G}. \quad (5)$$

Нормальные производные подсчитываем по формулам:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \frac{\Delta_1^1}{c \gamma G (N^2 - w^2)}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial q_n}{\partial n} = \frac{\Delta_2^1}{c \gamma G^2 (N^2 - w^2)}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial q_s}{\partial n} = \frac{\Pi_3 + B_1 \Pi_2}{\gamma \xi_{3t}}. \quad (8)$$

$$\Delta_1^1 = \Pi_1 \gamma \xi_{3t} + B_1 \Pi_3 - \Pi_2; \quad \Delta_2^1 = c \xi_{3t} (\Pi_2 - B_1 \Pi_3) - \lambda \Pi_1 G^2.$$

ФГ кристаллизации моделируем поверхностью сильного разрыва теплового поля. Динамические условия совместности получаем обычным образом [8]:

$$q_{sj} \equiv q_j \cos(\beta - \beta_j) = q_* \cos \beta; \quad (9)$$

$$q_{nj} \equiv q_j \sin(\beta - \beta_j) = q_* \sin \beta + N(u_j - u_*) - L \left( N + \gamma \frac{\partial N}{\partial t} \right); \quad (10)$$

$$T_j = T_c - \frac{T_c U}{L} K - \frac{|N|}{\mu}; \quad q_j = |q_j|, \quad q_* = |q_*|; \quad U, \mu - \text{const}. \quad (11)$$

Звездочкой отмечены параметры расплава; индекс  $j$  указывает, что значение функции определено на правой стороне разрыва, в твердой фазе;  $L$  – теплота фазового перехода единицы объема вещества;  $\mu$  – кинетический коэффициент роста;  $U$  – поверхностная энергия границы раздела фаз;  $T_c$  – равновесная температура кристаллизации;  $c = du/dT$ . Подробное обсуждение условий (9) – (11) имеется в [6]. Здесь допускается случай одномерного нестационарного теплового поля расплава,  $q_* = q_*(x, t)$ ,  $T_* = T_*(x, t)$ . Для определенности анализируем вариант  $N = Nn$ ,  $q_* = q_* i_1$ , принимая  $N < 0$ ,  $q_* > 0$ . Функции  $T_j$ ,  $q_{nj}$ ,  $q_{sj}$  определяем с помощью (9)–(11) через параметры расплава  $q_*$ ,  $T_*$ . Продифференцировав по касательной координате формулы (9)–(11), находим

$$\left( \frac{\partial T}{\partial s} \right)_j = \frac{\partial T_j}{\partial s}, \quad \left( \frac{\partial q_n}{\partial s} \right)_j = \frac{\partial q_{nj}}{\partial s}, \quad \left( \frac{\partial q_s}{\partial s} \right)_j = \frac{\partial q_{sj}}{\partial s}.$$

Нормальные производные на ФГ

$$\left( \frac{\partial T}{\partial n} \right)_j, \quad \left( \frac{\partial q_n}{\partial n} \right)_j, \quad \left( \frac{\partial q_s}{\partial n} \right)_j \quad (12)$$

подсчитываем на основе (9)–(11) и их дифференциальных следствий, получаемых воздействием операторов  $\frac{\partial}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial x} \cos \beta + \frac{\partial}{\partial y} \sin \beta$  и  $\frac{\partial}{\partial n} = \frac{\partial}{\partial x} \sin \beta - \frac{\partial}{\partial y} \cos \beta$ .

**Обсуждение результатов.** Математической моделью появления боковой ветви дендрита на ФГ служит градиентная катастрофа, с наступлением которой производные (12) становятся неограниченно большими. Анализ полученных выражений позволяет утверждать, что существуют три причины разрушения теплового поля на линии роста.

I. Из (6), (7) ясно, что разрушение происходит в «звуковой» точке  $(x_j^1, y^1, t^1)$ , когда  $N^2(y^1, t^1) = w_j^2$ ; здесь  $x_j^1 = x_j(y^1, t^1)$ .

II. Согласно (5), (8), градиентная катастрофа наступает в точке остановки  $(x_{jr}, y_r, t_r)$  ФГ, когда  $N(y_r, t_r) = 0$ , т.е.  $(\dot{p} B^p \ln B)_r = (\dot{A})_r$ . Этот вариант возможен только при нестационарной кривизне ФГ, когда функция  $p(t)$  не является тождественной константой. В частном случае, когда  $p(t) \equiv \text{const}$ , кривизна стационарна ( $\partial K / \partial t \equiv 0$ , см. (1)), и градиентная катастрофа может появиться только в «звуковой» точке.

Отметим еще, что в кинематическом отношении  $\dot{A}(t)$  характеризует скорость, отвечающую поступательной компоненте движения ФГ;  $\dot{p}(t)$  определяет угловую скорость касательной к ФГ в каждой ее точке. В физическом отношении  $\dot{A}(t)$  описывает скорость движения вершины дендрита;  $p(t)$  входит в формулу для кривизны  $K(y=0, t) = p(t) \ddot{B}(y=0)$ .

III. При подсчете производной  $(\partial q_n / \partial t)_j$ , входящей в  $\Pi_2$ ,  $\Pi_3$  появляется  $\partial^2 N / \partial t^2$ , т.е. формулы (12) содержат производные третьего порядка  $d^3 A(t) / dt^3$ ,  $d^3 p(t) / dt^3$ . Градиентная катастрофа появляется, когда  $p(t)$  и (или)  $A(t)$  содержат входящую аддитивно степенную либо логарифмическую особенности:

$$(t_3 - t)^{3-\alpha}, t_3 > 0, 0 < \alpha < 1; (t_3 - t)^3 \ln(t_3 - t), t_3 > 0.$$

Из рассмотрения аналитических выражений  $\Pi_2$  и  $\Pi_3$  ясно, что локальная неравновесность проявляет себя не только по отношению к тепловому потоку (см. слагаемые, содержащие множители  $\gamma \partial q_n / \partial t$ ,  $\gamma \partial q_s / \partial t$ ), но и по отношению к углу  $\beta$ , характеризующему двумерные геометрические свойства ФГ (см. слагаемые, содержащие множители  $\gamma \partial \sin \beta / \partial t$ ,  $\gamma \partial \cos \beta / \partial t$ ). Таким образом, нормальные производные (6) - (8) содержат слагаемые вида  $\gamma \frac{\partial}{\partial t}(q_n \cos \beta)$ ,  $\gamma \frac{\partial}{\partial t}(q_s \cos \beta)$ , а это значит, что на фоне локальной неравновесности процесса роста наблюдается нелинейное (мультипликативное) взаимодействие тепловых и морфологических свойств ФГ. На рисунках 1 и 2 представлены результаты расчета плоской ФГ при

$$A_1(t) = a_1(1 - \cos \omega_1 t) / \omega_1, B(y) = 1 + n_1 y, p(t) = 1 + a_2(1 - \sin \omega_2 t), a_2 > 0, t \geq 0 \\ q_*(x) = q_*^1 \sin^2(k_* x); q_*^1, k_* - \text{const}, q_*^1 > 0, x \in [x_1, 0], x_1 < 0, N_m = -N.$$

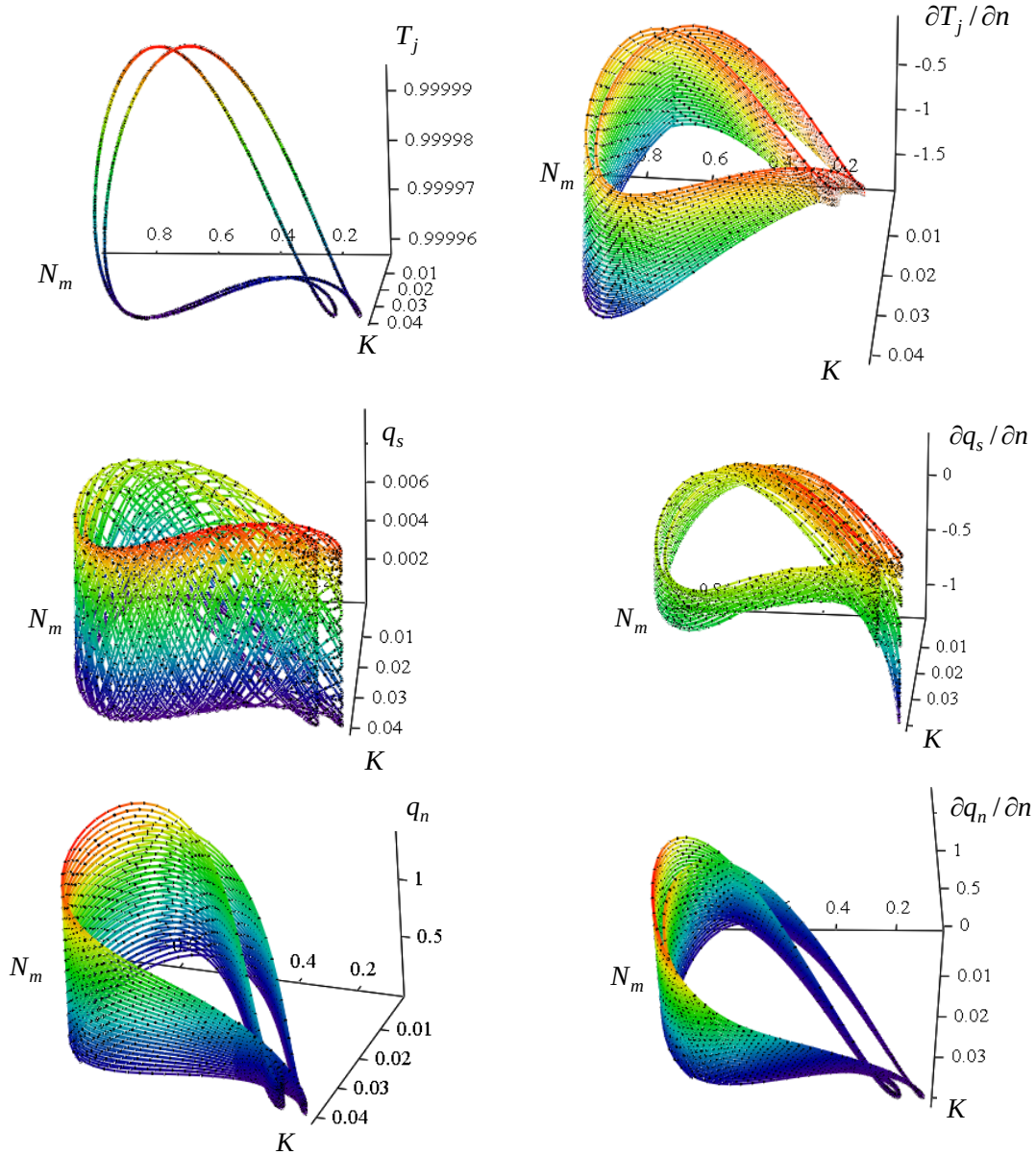


Рис. 1. Тепловые процессы на периферии дендрита

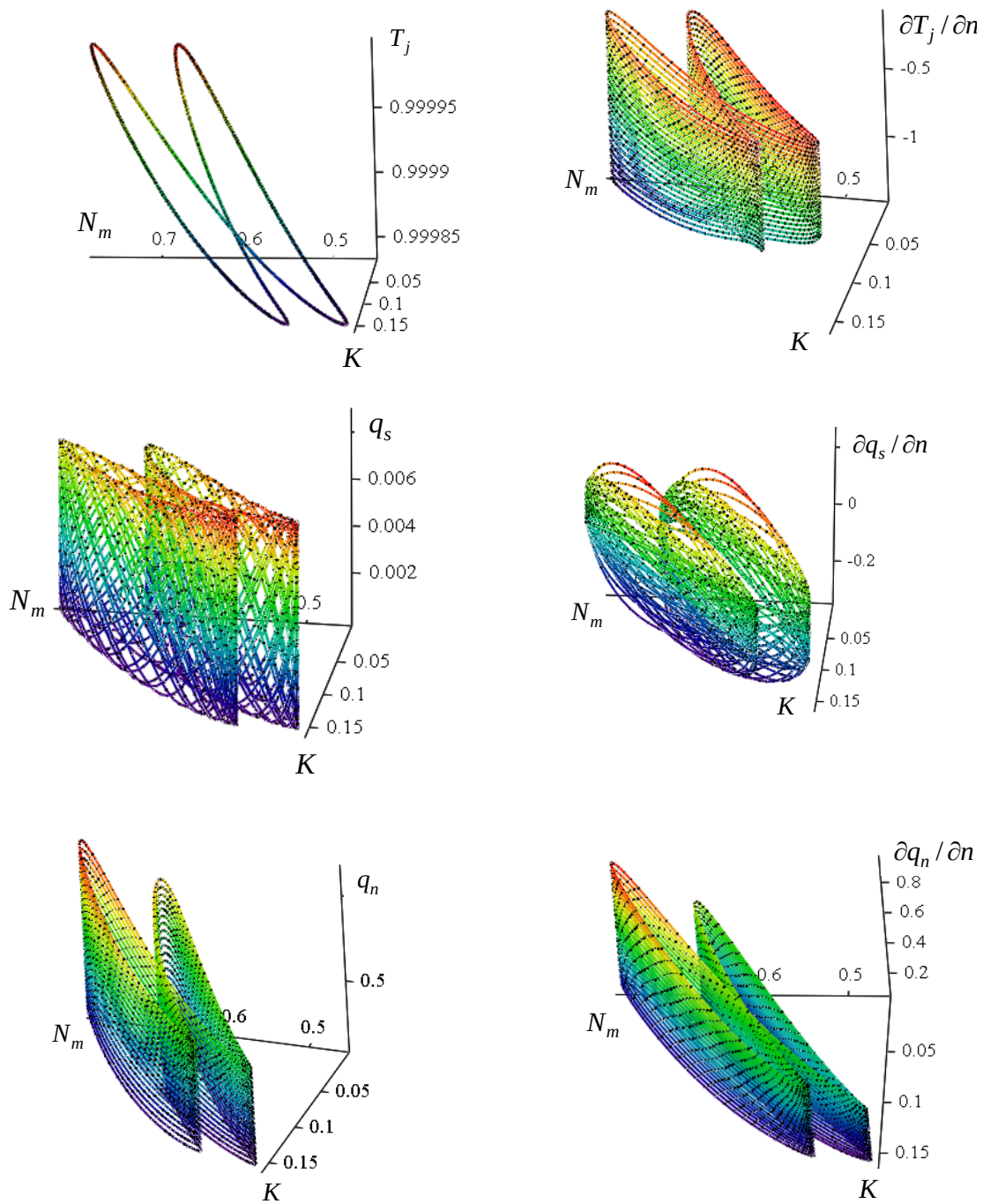


Рис. 2. Тепловые процессы в конечной окрестности вершины дендрита

Здесь мы учитываем известные в литературе данные о существовании периодических по времени возмущений скорости и кривизны вершины дендрита. Расчеты были проведены в безразмерных переменных. В качестве масштабов величин при обезразмеривании были приняты теплофизические параметры расплава чистого никеля, переохлажденного на  $67^\circ\text{K}$ , см. [5].

Пример расчета:  $\nu = 0$ ,  $n_1 = 1$ ;  $k_* = 1$ ;  $q_*^1 = 0,01$ ;  $\omega_1 = 0,5$ ;  $\omega_2 = 1$ ;  $a_1 = 0,1$ ;  $a_2 = 0,4$ . Информация, представленная на рисунках 1 и 2, позволяет судить об интервалах, в кото-

рых меняются основные параметры теплового поля на линии роста. Расчеты показали, что характер колебаний функции  $p(t)$  не влияет принципиальным образом на свойства данной теплофизической системы. Меняются отдельные фрагменты фазовых портретов, но основные закономерности эволюции линии роста сохраняются. Рисунок 1 относится к периферии дендрита:  $y = 1,0$ ; рисунок 2 демонстрирует свойства процесса в конечной окрестности вершины ( $y = 0,01$ ), где большая кривизна линии роста в значительной степени влияет на градиентные свойства теплового поля.

**Заключение.** Представлены результаты аналитического и численного исследования тепловых свойств двумерных линий роста, обладающих плоской и осевой симметриями. Анализ выполнен для случаев периодического по времени возмущения скорости и кривизны фазовой границы. Обнаружены существенные количественные различия между режимами колебаний вблизи вершины дендрита и на конечном удалении от нее. Показано, что основными параметрами влияния на тепловое состояние линии роста являются частота и фаза колебаний. Установлено, что система «расплав – кристалл» проявляет определенную стабильность по отношению к изменению режимов колебаний кривизны.

#### Список литературы

1. Herlach, d. M. Metastable solids from undercooled melts / d. M. Herlach, p. Galenko, d. Holland-moritz. – oxford: pergamon, 2007. – 448 p.
2. Жоу, Д. Расширенная необратимая термодинамика / Д. Жоу, Х. Касас-баскес, Дж. Лебон. – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. – 528 с.
3. Шабловский, о. Н. Релаксационный теплоперенос в нелинейных средах / о. Н. Шабловский. – гомель: ггту им. П.о. сухого, 2003. – 382 с.
4. Шабловский, о. Н. Тепловые свойства фронта кристаллизации однокомпонентного чистого переохлажденного расплава / о. Н. Шабловский, д. Г. Кроль // расплавы. – 2005. – № 4. – с. 69–81.
5. Шабловский, о. Н. Расчет кинетических параметров фронта кристаллизации глубоко переохлажденного расплава / о. Н. Шабловский, д. Г. Кроль // материалы, технологии, инструменты. – 2007. – т. 12, № 1. – с. 5–10.
6. Шабловский, о. Н. Тепловая градиентная катастрофа и рост двумерного свободного дендрита в переохлажденном расплаве / о. Н. Шабловский // прикладная физика. – 2007. – №3. – с. 29–37.
7. Emanuel, g. Shock wave derivatives / g. Emanuel, min-shan lin // phys. Fluids. – 1998. – vol. 31, № 12. – p. 3625–3633.
8. Седов, л. И. Механика сплошной среды / л. И. Седов. – м.: наука, 1973, т.1. – 536 с.

# СВЯЗЬ ОДНОМЕРНОЙ ЗАДАЧИ СВЯЗЕЙ НА ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ РЕШЁТКАХ И НАНОЛЕНТАХ

Т.В. Якунина, В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова,  
Институт естественных наук и математики, кафедра физики и  
информационных технологий, [tatav19@mail.ru](mailto:tatav19@mail.ru)

В настоящее время область применения теории перколяции уже вышла за рамки физики. В химии теория перколяции применяется для описания процессов полимеризации или связывания молекул в макромолекулы (гели). В биологии распространение эпидемий можно описать с помощью модели связей. Эта же модель описывает пожар в лесу, если вероятность передачи инфекции от больного животного здоровому заменить на вероятность распространения огня от горящего дерева к соседнему. Кроме того, теория находит широкое применение для описания различных неупорядоченных систем в химии и физике: пористые и аморфные материалы, включая и тонкие пленки; неупорядоченные ионные проводники; галактические структуры [1].

Теория перколяции является удобным, проверенным на адекватность подходом с широкими, не использованными до конца, возможностями для исследования переноса в неупорядоченных средах [2].

Цель данной работы заключается в том, чтобы описать модели решения одномерных задач связей на перколяционных решетках и нанолентах различного конечного размера.

Дадим определения основных понятий.

Целая связь — это связь, по которой можно пройти от одного узла к другому, по этой связи ток течёт. В противном случае связь заблокирована.

Ближайшие соседи узла периодической решетки составляют первую координационную сферу, равноправные вторые по степени удаленности узлы — вторую, и т.д. Целый узел считается связанным со всеми целыми узлами из 1-ой, 2-ой, ...,  $R$ -ой координационных групп (если все связи целые). В этом случае число  $R$  называется радиусом перколяции [3]. Это наименьшее количество рядом стоящих заблокированных узлов, при котором протекание прекращается для одномерной решетки: два узла связаны, если между ними не более, чем  $R - 1$  заблокированных узлов подряд. Совокупность связанных узлов образует кластер.

Если доля целых связей мала, они образуют небольшие отдельные кластеры. С увеличением целых связей кластеры растут, объединяются, и возникает пронизывающий всю решетку, так называемый, соединяющий кластер, по которому осуществляется протекание с одного конца решетки на другой. Наибольшая доля целых связей, при которой исчезает соединяющий кластер — это порог перколяции (протекания)  $p_{cc}$ . Он зависит от радиуса перколяции, размерности решетки, ее типа и числа узлов  $N$  [3].

Введем необходимые для решения задачи переменные.

$N$  — число узлов в решетке;

$n$  — число связей в решетке;

$m$  — число целых связей в решетке;  
 $R$  — радиус протекания, уровень.  
 $p_{cc}$  — порог протекания в задаче связей.

Рассмотрим задачу связей для одномерного случая. Тогда множество узлов представляет собой горизонтальную цепочку, узлы расположены друг от друга на одном расстоянии. Из каждого узла выходит одно и тоже число связей. Количество связей не зависит от месторасположения самого узла в решетке (все узлы и связи равноценны, кроме граничных узлов), число связей зависит только от радиуса протекания.

В задаче связей блокируется только одна связь за один шаг, поэтому исходный узел может продолжать функционировать. Движение по цепочке осуществляется с левого края на правый край.

Таким образом, решетка представляет собой горизонтальную одномерную цепочку, состоящую из  $N$  узлов, при радиусе протекания  $R$ . Так как общее число связей зависит от числа узлов в цепочке и радиуса протекания, то общее число связей в решетке равно [4]

$$n = \frac{R(2N + R + 1)}{2} . \quad (1)$$

Предложен способ решения задачи связи, который состоит из алгоритма нумерации связей и условий достижения порога.

Нумерация производится по следующему алгоритму.

Алгоритм 1

1. Перенумеруем все связи первой координационной сферы ( $r=1$ ) слева на право номерами от 1 до  $N + 1$ .

2. Нумеруем связи второй координационной сферы ( $r=2$ ) слева направо номерами от 1 до  $N + 2$ .

3. Нумеруем связи до  $R$ -й координационной сферы ( $r=R$ ) слева на право, начиная с первой (номера связей принимают значения от 1 до  $N + R$ ).

Таким образом, цепочка связей (последовательность) имеет следующий вид [4]

$$\underbrace{1,2,3,\dots, N + 1}_{\text{для } r=1}; \underbrace{1,2,3,\dots, N + 1, N + 2; \dots}_{\text{для } r=2}; \dots; \underbrace{1,2,3,\dots, N + R}_{\text{для } r=R} . \quad (2)$$

Затем произвольным образом блокируем одну из связей и определяем ее номер и местоположение. Затем блокируем еще одну связь случайным образом и т.д.

Количество заблокированных связей зависит от параметров  $N$  и  $R$ . Кроме того, для достижения порога необходимо выполнение условия 1 [4].

Условие 1.

Пусть радиус протекания равен  $R$  (не превосходит числа узлов в решетке).

Для связей между ближайшими соседями (первая координационная сфера) блокируется произвольная  $k - я$  связь;

Для связей между вторыми соседями ( $r=2$ ) должны блокироваться  $k - я$  и  $(k + 1) - я$  связи (блокируется две связи).

Аналогично для третьих соседей блокируем три связи с соответствующими номерами  $k, k+1, k+2$ .

Наконец, для  $r = R$  блокируем  $R$  связей с номерами  $k, k+1, k+2, \dots, k+R-1$ .

По условию сначала блокируется произвольная связь первой координационной сферы и её порядковый номер  $k$  может быть любым.

Однако порога можно достичь только в том случае, если будет заблокирована хотя бы одна связь первой координационной сферы [4].

Данный метод является приближенным, так как он не описывает малую часть случаев достижения порога.

При рассмотрении одномерной цепочки (рис.1), состоящей из 5 узлов при радиусе протекания  $R = 2$ , произведем блокировку всех связей  $r=1$ , а так же связей  $r=2$  с номерами 2, 5.

Из рисунка видно, что протекание прекращается, но рассмотренный метод не предусматривает этого случая.

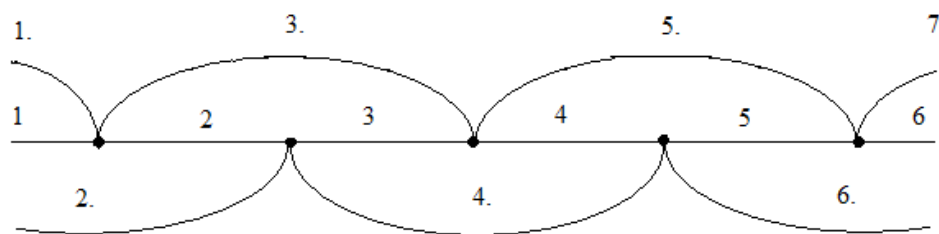


Рис. 1. Пример одномерной решетки из 5 узлов с радиусом протекания  $R = 2$ .

В результате рассмотрения подобных примеров было получено ещё одно условие, благодаря которому программа описывает все возможные случаи для  $R = 2$ , то есть алгоритм 1 становится точным (описывает все возможные случаи)

Условие 2.

Достижение порога протекания возможно при блокировке произвольных трех связей  $r=1$ , стоящих подряд, с номерами  $k, k+1, k+2$  (номер связи  $k$  произволен). Кроме того, для связей  $r = 2$  должны быть заблокированы, по крайней мере, две связи с номерами из множества  $\{k, k+1, k+2, k+3\}$ . Из двух заблокированных связей  $r = 2$  одна должна быть четной, а другая нечетной.

В результате добавления условия 2 в программу были получены точные результаты для среднего порога протекания с соответствующей погрешностью, приведенные на рис. 2.

Анализируя данные, видим, что с увеличением числа узлов, увеличивается среднее значение порога протекания, а погрешность уменьшается. Под погрешностью понимается стандартное отклонение. В результате добавления нового условия порог протекания незначительно увеличился для всех рассмотренных решеток, а погрешность наоборот снизилась.

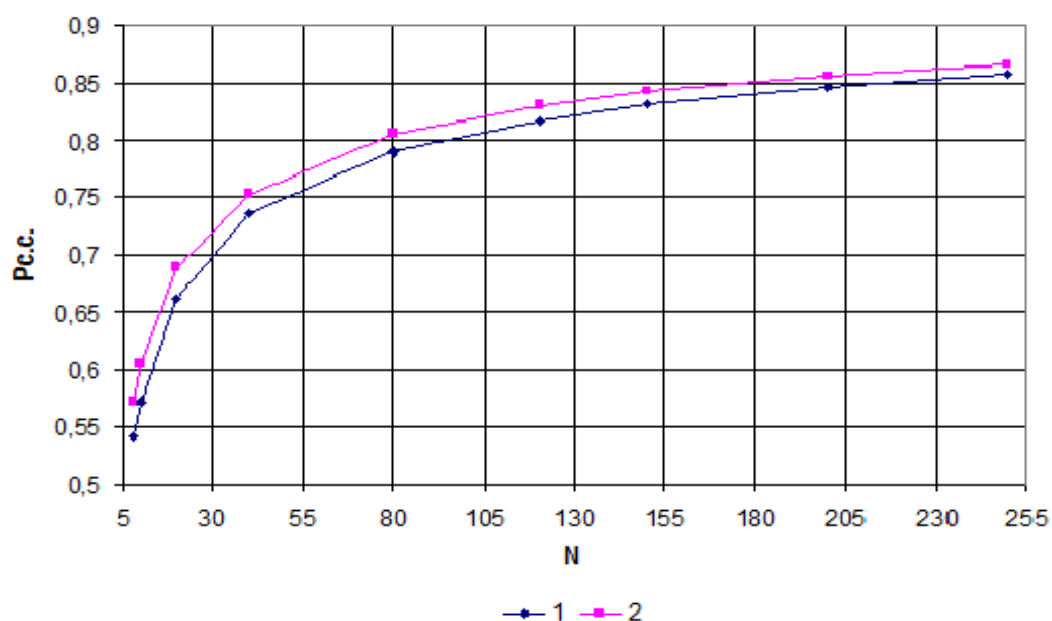


Рис. 2. Линия 1 – результат работы программы без добавления условия 2; линия 2 – результат работы программы с добавлением условия 2.

Отсюда следует, что первый приближенный метод, который работает быстрее, является достаточно точным, расхождения между точным и приближенным методами меньше погрешности расчета. Поэтому для больших расчетов возможно использование более простого приближенного метода. При добавлении в приближенный метод условия 2 программа позволит находить значения порога протекания и погрешности только для протекания по первым и вторым соседям в цепочке при произвольном количестве узлов.

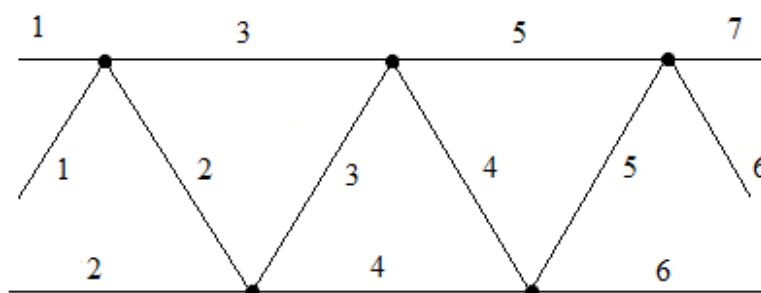


Рис.3. Пример наноленты из 5 узлов.

Рассмотрим ещё одну модель решения задачи связей для наноленты.

Нанолента представляет собой часть бесконечной треугольной двумерной решетки. На рис. 3. схематично изображена нанолента, состоящая из 5 узлов, которые расположены друг от друга на одном расстоянии.

Из каждого узла выходит одно и тоже число связей. Все соседние связи в ленте образуют углы в  $60^\circ$ .

В данной модели рассматривается случай для  $R = 1$  (протекание по ближайшим соседям). Перколяция по наноленте осуществляется с левого края на правый край.

Из рис. 3 видно, что нанолента с протеканием по ближайшим соседям идентична одномерной решетке радиуса протекания  $R = 2$ . Связи, образующие зигзаг в наноленте, эквивалентны связям  $r=1$  из одномерной решетки, а параллельные линии равносильны связям второй координационной сферы  $r=2$  из одномерной решетки.

Так как нанолента идентична одномерной решетке радиуса  $R = 2$ , то для нахождения общего числа связей наноленты используем формулу (1), получим:

$$n = 2N + 3 \quad (3)$$

Нумерация связей осуществляется аналогично случаю одномерной решетки, путем присвоения каждой связи натурального числа.

Таким образом, для вычисления порога протекания наноленты используются те же методы, алгоритмы и условия, что и для случая одномерной решетки  $R = 2$ . Результаты представленные на рис. 4. можно так же отнести к случаю наноленты.

Для задачи связей была выведена эмпирическим путем формула нахождения числа связей в одномерной решетке, которое зависит от количества узлов в данной решетке и радиуса протекания.

При рассмотрении одномерной задачи связей предложен новый метод решения, который позволяет найти порог перколяции для произвольных числа узлов  $N$  и радиуса протекания  $R$  с соответствующей погрешностью.

Предложенные модели являются универсальными, то есть можно увеличивать число узлов в решетке. При отбрасывании условия 2, можно моделировать случаи произвольного числа узлов в решетке и перколяционного радиуса. Кроме того, данные модели полно описывают случай наноленты. Тем самым показана связь одномерной задачи связей и наноленты для перколяционных решеток. В рамках предложенного подхода возможно также вычисление критических индексов.

#### Список литературы

1. Тарасевич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс: учеб.пособие для вузов / Ю.Ю.Тарасевич. — Изд. 3-е, испр. — М.: Едиториал УРСС, 2003. — 144 с.
2. Шкловский Б.И. Теория протекания и проводимость сильно неоднородных сред / Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос // УФН, 1975. — Т.117., — Вып. 3. — С. 401 — 435.
3. Мартыненко М.В. Моделирование переноса заряженных частиц в низкоразмерных неоднородных системах на основе перколяционного подхода: дис...канд. ф.-м. наук: 05.13.18: защищена 08.02.2002 / Мартыненко М.В. — Красноярск, 2002. — 114 с.
4. Волкова Т.В. Зависимость порога протекания от длины цепочки и от радиуса протекания для модели одномерной перколяции / Т.В. Волкова, М.А. Буреева. // Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник материалов IV Всероссийской конференции молодых учёных (22-25 апреля 2008 г., г. Томск). — С. Томск: ТМЛ-Пресс, 2008. — С. 182 — С. 184.

## ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА. ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ И РАЗВИТИЯ

Каганович Б.М., Зароднюк М.С., Якшин С.В.

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ СО РАН)

*thermo@isem.irk.ru, max@isem.irk.ru, s.yakshin@isem.irk.ru*

Основанная на простых и универсальных принципах сохранения, равновесия и экстремальности равновесная термодинамика обладает исключительно обширной областью приложений и пригодна для решения самых разнообразных по содержанию задач. Но плодотворное применение в каждом конкретном случае требует понимания особенностей моделируемого объекта и искусства их учета. Накапливаемый опыт в анализе сходных по физической или технико-экономической природе проблем, конечно, необходимо обобщать с целью облегчения его использования. Полезность и неизбежность этих обобщений подтверждается возникновением и долговременным успешным развитием прикладных разделов термодинамической теории: технической, химической и биологической термодинамик, – ставших полноценными научными дисциплинами. В такую дисциплину обязательно должны преобразоваться и экологические термодинамические исследования.

Предмет экологической термодинамики в значительной мере выявляется из уже выполненных многочисленных и разнообразных работ по термодинамическому анализу природных и технологических процессов. В учебники по технической термодинамике вошел анализ зависимостей между параметрами (температурой, давлением и влажностью) атмосферного воздуха. Эти зависимости влияют на взаимодействие между воздухом и живой природой и используются при проектировании теплоэнергетических установок и систем кондиционирования воздуха в жилых и производственных помещениях. Формализованное описание параметров интересно и с точки зрения оценки парникового эффекта, его важности в изменении климата. Ведь водяной пар, концентрация которого в атмосфере определяется влажностью воздуха, как и углекислый газ относится к производителям этого эффекта, а его содержание в воздушной среде во много раз больше чем содержание  $\text{CO}_2$ . Начатые со знаменитых "Размышлений о движущей силе огня" Карно [1] вычисления предельных коэффициентов полезного действия теплоисточников и тепловых двигателей позволили оценивать выбросы энергии и вещества, засоряющие окружающую среду.

Принимая во внимание увеличение с развитием вычислительной техники и информационных технологий возможностей термодинамического моделирования, общую задачу проводимого на его основе экологического анализа можно определить как всестороннюю оценку воздействия человека на природу. Оцениваться должны выбросы промышленности, энергетики, транспорта; вырубки лесов; затопление земель; осушение водоемов и другие вредные последствия человеческой деятельности. Моделирование отдельных воздействий содержит математические описания процессов образования, переноса, превращений и проникновения в воздух, землю и водоемы вредных веществ. Для использования разрабатываемых моделей требуется создание соответствующих вычислительных методов.

Основными в экологическом термодинамическом моделировании в ИСЭМ стали развиваемые с середины 80-х годов прошлого века модели экстремальных промежуточных состояний (МЭПС) [2–4]. От традиционных моделей равновесной термодинамики МЭПС отличаются самым назначением. В области достижимости из заданного исходного состояния они позволяют находить не только точку конечного равновесия  $x^{\text{eq}}$ , но и точки, соответствующие предельным значениям интересующих исследователя

свойств изучаемой системы (концентраций полезных или вредных веществ, параметров, термодинамических функций). Вместе с назначением по сравнению с традиционными моделями изменился и характер решаемых задач. Решение замкнутых систем уравнений заменилось поиском экстремумов. В ходе более тридцатилетнего развития МЭПС постоянно совершенствовались используемые и создавались их новые модификации. Из совершенствований следует отметить включение в первые типы МЭПС (с переменными параметрами) учитывающих кинетику ограничений на допустимые на заданных временных интервалах концентрации отдельных реагентов. Это позволило существенно повысить точность проводимых расчетов. Принципиально новыми модификациями стали цепные модели, отображающие в экологических исследованиях либо реальные схемы движения химически реагирующих или подверженных фазовым переходам потоков, либо условные схемы физико-химических процессов. Цепное моделирование дало возможность одновременно использовать преимущества и термодинамического (наличие монотонных характеристических функций), и всегда потенциального, одномерного пространств переменных.

В разработке методов важнейшим изменением явился переход от использования дифференциальных уравнений к использованию математического программирования. Последнее позволяет рассматривать ситуации, когда имеют место дискретность переменных, изменения в ходе моделируемых процессов их закономерностей и условий взаимодействия исследуемой системы с окружающей средой. Способом применения математического программирования в экологическом анализе на основе МЭПС с переменными параметрами стал предложенный Е.Г. Анциферовым алгоритм двухэтапного поиска оптимального решения [2, 3]. Согласно этому алгоритму на первом этапе отыскивается поверхность уровня характеристической термодинамической функции  $G(x_j)$ , на которой расположена соответствующая экстремуму целевой функции точка  $x^{\text{ext}}$ , а на втором – на этой поверхности отыскиваются координаты искомого экстремума. С помощью данного алгоритма были преодолены трудности, связанные с заданием в неявном виде условий монотонности  $G(x)$ .

Успешное применение созданных моделей и методов выявило возможность решения известной проблемы, заключающейся в незамкнутости термодинамики, ее непригодности для определения траекторий необратимых процессов [4, 5]. Решение свелось к отказу от использования общего уравнения траектории и переходу к ее пошаговому построению [4]. Шаги стали применяться конечными, но столь малыми, что оказалась допустимой предпосылка о неизменности на каждом из них закономерностей движения. Это облегчило осуществимость достаточно полного учета индивидуальных особенностей отрезков моделируемого процесса. Реализовать выбранный подход к построению траекторий удобно, одновременно применяя МЭПС для внутришагового моделирования и динамическое программирование для наращивания оптимальных результатов вычислений.

Кратко охарактеризованный математический аппарат в ИСЭМ достаточно широко использовался в экологическом анализе процессов сжигания и переработки органических топлив и воздействия на физико-химические процессы в атмосфере антропогенных выбросов. Преимущества термодинамического моделирования по сравнению с кинетическим – и проведением натурных экспериментов прежде всего проявилось в возможности постановок более общих и сложных решаемых задач. Так, если в "дотермодинамическую эпоху" экологических исследований даже определение концентрации какого-либо одного загрязнителя, образуемого в технологическом или природном процессе, могло потребовать одновременного проведения многих и вычислительных, и

натурных экспериментов, то применение МЭПС позволяет в ходе единого решения поставленной математической задачи находить предельную концентрацию набора наиболее опасных загрязнителей, выделяемых в течение исследуемой реакции. При моделировании процессов загрязнения атмосферы была обоснована сама допустимость применения термодинамического анализа в атмосферной химии. Представление о недопустимости вызывалось знанием о малой скорости химических реакций при относительно низкой температуре атмосферы и недостижимости точки конечного равновесия. Возможность исследования с помощью МЭПС всей области достижимых состояний устранила связанные с применением в рассматриваемом случае химико-термодинамического моделирования трудности.

В еще небольшом накопленном опыте термодинамического описания траекторий стоит выделить два результата. Первый – это определение максимально возможного образования оксидов азота при факельном сжигании канско-ачинского бурого угля [3, 4]. Для построения традиционной кинетической модели данного процесса надо знать полный механизм каждой из составляющих его стадий (пиролиза, горения летучих и горения кокса) и значения кинетических коэффициентов элементарных стадий. При описании пиролиза необходимы сведения о коэффициентах диффузии на поверхности угольной частицы и внутри поверхностного слоя. Измерение или теоретическое определение этих коэффициентов очень сложны и ненадежны. Формализованная запись элементарной кинетики горения летучих оказывается неосуществимой из-за отсутствия точных сведений о составе реакционной смеси, процессах испарения с поверхности частиц и диффузии. С непреодолимыми трудностями связан и кинетический анализ горения кокса, многие стадии которого мало изучены. Составление кинетического блока МЭПС потребовало лишь описаний нескольких лимитирующих реакций суммарного процесса горения.

Вторым интересным результатом стало выявление влияния на загрязнение атмосферы ветроэнергетических установок (ВЭУ) большой мощности (500 и 1000 мВт) [4]. Анализ проводился с помощью условной цепной модели распределения потоков воздуха в районе расположения ВЭУ. Оценка возможного влияния в выполненных предварительных исследованиях свелась к нахождению предельных изменений давления и влажности воздуха. Эти параметры определяют суммарную поверхность капель конденсата, на которой образуются растворы вредных веществ, и соответственно размеры вредных осадков. Решение поставленной задачи осуществлялось в два этапа. На первом рассчитывалось распределение потоков воздуха на принятой схеме и соответствующие этому распределению графики изменения давления по ветвям. На втором для точек с наибольшей величиной этих изменений с помощью параметрической МЭПС определялись значения влажности. Расчеты обнаружили возможность резких колебаний значений искомых величин и, следовательно, серьезного экологического обоснования целесообразных масштабов развития ветроэнергетики.

Успешное экологическое моделирование состояний и траекторий термодинамических систем привело к постановке принципиально новой задачи – построения условной термодинамико-гидродинамической цепной модели распространения и преобразования антропогенных выбросов в воздушном пространстве крупного территориального региона [6]. Эта постановка представляет переход от изучения отдельных явлений и элементов к изучению воздействия человека на природу в целом. При формализации описания данной модели логичной является предпосылка, что потоки загрязнителей не оказывают влияния на движение во много раз превосходящей их по массе несущей "жидкости" – воздуха. Следовательно, при расчете воздухораспределения грязевые потоки учитывать не нужно. Но для этих потоков надо обеспечить соблюдение матери-

альных балансов и в узлах стыковки ветвей воздушной "сети", и узлах притоков и стоков "грязи". Кроме того, требуется определять изменения в составе загрязнителей в результате химических реакций и фазовых переходов на ветвях цепи.

При принятых условиях модель распространения и превращений загрязнителей в воздушных потоках можно записать в виде:

найти 
$$\min \sum_{i=1}^n z_i x_{ai}^{\beta+1} \quad (1)$$

при условиях 
$$Ax_a = Q, \quad (2)$$

$$\sum_{jk} x_{dki} = 0, \quad \sum_{\ell k} x_{dki} = 0, \quad (3)$$

$$x_{di}^{\text{end}} = f(x_{di}^{\text{beg}}), \quad (4)$$

где  $x_a$  – вектор воздушных потоков на ветвях;  $z_i$  – сопротивление  $i$ -й ветви;  $A=[a_{ij}] - (m-1) \times n$  – матрица соединений независимых узлов и ветвей;  $Q$  – вектор внешних притоков и стоков;  $j$  и  $\ell$  – индексы узлов соответственно воздушных и грязевых притоков и стоков;  $x_{dk}$  – вектор потоков  $k$ -го загрязнителя на стыкующихся в узле ветвях;  $x_{di}^{\text{end}}$  и  $x_{di}^{\text{beg}}$  – векторы потоков загрязнителей в конечной и начальной точках  $i$ -й ветви, меняющихся, как отмечалось выше, в ходе физико-химических процессов.

Стремление целевой функции (1) к точке минимума объясняется пассивностью выбранной условной цепи. Свойство пассивности соблюдается в случаях включения в расчетную схему ВЭУ. Ведь энергия, расходуемая на привод ветродвигателей, представляет сопротивление, преодолеваемое воздушным потоком, относящимся к одной из ветвей данной схемы. Уравнения (2) и (3) описывают воздушный и грязевые материальные балансы. Функция (4), определяется с помощью термодинамического анализа, аналогичного проводимому на втором этапе решения отмеченной выше специальной задачи экологичности ветроэнергетики. Дополнительно надо учитывать поступления в рассматриваемую ветвь загрязнителей из окружающей среды и стоки в нее. Предельно упрощенная возможная условная схема цепи, изучаемой на основе модели (1)–(4), приведена на рис.

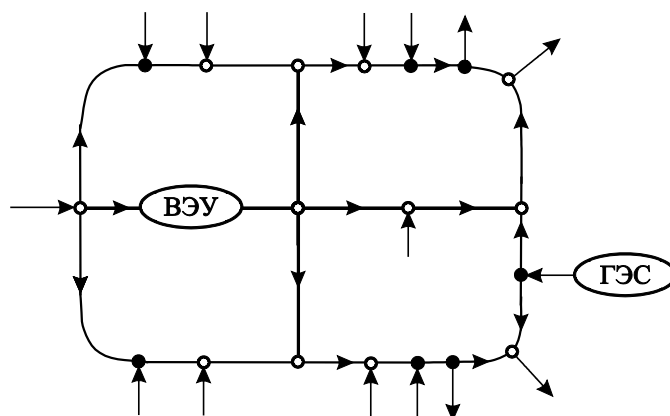


Рис. Условная гидравлическая цепь. ○ – узел соединения "воздушных" ветвей; ● – узел притока (стока) загрязнителей.

В условную схему наряду с непосредственными источниками выбросов (тепловыми электростанциями, котельными, заводами и фабриками, транспортом и др.) включаются косвенные: ветряные и гидравлические (ГЭС) электростанции, влияющие на давление и влажность воздуха и, следовательно, на процессы образования в нем

вредных веществ. Создание модификаций модели (1)–(4), могущих найти широкое практическое применение, связано с серьезными трудностями. К ним относятся: 1) выбор оптимального уровня детализации и составление схем цепей для решения конкретных задач; 2) оценка составов и объемов загрязнителей, выделяемых различными источниками; 3) выполнения термодинамической составляющей вычислительных экспериментов, с учетом большого разнообразия моделируемых физико-химических процессов. Накопленный опыт равновесного анализа позволяет надеяться на успешное решение возникающих проблем.

Текст доклада, видимо, в какой-то мере дает возможность уточнить предмет экологической термодинамики и выделить в нем несколько разделов. 1. Определение предмета (содержания) с учетом внутренних особенностей дисциплины и взаимосвязей со смежными дисциплинами. 2. Основные положения. Их отличия от положений других термодинамических теорий и специальных теорий движения. 3. Используемые физико-математические модели. Возможности и трудности применения. 4. Методы решения задач. Сопоставление аналитических методов и численных методов математического программирования. 5. Примеры применений в фундаментальных и прикладных исследованиях.

#### Список литературы

1. Карно, С. Размышления о движущей силе огня и машинах, способных развивать эту силу / Второе начало термодинамики. – М.; Л. : Гостехиздат, 1934. – С. 17–62.
2. Каганович, Б.М. Эффективность энергетических технологий: термодинамика, экономика, прогнозы / Б.М. Каганович, С.П. Филиппов, Е.Г. Анциферов. – Новосибирск : Наука, 1989. – 256 с.
3. Горбань, А.Н. Термодинамические равновесия и экстремумы: Анализ областей достижимости и частичных равновесий в физико-химических и технических системах / А.Н. Горбань, Б.М. Каганович, С.П. Филиппов. – Новосибирск : Наука, 2001. – 296 с.
4. Каганович, Б.М. Равновесная термодинамика. Проблемы и перспективы. Вторая редакция / Б.М. Каганович. – Саарбрюкен: LAP Lambert Academic Publishing, 2015. – 239 с.
5. Каганович, Б.М. Проблема незамкнутости термодинамики в системном энергетическом анализе / Б.М. Каганович, Н.И. Воропай, В.А. Стенников. // Изв. Ан. Энергетика. – 2016. – № 5. – С. 57–66.
6. Kaganovich, B.M. Thermodynamic analysis of environmental problems of energy / B.M. Kaganovich, M.S. Zarodnyuk, S.V. Yakshin. // MATEC Web Conf. – 2017. – N 115. – 4 p. E-print: <https://doi.org/10.1051/matecconf/201711506009>

## СПИСОК ДОКЛАДОВ

|                                                                                                                                                                  |    |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| М.Н. Арасланова, Н.И. Косарев<br>АНАЛИЗ ФУНКЦИЙ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФОТОНОВ ПО<br>ЧАСТОТАМ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ РАССЕЯНИЯ<br>ИЗЛУЧЕНИЯ ОПТИЧЕСКИ ПЛОТНЫМИ СРЕДАМИ | 3  |
| М.Н. Арасланова, Н.И. Косарев<br>РАСЧЕТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ<br>ПАРАМИ НАТРИЯ ПРИ ЧАСТИЧНОМ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИИ<br>ПО ЧАСТОТАМ            | 8  |
| Базуев В.М., Удодов В.Н., Таскин А.Н.<br>ДИАГРАММЫ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ИЗИНГА<br>ДЛЯ АДСОРБЦИИ НА НАНОКЛАСТЕРАХ                                   | 14 |
| Н.М. Богатов, М.С. Коваленко<br>МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ<br>ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ<br>НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ ПРОТОНАМИ           | 17 |
| А.В.Бондарев, И.Л.Батаронов<br>МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ<br>АМОРФНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ RE-GD                                             | 22 |
| А.Б. Гладышев, В.Н. Ратушняк, Е. А. Вейсов, М. А. Голубятников<br>КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ ЛОКАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ<br>НАВИГАЦИИ НА ОСНОВЕ ПСЕВДОСПУТНИКОВ                   | 27 |
| М. А. Голубятников<br>КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ НАВИГАЦИОННОГО ПОЛЯ ЛОКАЛЬНОЙ<br>СИСТЕМЫ НАВИГАЦИИ НА ОСНОВЕ ПСЕВДОСПУТНИКОВ                                           | 32 |
| Р.Н.Голых<br>МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ<br>МАТЕРИАЛЬНЫХ СРЕД В ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫХ<br>УЛЬТРАЗВУКОВЫХ ПОЛЯХ                                     | 37 |
| Д.М. Гохфельд<br>НЕРАВНОВЕСНАЯ НАМАГНИЧЕННОСТЬ СВЕРХПРОВОДНИКОВ ПРИ<br>РАЗНЫХ МАСШТАБАХ И ТЕМПЕРАТУРАХ                                                           | 43 |
| Г.В.Дружинин, Н.М.Бодунов<br>РЕДУКЦИЯ НЕКОТОРЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ К<br>СИСТЕМАМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ                                | 47 |
| Г.В.Дружинин, Н.М.Бодунов<br>АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОБТЕКАНИЯ ТЕЛ ВЯЗКИМ ПОТОКОМ<br>ЖИДКОСТИ С УЧЕТОМ ВИХРЕВОЙ НАПРЯЖЕННОСТИ                                    | 52 |

|                                                                                                                                                                                                          |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| В.С. Казаков, В.А. Шмиголь<br>ВОПРОСЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ<br>НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛООБМЕНА В НАСАДКАХ<br>РЕГЕНЕРАТОРОВ                                                                  | 57  |
| Н.И. Косарев<br>ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОГЛОЩЕНИЯ<br>СОЛНЕЧНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СФЕРИЧЕСКОМ ПЛАЗМЕННОМ<br>ШАРЕ, ВРАЩАЮЩЕМСЯ ВОКРУГ ОСИ СИММЕТРИИ                                                            | 63  |
| Н.И. Косарев<br>МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ СОЛНЕЧНОГО СВЕТА ПЛАЗМЕННЫМ<br>ОБЛАКОМ ПРИ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ЧЕРЕДОВАНИИ РАСШИРЕНИЯ И<br>СЖАТИЯ ВЕЩЕСТВА                                                             | 69  |
| М.А. Курако, С.В. Кириллова, А.С. Кругляков, К.В. Симонов, Т.В. Черепанова<br>КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ МОРФОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МЕДИЦИНСКИХ<br>ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ ШИАРЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ                          | 75  |
| Н.И. Лебовка, Ю.Ю.Тарасевич, В.А. Гигиберия, Н.В. Выгорницкий,<br>А.С. Бурмистров, В.В. Лаптев<br>ОБРАЗОВАНИЕ СТРУКТУР В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ<br>СТЕРЖНЕОБРАЗНЫХ ЧАСТИЦ                                    | 80  |
| А.Н. Мацулев, А.А. Кабанов, К.В. Симонов<br>ДОЛГОВРЕМЕННАЯ ПАМЯТЬ ВО ВРЕМЕННЫХ РЯДАХ, ОПИСЫВАЮЩИХ<br>ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЯ                                                                                       | 84  |
| С.И.Полукеев, В.А.Гавричков, С.Г.Овчинников<br>ЭФФЕКТЫ ОПТИЧЕСКИХ ВНУТРИЦЕЛЕВЫХ ПЕРЕХОДОВ В<br>СУПЕРОБМЕННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ В $\text{La}_2\text{CuO}_4$ ,<br>С НЕРАВНОВЕСНЫМИ ФОТОВОЗБУЖДЁННЫМИ ЦЕНТРАМИ | 89  |
| А.В. Попов<br>КОНДЕНСАЦИЯ КЛАСТЕРОВ ЛИТИЯ                                                                                                                                                                | 93  |
| В.А. Попов<br>КВАНТОВАЯ МОДЕЛЬ НАРОДОНАСЕЛЕНИЯ                                                                                                                                                           | 99  |
| Г.А. Самигулина, Ж.А. Масимканова<br>ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ НОВЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ<br>ПРЕПАРАТОВ НА ОСНОВЕ АЛГОРИТМОВ РОЕВОГО ИНТЕЛЛЕКТА И<br>ИММУННОСЕТЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ                                | 104 |
| В.П.Сизиков, В.И. Разумов<br>КАКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ АКТУАЛИЗИРУЮТ РАЗВИТИЕ?                                                                                                                                  | 110 |
| С.А. Симинчук, Н.И. Косарев<br>ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ИОНИЗАЦИИ И                                                                                                                               |     |

|                                                                                                                                                                                          |     |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| РЕКОМБИНАЦИИ МЕЗОСФЕРНОГО НАТРИЯ                                                                                                                                                         | 114 |
| С.А. Субботин, А. В. Корниенко, А.А. Олейник<br>НЕЙРОСЕТЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОСВЯЗИ ПАРАМЕТРОВ<br>РЕЖИМОВ ИСПЫТАНИЯ ГАЗОТУРБИННЫХ АВИАДВИГАТЕЛЕЙ                                      | 118 |
| Титов А.К., Хренников Д.Е., Ершов А.Е., Карпов С.В.<br>СВЕТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ, ПОРОЖДАЕМЫЕ ГИГАНТСКИМИ<br>АТМОСФЕРНЫМИ БОЛИДАМИ                                                                | 123 |
| В.Н. Удодов, А.А. Попов<br>КИНЕТИЧЕСКИЕ ИНДЕКСЫ ДЛЯ СВЕРХТЕКУЧЕГО ГЕЛИЯ                                                                                                                  | 131 |
| Хмелёв В.Н., Голых Р.Н., Педдер В.В., Нестеров В.А., Боброва Г.А.<br>МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТАКТНОЙ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ЭКСТРАКЦИИ<br>РАНЕВОГО СОДЕРЖИМОГО И СОЗДАНИЕ СРЕДСТВ<br>ДЛЯ ЕГО РЕАЛИЗАЦИИ | 137 |
| Р.А. Чиженкова<br>АНАЛИЗ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО ОБЛАСТИ ЗНАНИЯ<br>"МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, МЕХАНИКА", ПОДДЕРЖАННЫХ<br>РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ          | 144 |
| О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль<br>ГРАДИЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ТЕПЛОВОГО ПОЛЯ<br>НА ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ<br>ПЕРЕОХЛАЖДЕННОГО РАСПЛАВА                                    | 150 |
| Т.В. Якунина, В.Н. Удодов<br>СВЯЗЬ ОДНОМЕРНОЙ ЗАДАЧИ СВЯЗЕЙ НА ПЕРКОЛЯЦИОННЫХ<br>РЕШЁТКАХ И НАНОЛЕНТАХ                                                                                   | 156 |
| Каганович Б.М., Зароднюк М.С., Якшин С.В.<br>ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА. ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ<br>И РАЗВИТИЯ                                                                                | 161 |

### АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

| Участник                            | Адрес                                                                                                                             | Стр.   |
|-------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| Арасланова Мария<br>Нафигулловна    | 660025, Красноярск, пр. им. газеты «Красноярский рабочий», 95, Сибирский федеральный университет<br>E-mail: aras@mail.ru          | 3, 8   |
| Базуев Василий<br>Михайлович        | 655017, Абакан, ФГБОУ ВО «ХГУ им. Н.Ф. Катанова»<br>E-mail: bazuev.vasilij@yandex.ru                                              | 14     |
| Батаронов Игорь<br>Леонидович       | 394026, Воронеж, Московский проспект 14,<br>Воронежский государственный технический университет<br>E-mail: ibat@mail.ru           | 27     |
| Боброва Галина<br>Алексеевна        | 659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ<br>E-mail: romangl90@gmail.com              | 137    |
| Богатов Николай<br>Маркович         | 350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266<br>E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru    | 17     |
| Бодунов Николай<br>Михайлович       | 420111, г. Казань, ул.К.Маркса, д.10, КГТУ-КАИ, кафедра ПЛА, (843) 236-52-42, 231-03-25, 231-03-16<br>E-mail: bodunov_nm@mail.ru  | 47, 52 |
| Бондарев Алексей<br>Владимирович    | 394026, Воронеж, Московский проспект 14,<br>Воронежский государственный технический университет<br>E-mail: bondarev_a_v@mail.ru   | 27     |
| Бурмистров Андрей<br>Сергеевич      | 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а,<br>Астраханский государственный университет<br>E-mail: yu.tarasevich@gmail.com           | 80     |
| Вейсов Евгений<br>Алексеевич        | 660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79,<br>Сибирский Федеральный Университет<br>E-mail: eveisov@sfu-kras.ru                     | 27     |
| Выгорницкий Николай<br>Викторович   | Украина, 01601, г. Киев, ул. Владимирская, 64/13,<br>Национальный университет им. Тараса Шевченко<br>E-mail: thecotus@gmail.com   | 80     |
| Гавричков Владимир<br>Александрович | 660036, Красноярск, ул. Академгородок, 50,<br>строение 43, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН<br>E-mail: gav@iph.krasn.ru | 89     |
| Гигиберия Владимир<br>Аркадьевич    | Украина, 01601, г. Киев, ул. Владимирская, 64/13,<br>Национальный университет им. Тараса Шевченко<br>E-mail: thecotus@gmail.com   | 80     |
| Гладышев Андрей<br>Борисович        | 660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79,<br>Сибирский федеральный университет (СФУ)<br>E-mail: a-ghonass@yandex.ru               | 27     |

|                                 |                                                                                                                                                                     |                   |
|---------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| Голубятников Максим Андреевич   | 660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский Федеральный Университет<br>E-mail: maxim.gol500@mail.ru                                                         | 27 32             |
| Голых Роман Николаевич          | 659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ<br>E-mail: romangl90@gmail.com                                                | 37, 137           |
| Гохфельд Денис Михайлович       | 660036, Красноярск, Академгородок, Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН<br>E-mail: gokhfeld@iph.krasn.ru                                                     | 43                |
| Дружинин Георгий Владимирович   | 420111, г. Казань, ул.К.Маркса, д.10, КГТУ-КАИ, кафедра ПЛА, (843) 236-52-42, 231-03-25, 231-03-16<br>E-mail: druzhinin.1944@mail.ru                                | 47, 52            |
| Ершов Александр Евгениевич      | 660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН<br>E-mail: alexander.ershov@icm.krasn.ru                                           | 123               |
| Зароднюк Максим Сергеевич       | 664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН<br>E-mail: max@isem.sei.irk.ru                                        | 161               |
| Кабанов Алексей Анатольевич     | 630090 Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 6, ИВТ СО РАН<br>E-mail: weller86@inbox.ru                                                                          | 84                |
| Каганович Борис Моисеевич       | 664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН<br>E-mail: thermo@isem.sei.irk.ru                                    | 161               |
| Казаков Валерий Сергеевич       | 241035, г. Брянск, ул.50-лет Октября, 7, Брянский государственный технический университет<br>E-mail: pvk_mail@list.ru                                               | 57                |
| Карпов Сергей Васильевич        | 660036, Красноярск, Академгородок, Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН<br>E-mail: karpov@iph.krasn.ru                                                       | 123               |
| Кириллова Светлана Владимировна | 660074, г. Красноярск, Сибирский федеральный университет, Институт космических и информационных технологий, т. 8-923-285-67-12<br>E-mail: svkirillova2009@yandex.ru | 75                |
| Коваленко Максим Сергеевич      | 350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266<br>E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru                                      | 17                |
| Корниенко Александр Викторович  | Украина, 69063, г.Запорожье, ул.Жуковского, 64, Запорожский национальный технический университет<br>E-mail: al.korn95@gmail.com                                     | 118               |
| Косарев Николай Иванович        | 660025, Красноярск, пр. им. газеты «Красноярский рабочий», 95, Сибирский федеральный университет<br>E-mail: kosarev_nikolai@mail.ru                                 | 3, 8, 63, 69, 114 |

|                                   |                                                                                                                                                                   |     |
|-----------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Кроль Дмитрий<br>Григорьевич      | Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т<br>Октября, 48, Гомельский государственный<br>технический университет имени П.О. Сухого<br>E-mail: dk_zaoch@gstu.by  | 150 |
| Кругляков Алексей<br>Сергеевич    | 660074, г. Красноярск, Сибирский федеральный<br>университет, Институт космических и<br>информационных технологий, т. 8-923-285-67-12<br>E-mail: mkurako@gmail.com | 75  |
| Курако Михаил<br>Александрович    | 660074, г. Красноярск, Сибирский федеральный<br>университет, Институт космических и<br>информационных технологий, т. 8-923-285-67-12<br>E-mail: mkurako@gmail.com | 75  |
| Лаптев Валерий<br>Викторович      | 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 16, Астраханский<br>государственный технический университет<br>E-mail: Laptev@ilabsltd.com                                    | 80  |
| Лебовка Николай<br>Иванович       | 03142, Украина, г. Киев, бульв. Академика<br>Вернадского, 42, Институт биокolloидной химии<br>им. Ф. Д. Овчаренко НАН Украины<br>E-mail: lebovka@gmail.com        | 80  |
| Масимканова Жазира<br>Ауезбеккызы | 050010, Республика Казахстан, г. Алматы, ул.<br>Пушкина, 125, Институт информационных и<br>вычислительных технологий МОН РК<br>E-mail: masimkanovazh@gmail.com    | 104 |
| Мацулев Александр<br>Николаевич   | 660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50,<br>стр. 24, Институт химии и химической технологии<br>СО РАН<br>E-mail: matsulev@icct.ru                     | 84  |
| Нестеров Виктор<br>Александрович  | 659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский<br>технологический институт (филиал) АлтГТУ<br>E-mail: nva@bti.secna.ru                                              | 137 |
| Овчинников Сергей<br>Геннадьевич  | 660036, Красноярск, ул. Академгородок, 50,<br>строение 43, Институт физики им. Л.В. Киренского<br>СО РАН<br>E-mail: sgo@iph.krasn.ru                              | 89  |
| Олейник Андрей<br>Александрович   | Украина, 69063, г. Запорожье, ул. Жуковского, 64,<br>Запорожский национальный технический<br>университет<br>E-mail: olejnikaa@gmail.com                           | 118 |
| Педдер Валерий<br>Викторович      | 644034, Омск, ул. Долгирева, 117А, ООО «НПП<br>«Метромед»<br>E-mail: metromed@mail.ru                                                                             | 137 |
| Полукеев Семен<br>Игоревич        | 660036, Красноярск, ул. Академгородок, 50,<br>строение 43, Институт физики им. Л.В. Киренского<br>СО РАН<br>E-mail: sp992@yandex.ru                               | 89  |

|                                  |                                                                                                                                                                   |        |
|----------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| Попов Андрей<br>Анатольевич      | 655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский<br>государственный университет им. Н.Ф. Катанова<br>(ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163<br>E-mail: udodovv@hotmail.com        | 131    |
| Попов Андрей<br>Валерьевич       | 656038, Барнаул, пр. Ленина, 46, Алтайский<br>государственный технический университет им. И.И.<br>Ползунова<br>E-mail: Popov.Barnaul@mail.ru                      | 93     |
| Попов Валерий<br>Андреевич       | 656038, Барнаул, пр. Ленина, 46, Алтайский<br>государственный технический университет им. И.И.<br>Ползунова<br>E-mail: PVA379@mail.ru                             | 99     |
| Разумов Владимир<br>Ильич        | Омский государственный университет им. Ф.М.<br>Достоевского, Россия, 644077, Омск, проспект Мира<br>55-а<br>E-mail: razumov@omsu.ru                               | 110    |
| Ратушняк Василий<br>Николаевич   | 660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79,<br>Сибирский Федеральный Университет<br>E-mail: Oborona-81@ya.ru                                                        | 27     |
| Самигулина Галина<br>Ахметовна   | 050010, Республика Казахстан, г. Алматы, ул.<br>Пушкина, 125, Институт информационных и<br>вычислительных технологий МОН РК<br>E-mail: galinasamigulina@mail.ru   | 104    |
| Сизиков Виктор<br>Петрович       | Омский государственный университет путей<br>сообщения, 644046, Россия, г. Омск, пр. Маркса, 35.<br>Т./ф.: (3812) 31-42-19.<br>E-mail: v_p_sizikov@mail.ru         | 110    |
| Симинчук Светлана<br>Анатолевна  | 660025, Красноярск, пр. им. газеты «Красноярский<br>рабочий», 95, Сибирский федеральный университет<br>E-mail: swet0076@mail.ru                                   | 114    |
| Симонов Константин<br>Васильевич | 660036, Красноярск, Академгородок, Институт<br>вычислительного моделирования СО РАН, т.<br>89135954902<br>E-mail: simonovkv@icm.krasn.ru                          | 75, 84 |
| Субботин Сергей<br>Александрович | Запорожский национальный технический<br>университет, Украина, 69063, Запорожье, ул.<br>Жуковского, 64, т.: +38-(097) 355-61-55<br>E-mail: subbotin.csit@gmail.com | 118    |
| Тарасевич Юрий<br>Юрьевич        | 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а,<br>Астраханский государственный университет<br>E-mail: yu.tarasevich@gmail.com                                           | 80     |
| Таскин Андрей<br>Николаевич      | 655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский<br>государственный университет им. Н.Ф. Катанова<br>(ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163<br>E-mail: udodovv@hotmail.com        | 14     |

|                                    |                                                                                                                                                                             |                    |
|------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|
| Титов Андрей<br>Константинович     | 660037, г. Красноярск, пр. имени газеты<br>Красноярский Рабочий, 31, Сибирский<br>государственный аэрокосмический университет<br>E-mail: andtit2001@gmail.com               | 123                |
| Удодов Владимир<br>Николаевич      | 655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский<br>государственный университет им. Н.Ф. Катанова<br>(ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163<br>E-mail: udodovv@hotmail.com                  | 14,<br>131,<br>156 |
| Хмелёв Владимир<br>Николаевич      | 659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский<br>технологический институт (филиал) АлтГТУ<br>E-mail: vnh@bti.secna.ru                                                        | 137                |
| Хренников Даниил<br>Евгеньевич     | 660037, г. Красноярск, пр. имени газеты<br>Красноярский Рабочий, 31, Сибирский<br>государственный аэрокосмический университет<br>E-mail: karpov@iph.krasn.ru                | 123                |
| Черепанова Татьяна<br>Валентиновна | 660022, г. Красноярск, ул. Партизана Железняка, 1,<br>Красноярский государственный медицинский<br>университет имени проф. В. Ф. Войно-Ясенецкого<br>E-mail: grakova@list.ru | 75                 |
| Чиженкова Рогнеда<br>Александровна | Институт биофизики клетки РАН, г. Пущино<br>Московской области, 142290, Тел.: (4967)739-196<br>E-mail: chizhenkova@mail.ru                                                  | 144                |
| Шабловский Олег<br>Никифорович     | Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т<br>Октября, 48, Гомельский государственный<br>технический университет имени П.О. Сухого<br>E-mail: shablovsky-on@yandex.ru     | 150                |
| Шмиголь Вячеслав<br>Александрович  | 241035, г. Брянск, ул.50-лет Октября, 7, Брянский<br>государственный технический университет<br>E-mail: pvk_mail@list.ru                                                    | 57                 |
| Якунина Татьяна<br>Валерьевны      | 655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский<br>государственный университет им. Н.Ф. Катанова<br>(ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163<br>E-mail: tatav19@mail.ru                      | 156                |
| Якшин Сергей<br>Владимирович       | 64033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем<br>энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН<br>E-mail: s.yakshin@sei.irk.ru                                            | 161                |

*Научное издание*

## **Моделирование неравновесных систем—2017**

Материалы XX Всероссийского семинара 6 – 8 октября 2017 г.

Редактор М.Г. Садовский  
Компьютерная верстка: М.Ю. Сенашова

Подписано в печать «6» сентября 2017 г. Формат 60 × 90/8. (А4)  
Бумага офсетная. Печать плоская.  
Усл. печ. л. 13,56. Уч.-изд. л. 11,81.  
Тираж 500 экз. Заказ 14

Институт вычислительного моделирования СО РАН  
660036, Красноярск, Академгородок, 50, стр. 44  
Тел/факс (391) 2907476  
<http://icm.krasn.ru>

---

Отпечатано в типографии ИВМ СО РАН  
660036, Красноярск, Академгородок