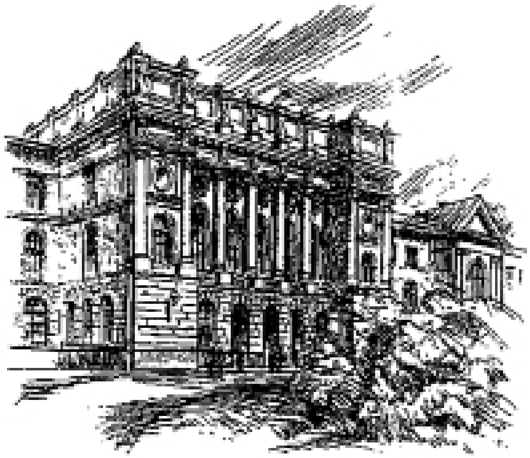
МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

ТОМ 11, № 3

2018

Издательство Политехнического университета
Санкт-Петербург
2018

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

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

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

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

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

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

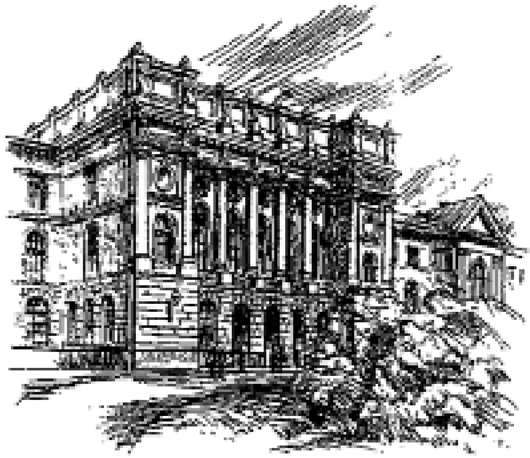
Журнал включен в базу данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте http://www.elibrary.ru

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

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

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics and Mathematics

VOLUME 11, No. 3
2018

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2018

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS

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

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

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

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

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

The journal is in the Russian Science Citation Index (RSCI) database.
© Scientific Electronic Library (http://www.elibrary.ru).

Address: 195251 Politekhnicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.
Phone: (812) 294-22-85.
http://ntv.spbstu.ru/physics

Содержание

Астрофизика

Contents

Astrophysics

DOI: 10.18721/JPM.11301
UDC 53.082.63

THE WOOD IN THE INHOMOGENEOUS TEMPERATURE FIELD: ESTIMATION OF CELLULOSE STRUCTURE PARAMETER FLUCTUATIONS

N.N. Matveev[1], Hoai Thuong Nguyen[2], N.S. Kamalova[1], N.Yu. Evsikova[1], A.S. Chernykh[1]

[1]Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G.F. Morozov, Voronezh, Russian Federation;

[2] Industrial University of Ho Chi Minh City, Vietnam

In the paper, the cellulose as a fiber-forming component of wood (natural composite) has been studied. The authors put forward a technique for estimating fluctuations of cellulose microstructure in the wood through monitoring the potential difference of the thermal polarization that arises in the samples placed into an inhomogeneous temperature field with a constant temperature gradient. Formalized simulation was used for an analysis of experimental results. The proposed technique made it possible to establish that the percent of the large-sized cellulose crystallites in the wood grew with increasing smoothly temperature gradient. Similar dynamics is not typical of linear crystalline polymers whose polarization decreases with growing temperature. The obtained effect can be assigned to the fact that natural wood exhibits heterogeneous structure.

Key words: microstructure, crystallite, composite, cellulose macromolecule, synthesized material

Citation: N.N. Matveev, H.T. Nguyen, N.S. Kamalova, N.Yu. Evsikova, A.S. Chernykh, The wood in the inhomogeneous temperature field: Estimation of cellulose structure parameter fluctuations, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 9–16. DOI: 10.18721/JPM.11301

ОЦЕНКА ФЛУКТУАЦИИ СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ В ДРЕВЕСИНЕ, ПОМЕЩЕННОЙ В НЕОДНОРОДНОЕ ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ

Н.Н. Матвеев[1], Х.Т. Нгуен[2], Н.С. Камалова[1], Н.Ю. Евсикова[1], А.С. Черных[1]

[1]Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г.Ф. Морозова, г. Воронеж, Российская Федерация;

[2]Индустриальный университет Хошимина, г. Хошимин, Вьетнам

В работе исследован волокнообразующий компонент древесины (природный композит) – целлюлоза. С целью оценки флуктуации микроструктуры целлюлозы в древесине авторы предлагают использовать мониторинг разности потенциалов термической поляризации объекта, которая возникает в образцах, помещенных в неоднородное температурное поле с постоянным градиентом температуры. Для анализа результатов эксперимента использовалось формализованное моделирование. Предложенный метод анализа позволил установить, что в целлюлозе доля кристаллитов большого размера растет с плавным увеличением градиента температуры. Подобная динамика не характерна для линейных кристаллизующихся полимеров, поляризация которых снижается с повышением температуры. Полученный эффект авторы связывают с разнородной структурой дерева.

Ключевые слова: микроструктура, кристаллит, композит, макромолекула целлюлозы, синтезированный материал

Ссылка при цитировании: Матвеев Н.Н., Нгуен Х.Т., Камалова Н.С., Евсикова Н.Ю., Черных А.С. Оценка флуктуации структурных параметров целлюлозы в древесине, помещенной в неоднородное температурное поле // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 9–16. DOI: 10.18721/JPM.11301

Introduction

Creating synthesized bioplastics with highly resistant physical properties such as strength, surface hardness and permissible hydrophobicity is one of the most urgent tasks in technology [1 – 8]. The arboform exemplifies these materials; it can be obtained through the synthesis from natural cellulose and “sulphate soap” released during the paper production process. The physical characteristics of these synthesized materials are determined by the orderliness of their fiber-forming component microstructure, as cellulose microstructure in our case. In this regard, the development of nondestructive methods for estimating microstructure fluctuations in the fiber-forming component of composite materials always attracts attention of the scientific community.

It is well known that wood is naturally occurring composite material, and its main components are partially crystalline cellulose and lignin. Cellulose is a stereoregular syndiotactic polymer [9 – 12]. The macromolecules of the fiber-forming wood component (cellulose) are schematically arranged in the form of a coiled tape with a cross-section of 0.39 × 0.83 nm. Molecular chains of cellulose are packed in a mean length of 15 – 17 nm with a «loosening» section of 2.5 – 3.0 nm in length following. In addition, hollows of 0.5 – 1.0 nm are always located inside amorphous regions [13]. Thus, the packaging process of cellulose macromolecules is characterized by the alternation of crystalline and amorphous phases and the presence of pores in microfibrils in the wood. The peculiarities of this structure allow us to assume that the response of biocomposite such as the wood substance to the change in external factors depends on the concentration of crystallites in the fiber-forming cellulose and their physical properties.

In the present work, a formalized model is proposed for estimating the fluctuations in the microstructure of cellulose in the wood on exposure to external nonuniform temperature fields. For this purpose, the concentration of cellulose crystallites has been chosen as the fluctuation parameter.

Experimental results

The temperature-scanning method was used for experimental investigation as described in detail in Refs. [14, 15]. In this method, an inhomogeneous temperature field providing a constant temperature gradient ∇T was applied to a thin-layer composite sample, and a thermal-origin electric field evolving as a result. The origin of this electric field in the wood can be bound up with the structural difference between cellulose and lignin and with pyroelectric and piezoelectric properties of fiber-cellulose crystallites as well [15]. The potential difference (PD) across this field depends on the degree of crystallinity of cellulose and is measured with controlled accuracy using electrical measuring instruments.

To determine the response of cellulose in the wood to the applied inhomogeneous temperature field, studies in fluctuations of the PD in the samples were carried out. The samples were prepared from birch wood containing up to 40 % moisture. The sample thickness l_0 was

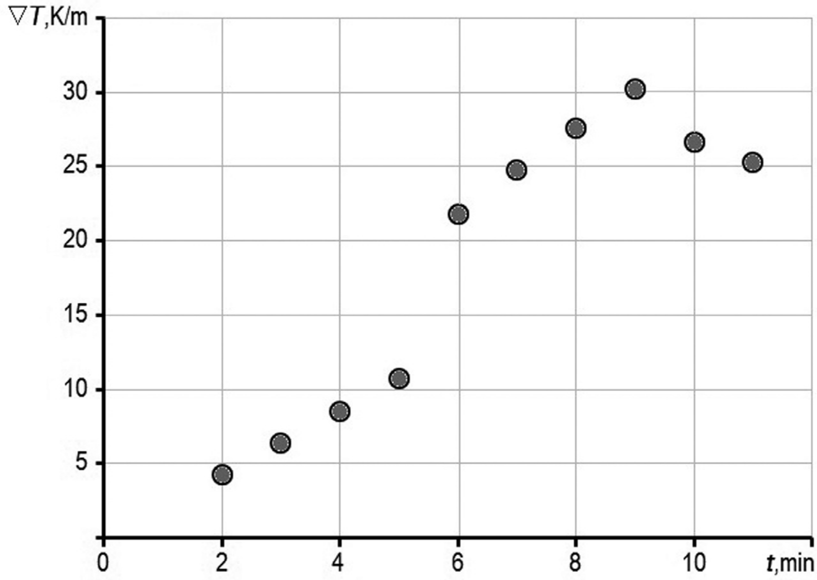


Fig. 1. The thermal-gradient dynamics for a wood thin layer during the test process

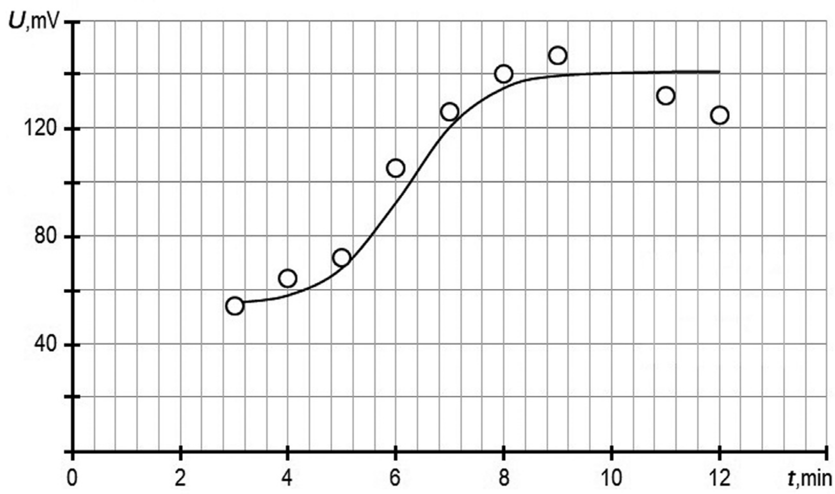


Fig. 2. The experimental (curcles) and simulated (the solid line) PD-time relation for a wood thin layer

about 100 μm. A special measuring cell was used to change the temperature gradient in the wood layer as given in Ref. [15]. Thin sections of the wood were placed between massive brass rodes with the lower one heated. Therefore, the temperature gradient in the wood layer was controlled by the heating rate of the heated lower electrode. The PD was initially removed from the electrodes.

Fig. 1 shows the dynamics of the temperature gradient in a thin layer of wood during the tests. Fig. 2 shows the experimental data for the measurement of the corresponding PD presented in the form of circles. Comparing the two figures, we can affirm that the PD correlates with the changes in the temperature gradient in the layer as established in various studies [14 – 16]. Thus, the temperature-scanning method makes it possible to control the value of the temperature gradient in the layer using electrical measuring instruments. In this regard, we propose to estimate the average size of cellulose crystallites by analyzing the obtained data on the basis of a formalized model [17–20].

Justification of the formalized model

It is known that the relative change in the concentration n of cellulose crystallites depends on the relative rate of a crystal growth under smoothly changing external conditions and characterized by the rate G [16]:

$$\frac{dn}{n} = Gdt. \tag{1}$$

However, the crystal growth causes the diffusion of non-crystallizing fragments. This process is characterized by the coefficient k_D [16]:

$$\frac{dn}{dt} = -k_D \frac{dn}{dx}. \tag{2}$$

These two processes (1) and (2) balance each other in a stationary state. Therefore, the equations can be transformed to the form:

$$\frac{dn}{dx} = (-G/k_D)n. \tag{3}$$

The exponential function

$$n = n_0 \exp(-\Delta x/x_k)$$

is a solution of Eq. (3), where n_0 is the concentration of crystallites near crystallization centers, $x_k = k_D/G$ is the average size of the fiber-forming component crystallite.

This average size is determined when the concentration of crystallites located at a distance equal to crystallite size decreases by e times as compared to n_0.

It should be noted that these concepts of crystallites growth do not take into account the peculiarity of experimental conditions. The constant temperature gradient creates inhomogeneous growth conditions along the thickness of a sample. According to the obtained experimental results we can assume that the average size of the cellulose crystallite x_k depends on the increment of the crystallite concentration as follows:

$$x_k(n) = x_{k0}(1 + \chi\Delta n), \tag{4}$$

where χ is a coefficient that characterizes the crystallinity degree of the cellulose in a sample, x_{k0} is the initial value of x_k.

The solution of differential Eq. (3) taking Eq. (4) into account is transformed to the following form:

$$\frac{\Delta n}{n_0} = \frac{\exp(-\Delta x/x_k)}{(1 + \chi \exp(-\Delta x/x_k))n_0}, \tag{5}$$

where $\Delta x = \alpha l_0^2 \nabla T(t)$ is the value of the total compression of cellulose crystallites in a sample with the thickness l_0 during the expansion of lignin, α is the coefficient of thermal expansion of lignin.

According to Ref. [21] the ratio $\Delta n / n_0$ equals the relative change of crystallinity degree of cellulose in the wood. As reported in Ref. [22], the PD appeared in the wood on exposure to an inhomogeneous temperature field is directly proportional to crystallinity degree of cellulose. Thus, the relative change in PD in the sample within the framework of this approach is simulated by the following relationship:

$$\frac{U - U_0}{U_0} = k_U \frac{\Delta n}{n_0} = \frac{k_U \exp(-\Delta x/x_k)}{(1 + \chi \exp(-\Delta x/x_k))n_0}, \tag{6}$$

where k_U is a parameter that depends on the percolation features of thermal polarization processes occurred in the composite, U_0 is the PD initial value.

Finally, we obtain the relation for estimating the PD:

$$U = U_0 \left\{1 + \frac{k_U \exp(-\alpha l_0^2 \nabla T/x_k)}{[1 + \chi \exp(-\alpha l_0^2 \nabla T/x_k)]n_0}\right\}. \tag{7}$$

Eq. (7) connects the PD in the sample on exposure to an inhomogeneous temperature field with the fluctuations in external conditions such as the changes in $\nabla T(t)$ and the features of fiber-forming microstructure (x_k, χ) and filler (α).

Furthermore, Eq. (7) is the basic axiom of the formalized model for the method of estimating the response of natural component-containing microstructure to fluctuations of external conditions in general and temperature in particular. The model experiment was implemented by the linear regression method using Excel spreadsheets. The results are presented by the solid line in Fig. 2. Comparing the results of the real and simulated experiments (see

Fig. 2) we can conclude that it is possible to estimate the values of χ, x_k and k_U parameters from the results of physical and simulated experiments with controlled accuracy.

Summary

Thus, it has been shown that the temperature-scanning method using elements of formalized simulation makes it possible to estimate the fluctuations of supramolecular structure of the fiber-forming component in a composite when changing the external conditions. Consequently, it can also be used to study the microstructure of arboforms and synthesized plastics.

Furthermore, analysis of the PD dynamics with a smoothly increasing temperature gradient suggests that the fraction of cellulose crystallites with a large size in the wood grows with increasing the temperature gradient value. It should be noted that similar dynamics do not characterize linear crystallizing polymers, in which polarization decreases with increasing temperature. Perhaps, the considered effect is due to interaction between wood components and the cellulose characterized by the complexity of supramolecular structure.

The work was supported by the grant «Development of Innovative Ideas "Growth Points – 2017"» of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G.F. Morozov».

Работа выполнена при финансовой поддержке Воронежского государственного лесотехнического университета имени Г.Ф. Морозова (грант "Развитие инновационных идей «Точки роста – 2017»").

REFERENCES

[1] **A.M. Kamalov, M.E. Borisova,** The influence of moisture on charge relaxation in modified polyimide films, St. Petersburg Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (2) (2016) 188–192.

[2] **A. Abdulkhani, J. Hosseinzadeh, S. Dadashi, M. Mousavi,** A study of morphological, thermal, mechanical and barrier properties of PLA based biocomposites prepared with micro and nano sized cellulosic fibers, Cellulose Chemistry and Technology. 49 (7–8) (2015) 597–605.

[3] **Yu.M. Spivak, V.A. Moshnikov,** Features of photosensitive polycrystalline PbCdSe layers with a network-like structure, Journal of Surface Investigation. X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 4(1) (2010) 71–76.

[4] **E.V. Maraeva, V.A. Moshnikov, Yu.M. Tairov,** Models of the formation of oxide phases in nanostructured materials based on lead chalcogenides subjected to treatment in oxygen and iodine vapors, Semiconductors. 47(10) (2013) 1422–1425.

[5] **D. Lingam, A.R. Parikh, J. Huang, et al.,** Nano/microscale pyroelectric energy harvesting: challenges and opportunities, International Journal of Smart and Nano Materials. 4(4) (2013) 229–245.

[6] **S.K.T. Ravindran, T. Huesgen, M. Kroener, P. Woias,** A self-sustaining micro thermomechanic-pyroelectric generator, Applied Physics Letters. 99 (10) (2011) 104102.

[7] **T.C. Harman, P.J. Taylor, M.P. Walsh, B.E. LaForge,** Quantum dot superlattice thermoelectric materials and devices, Science. 5590 (297) (2002) 2229–2232.

[8] **A.J. Boukai, Yu. Bunimovich, J. Tahir-Kheli, et al.,** Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials, Nature. 451(10) (2008) 168–171.

[9] **H.T. Nguyen, A.S. Sidorkin, S.D. Milovidova, O.V. Rogazinskaya,** Investigation of dielectric relaxation in ferroelectric composite nanocrystalline cellulose-triglycine sulfate, Ferroelectrics. 498 (1) (2016) 27–35.

[10] **H.T. Nguyen, S.D. Milovidova, A.S. Sidorkin, O.V. Rogazinskaya,** Dielectric properties of composites based on nanocrystalline cellulose with triglycinesulfate, Physics of the Solid State. 57(3) (2015) 503–506.

[11] **A.Yu. Milinskiy,** Dielectric properties of nanocrystalline cellulose-potassium iodide composites, St. Petersburg Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 3 (2017) 57–62.

[12] **B. Lindner, L. Petridis, J.C. Smith, P. Langan,** Determination of cellulose crystallinity from powder diffraction diagrams, Biopolymers. 103(2) (2015) 67–73.

[13] **L. Mandelkurn,** Crystallization of polymers, 2nd edition, Vol. 1, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.

[14] **N.N. Matveev, N.S. Kamalova, N.Yu. Evsikova, O. Farberovich,** Influence of structural inhomogeneities on the formation of the pyroelectric phase in polymers, Physics of the Solid State. 57(6) (2015) 1148–1150.

[15] **N.N. Matveev, N.S. Kamalova, N.Yu. Evsikova, et al.**, Emergence of differences in potential in wood as a result of natural changes in temperature, Bulletin of the Russian Academy of

Sciences: Physics. 80(9) (2016) 1158–1160.

[16] **B. Wunderlich,** Macromolecular Physics, Vol. 3: Crystal Melting, Academic Press, New York, 1980.

[17] **V.I. Arnold,** «Zhestkie» i «myagkie» matematicheskie modeli [«Hard» and «soft» mathematical models], MCNMO, Moscow, 2004.

[18] **K. Chattopadhyay, A.K. Tiwari, D. Singh, et al.,** A systematic analytical study on lignocelluloses originated inhibitors in hydrolyzed biomass, Cellulose Chemistry and Technology. 49(1) (2015), 81–85.

[19] **D.A. Kozhanov,** The features of finite-element modeling of a structural element of flexible woven composites, St. Petersburg Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2 (2016) 1–6.

[20] **K.C. Cunha, V.H. Rusu, I.F.T. Viana, et al.,** Assessing protein conformational sampling and structural stability via de novo design and molecular dynamics simulations, Biopolymers. 103(6) (2015) 351–361.

[21] **V.V. Postnikov, N.Yu. Evsikova, N.S. Kamalova, N.N. Matveev,** Stepen kristallichnosti tsellyulozy i termicheskoye skanirovaniye [The degree of cellulose crystallinity and the thermal scanning], INTERMATIC-2009: Materials of the International Scientific and Technical Conference, The Russian Academy of Sciences, Energoatomizdat, Moscow, 1 (2009) 197–199.

[22] **N.Y. Evsikova, N.S. Kamalova, N.N. Matveev, V.V. Postnikov,** A new approach to determining the degree of cellulose crystallinity in wood, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 74(9) (2010) 1317–1318.

Received 28.12.2017, accepted 20.06.2018.

THE AUTHORS

MATVEEV Nikolay N.
Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G.F. Morozov
8 Timiryazev St., Voronezh, 394087, Russian Federation
nmtv@vglta.vrn.ru

NGUYEN Hoai Thuong
Industrial University of Ho Chi Minh City
12 Nguyen Van Bao, Ward 4, Go Vap, Ho Chi Minh, Vietnam
nguyenthuongfee@iuh.edu.vn

KAMALOVA Nina S.
Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G.F. Morozov
8 Timiryazev St., Voronezh, 394087, Russian Federation
rc@icmail.ru

EVSIKOVA Nataliya Yu.
Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G.F. Morozov
8 Timiryazev St., Voronezh, 394087, Russian Federation
natalyaevsikova@mail.ru

CHERNYKH Alexander S.
Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G.F. Morozov
8 Timiryazev St., Voronezh, 394087, Russian Federation
edu-ltu@vglta.vrn.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Камалов А.М., Борисова М.Э.** Влияние влаги на релаксацию электрического заряда в модифицированных пленках на основе полиимида // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2016. № 3 (248). С. 33 – 38.

2. **Abdulkhani A., Hosseinzadeh J., Dadashi S., Mousavi M.** A study of morphological, thermal, mechanical and barrier properties of PLA based biocomposites prepared with micro and nano sized cellulosic fibers // Cellulose Chemistry and Technology. 2015. Vol. 49. No. 7–8. Pp. 597–605.

3. **Спивак Ю.М., Мошников В.А.** Особенности строения фоточувствительных поликристаллических слоев сетчатого типа на основе PbCdSe$\langle$I$\rangle$ // Поверхность. Рентгеновские, син-

хротронные и нейтронные исследования. 2010. № 1. С. 97–102.

4. **Мараева Е.В., Мошников В.А., Таиров Ю.М.** Модели формирования оксидных слоев в наноструктурированных материалах на основе халькогенидов свинца при обработке в парах кислорода и иода // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47. № 10. С. 1431–1434.

5. **Lingam D., Parikh A.R., Huang J., Jain A., Minary-Jolandan M.** Nano/microscale pyroelectric energy harvesting: challenges and opportunities // International Journal of Smart and Nano Materials. 2013. Vol. 4. No. 4. Pp. 229–245.

6. **Ravindran S.K.T., Huesgen T., Kroener M., Woias P.** A self-sustaining micro thermomechanic-pyroelectric generator // Applied Physics Letters. 2011. Vol. 99. No. 10. P. 104102.

7. **Harman T.C., Taylor P.J., Walsh M.P., LaForge B.E.** Quantum dot superlattice thermoelectric materials and devices // Science. 2002. Vol. 5590. No. 297. Pp. 2229–2232.

8. **Boukai A.J., Bunimovich Yu., Tahir-Kheli J., Yu J.-K., Goddard III W.A., Heath J.R.** Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials // Nature. 2008. Vol. 451. No. 10. Pp. 168–171.

9. **Nguen H.T., Sidorkin A.S., Milovidova S.D., Rogazinskaya O.V.** Investigation of dielectric relaxation in ferroelectric composite nanocrystalline cellulose-triglycine sulfate // Ferroelectrics. 2016. Vol. 498. No. 1. Pp. 27–35.

10. **Нгуен Х.Т., Миловидова С.Д., Сидоркин А.С., Рогазинская О.В.** Диэлектрические свойства композитов на основе нанокристаллической целлюлозы с триглицинсульфатом // Физика твердого тела. 2015. Т. 57. № 3. С. 491–494.

11. **Милинский А.Ю.** Диэлектрические свойства композитов нанокристаллическая целлюлоза – иодат калия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 1. С. 93–99.

12. **Lindner B., Petridis L., Smith J.C., Langan P.** Determination of cellulose crystallinity from powder diffraction diagrams // Biopolymers. 2015. Vol. 103. No. 2. Pp. 67–73.

13. **Mandelkurn L.** Crystallization of polymers. 2nd Ed. Vol. 1. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.

14. **Матвеев Н.Н., Камалова Н.С., Евсикова Н.Ю., Фарберович О.** Влияние структурных неоднородностей на формирование пироэлектрической фазы в полимерах // Физика твердого тела. 2015. Т. 57. № 6. С. 1131–1133.

15. **Матвеев Н.Н., Сидоркин А.С., Камалова Н.С., Евсикова Н.Ю., Лисицын В.И.** Разность потенциалов, возникающая в древесине при естественных перепадах температуры // Известия РАН. Серия физическая. 2016. Т. 80. № 9. С. 1272–1274.

16. **Вундерлих Б.** Физика макромолекул. Т. 3. Плавление кристаллов. М.: Мир, 1984. 488 с.

17. **Арнольд В.И.** «Жесткие» и «мягкие» математические модели. М.: Изд-во МЦНМО, 2004. 32 с.

18. **Chattopadhyay K., Tiwari A.K., Singh D., Patel M.B., Basu B.** A systematic analytical study on lignocelluloses originated inhibitors in hydrolyzed biomass // Cellulose Chemistry and Technology. 2015. Vol. 49. No. 1. Pp. 81–85.

19. **Кожанов Д.А.** Особенности конечно-элементного моделирования вида структурного элемента гибких тканых композитов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2016. № 1 (237). С. 7–15.

20. **Cunha K.C., Rusu V.H., Viana I.F.T., Marques E.T.A., Dhalia R., Lins R.D.** Assessing protein conformational sampling and structural stability via de novo design and molecular dynamics simulations // Biopolymers. 2015. Vol. 103. No. 6. Pp. 351–361.

21. **Постников В.В., Евсикова Н.Ю., Камалова Н.С., Матвеев Н.Н.** Степень кристалличности целлюлозы и термическое сканирование // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения (INTERMATIC-2009). Матер. 7-й Междунар. научно-техн. конф. Москва, 7 –11 декабря 2009 г. /под ред. А.С. Сигова. Ч. 1. М.: Энергоатомиздат, 2009. С. 197–199.

22. **Евсикова Н.Ю., Камалова Н.С., Матвеев Н.Н., Постников В.В.** Новый подход к определению степени кристалличности целлюлозы в древесине // Известия РАН. Серия физическая. 2010. Т. 74. № 9. С. 1317–1318.

Статья поступила в редакцию 28.12.2017, принята к публикации 20.06.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МАТВЕЕВ Николай Николаевич – *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой общей и прикладной физики Воронежского государственного лесотехнического университета имени Г.Ф. Морозова, г. Воронеж, Российская Федерация.*

394087, Российская Федерация, г. Воронеж, ул. Тимирязева, 8.

nmtv@vglta.vrn.ru

НГУЕН Хоай Тхыонг – *кандидат физико-математических наук, доцент Промышленного университета Хошимина, г. Хошимин, Вьетнам.*
12 Nguyen Van Bao, Ward 4, Go Vap, Ho Chi Minh, Vietnam
nguyenthuongfee@iuh.edu.vn

КАМАЛОВА Нина Сергеевна – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и прикладной физики Воронежского государственного лесотехнического университета имени Г.Ф. Морозова, г. Воронеж, Российская Федерация.*
394087, Российская Федерация, г. Воронеж, ул. Тимирязева, 8
rc@icmail.ru

ЕВСИКОВА Наталья Юрьевна – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей и прикладной физики Воронежского государственного лесотехнического университета имени Г.Ф. Морозова, г. Воронеж, Российская Федерация.*
394087, Российская Федерация, г. Воронеж, ул. Тимирязева, 8
natalyaevsikova@mail.ru

ЧЕРНЫХ Александр Сергеевич – *кандидат технических наук, проректор по учебной и воспитательной работе Воронежского государственного лесотехнического университета имени Г.Ф. Морозова, г. Воронеж, Российская Федерация.*
394087, г. Воронеж, ул. Тимирязева, 8
edu-ltu@vglta.vrn.ru

DOI: 10.18721/JPM.11302
УДК 538.9. 53.01

РАЗРАБОТКА ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ФАЗОВОГО РАЗДЕЛЕНИЯ НА ПРИМЕРЕ МАНГАНИТА

Т.С. Шапошникова, Р.Ф. Мамин

Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского – обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН,
г. Казань, Российская Федерация

В статье рассмотрено явление фазового перехода второго рода в рамках феноменологической модели для двумерной заряженной системы (ДЗС), фрустрированной кулоновским взаимодействием. Связь параметра порядка с зарядом трактуется как локальная температура. Показано, что в такой ДЗС возможно существование фазово-разделенных состояний. При помощи численных расчетов были найдены различные типы указанных состояний (полоски, кольца и т. п.) и определены их параметры. При понижении температуры ДЗС проходит последовательно несколько фазовых переходов. На примере манганита $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ показано, что такую феноменологическую модель можно применять для описания фазового расслоения вблизи магнитного фазового перехода из ферромагнитного в парамагнитное состояние при $0{,}10 < x < 0{,}15$ и температурах $100 < T < 200$ K.

Ключевые слова: фазовый переход второго рода, фазовое разделение, манганит, кулоновское взаимодействие, уровень допирования

Ссылка при цитировании: Шапошникова Т.С., Мамин Р.Ф. Разработка феноменологической модели фазового разделения на примере манганита // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 17–26. DOI: 10.18721/JPM.11302

THE PHASE SEPARATION PHENOMENOLOGICAL MODEL: MANGANITE AS AN EXAMPLE

T.S. Shaposhnikova, R.F. Mamin

Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC KazanSC of RAS, Kazan, Russian Federation

In the paper, an effect of a second order phase transition has been considered in the context of the phenomenological model for a 2D charged system (2DCS) frustrated by the Coulomb interaction. The relationship between the order parameter and the charge was treated as a local temperature in the 2DCS. The existence of phase-separated states was shown to be a possibility in such a system. Various types of those states (strips, rings, etc.) were found by numerical calculations, and their parameters were determined. As the temperature is lowered, the 2DCS passes several phase transitions successively. Using the La(1−x)Sr(x)MnO_3 manganite as an example it was shown that such a phenomenological model could be used to describe the phase separation close to a magnetic phase transition from a ferromagnetic state to a paramagnetic one when $0.10 < x < 0.15$ and at the temperatures of $100 < T < 200$ K.

Key words: second order phase transition, phase separation, manganite, Coulomb interaction, doping level

Citation: T.S. Shaposhnikova, R.F. Mamin, The phase separation phenomenological model: Manganite as an example, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 17–26. DOI: 10.18721/JPM.11302

Введение

Проблема фазового разделения привлекает большое внимание исследователей [1 – 8]. Можно выделить два класса материалов, в которых наблюдаются фазовые переходы (ФП) с разнообразными типами структурного, магнитного, зарядового и орбитального упорядочения.

Во-первых, это манганиты с колоссальным отрицательным магнитосопротивлением типа $R_{1-x}A_x\mathrm{MnO}_3$ (R = La, Pr, Sm и др., A = Ca, Sr и др.), физические свойства которых сильно меняются при изменении концентрации x двухвалентного элемента A от нуля до единицы [1 – 5, 8].

Во-вторых, это купратные высокотемпературные сверхпроводники, в которых наблюдается псевдощелевое состояние и волны зарядовой плотности [6, 7].

Явление фазового разделения веществ часто сопровождается зарядовыми неоднородностями. Такие неоднородности наблюдались методами сканирующей зондовой микроскопии [9], фотоэлектронной микроскопии с угловым разрешением (ARPES) [6], рентгеновской и нейтронной дифракции [7]. Для соединений, отмеченных выше, имеется определенный набор температур и уровней допирования, при которых основной уровень энергии соответствует области сосуществования фаз. Пространственный размер однофазной области определяется соотношением между кулоновской энергией (она важна в присутствии избыточного заряда, возникающего вследствие допирования) и выигрышем энергии, обусловленным присутствием более упорядоченной фазы [10, 11]. Было проведено достаточно много теоретических исследований состояний с зарядовой неоднородностью (см., например, работы [12 – 15]). Обычно в этих исследованиях рассматривается ФП первого рода, фрустрированный кулоновским взаимодействием. Для указанного ФП скалярный параметр порядка либо линейно связан с плотностью заряда, либо пропорционален плотности заряда [13, 14]. В этих работах было показано, что такие модели нестабильны по отношению к фазовому разделению. Фазово-разделенное состояние представляет собой совокупность заряженных областей разных фаз с различным значением параметра порядка. Отметим, что в случае ФП второго рода запрещен этот тип связи параметра порядка с плотностью заряда. В случае ФП второго рода параметр порядка не является скалярной величиной.

В нашей работе мы обсуждаем случай ФП второго рода, фрустрированного кулоновским взаимодействием. Здесь рассмотрена связь плотности заряда с квадратом параметра порядка. В рамках этой модели будет показана возможность существования фазово-разделенного состояния с зарядовыми неоднородностями вблизи температуры фазового перехода T_c, где в матрице «высокотемпературной» фазы с параметром порядка, равным η_1, существуют включения «низкотемпературной» фазы с параметром порядка $\eta_2 > \eta_1$. При изменении температуры можно наблюдать последовательно несколько ФП первого и второго рода.

В этой статье мы применяем феноменологическое приближение, основанное на теории Гинзбурга – Ландау, для описания статического фазового разделения в двумерной системе в окрестности ФП второго рода. При этом учитывается наличие кулоновского взаимодействия, связанного с возникновением дополнительного заряда, внесенного допированием. Поскольку типы материалов, указанных выше, относятся к квазидвумерным (плоскости CuO в купратах и плоскости MnO в манганитах), принятое двумерное описание является разумным приближением. Мы определили набор параметров, связанных с температурой и допированием, для которых фазовое разделение оказывается энергетически выгодным. Мы также определили область фазовой диаграммы, где неоднородные фазы сосуществуют.

Мы нашли параметры модели, подходящие для описания фазового разделения вблизи магнитного ФП второго рода в $\mathrm{La}_{1-x}\mathrm{Sr}_x\mathrm{MnO}_3$ при $0{,}10 < x < 0{,}15$.

Теоретическая модель

Рассмотрим двумерную систему вблизи ФП второго рода. В работе нобелевского лауреата П.Ж. де Жена [16] было изучено действие двойного обмена в соединениях со смешанной валентностью, таких как манганиты $(La_{1-x}Ca_x)(Mn_{1-x}^{3+}Mn_x^{4+})O_3$. Автор показал, что введение дополнительных дырок или дополнительных электронов в антиферромагнетик понижает энергию системы. Также было установлено, что температура Кюри зависит от содержания x допанта. Следуя работе П.Ж. де Жена, мы начинаем с гамильтониана, в который мы добавляем член с кулоновским взаимодействием. Для «слоевого» антиферромагнетика гамильтониан можно записать в следующем виде:

$$H = -\sum_{ij} J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{ij\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^{+} a_{j\sigma} - \\ - J_{\mathrm{H}} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i + H_{\mathrm{Coul}}. \qquad (1)$$

Здесь первый член описывает обменное взаимодействие ионов марганца; $\mathbf{S}_i$, $\mathbf{S}_j$ – спиновые операторы ионного спина на узлах i и j; J_{ij} – обменный интеграл (связывает только соседние магнитные узлы i и j); второй и третий члены гамильтониана (1) описывают двойной обмен: второй описывает прыжки электрона со спином σ вдоль ij-узлов решетки; $a_{i\sigma}^{+}$ ($a_{i\sigma}$) – оператор рождения (уничтожения) электрона на узле i; t_{ij} – интеграл перескока; третий член в гамильтониане (1) описывает хундовскую связь [17], $\mathbf{s}_i$ – спиновый оператор электрона проводимости (его можно выразить через операторы рождения и уничтожения электрона и матрицы Паули); последнее слагаемое описывает кулоновское взаимодействие.

Следуя работе П.Ж. де Жена, мы предполагаем, что спиновое упорядочение невозбужденной системы имеет тип «слоевого антиферромагнетика». Каждый ионный спин S связан ферромагнитно с z' соседними спинами в своем слое и антиферромагнитно с z спинами в соседних слоях. Обменные интегралы равны t_{ij}' и t_{ij}, соответственно. Зенеровские носители заряда [18] совершают перескоки внутри своего слоя (с интегралом перескока t_{ij}') и от одного слоя к другому (с интегралом перескока t_{ij}).

Пусть число магнитных ионов на единицу объема образца равно N и число зенеровских носителей заряда равно xN. Модель двойного обмена – это модель обмена при условии сильной связи $J_{\mathrm{H}} >> zt$, $z't'$.

В пределе конечной температуры и при низком значении относительных намагниченностей подрешеток феноменологическое выражение для свободной энергии было получено в работе [16].

Тогда в пределе сильной связи $J_{\mathrm{H}} \to \infty$ плотность термодинамического потенциала системы будет иметь вид

$$\phi(\eta,\rho) = \phi_0 + \phi_\eta + \phi_{int} + \phi_{\mathrm{Coul}}, \qquad (2)$$

причем для ФП второго рода второе слагаемое должно выражаться как

$$\phi_\eta = \frac{\alpha}{2}\eta^2 + \frac{\beta}{4}\eta^4 + \frac{\delta}{6}\eta^6 + \frac{\zeta}{8}\eta^8 + \frac{D}{2}(\nabla\eta)^2, \qquad (3)$$

где параметр порядка η описывает относительную намагниченность каждой из подрешеток;

$$\alpha = \alpha'(T - T_c)$$

(T_c – температура ФП в отсутствие допанта).

Выражение (3) содержит член второго порядка по η, положительные члены четвертого, шестого и восьмого порядков по η и градиентный член. Кроме того, в выражение (3) входят константы

$$\alpha = 2N(1{,}5k_{\mathrm{B}}T - S^2(zJ + z'J')), \qquad (4)$$

$$\beta = 4N(0{,}45k_{\mathrm{B}}T + 0{,}034x(zt + z't')); \qquad (5)$$

$$\delta = 6N(0{,}325k_{\mathrm{B}}T + 0{,}27x(zt + z't')); \qquad (6)$$

$$\zeta = 8N(0{,}06k_{\mathrm{B}}T + 2{,}21x(zt + z't')), \qquad (7)$$

где k_{B} – постоянная Больцмана.

Энергия ϕ_{int} в функции (2) описывает взаимодействие параметра порядка η с локальной плотностью заряда ρ:

$$\phi_{int} = -\frac{\sigma_1}{2}\eta^2\rho. \qquad (8)$$

Данная формула получена из усредненных по температуре членов выражения (1), описывающих двойной обмен. Энергия взаимодействия (8) записана в данном случае как локальная температура; σ_1 – константа этого взаимодействия.

Основные физические свойства системы определяются параметром σ_1, который определяется из следующего выражения:

$$\bar{\rho}\sigma_1 = \frac{4N}{5}x(zt + z't'). \quad (9)$$

Энергия кулоновского взаимодействия ϕ_{Coul} выражается интегралом:

$$\phi_{\text{Coul}} = \frac{\gamma}{2}\int \frac{(\rho(\mathbf{r}) - \bar{\rho})(\rho(\mathbf{r}') - \bar{\rho})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (10)$$

где константа γ – диэлектрическая постоянная среды.

В отсутствие членов ϕ_{int} и ϕ_{Coul} ФП второго рода наблюдается при $\alpha = 0$. Для $\alpha < 0$ существует равновесное значение параметра порядка. Для $\alpha > 0$ равновесное значение параметра порядка $\eta = 0$, т. е. отсутствует порядок, который определяется параметром η.

В выражениях (9) и (10) $\bar{\rho}$ – средняя двумерная поверхностная плотность заряда:

$$\bar{\rho} = \frac{1}{S}\int_S \rho d^2\mathbf{r}, \quad (11)$$

где $\mathbf{r}$ – двумерный вектор.

Общую свободную энергию Φ, которая выражается как

$$\Phi = \int \phi(\eta, \rho) d^2\mathbf{r}, \quad (12)$$

следует минимизировать по отношению к величинам η и ρ.

Минимизация энергии Φ по отношению к локальной плотности заряда ρ дает равенство

$$-\frac{\sigma_1}{2}\nabla^2_{3D}\eta^2 = 4\pi\gamma(\rho(\mathbf{r}) - \bar{\rho})\delta(z)d. \quad (13)$$

Здесь для сохранения размерности введена толщина двумерного слоя d; $\delta(z)$ – дельта-функция Дирака.

Подставив равенство (13) в выражение (2), получим:

$$\phi = \phi_0 + \frac{\alpha}{2}\eta^2 + \frac{\beta}{4}\eta^4 + \\ + \frac{\delta}{6}\eta^6 + \frac{\zeta}{8}\eta^8 + \frac{D}{2}(\nabla\eta)^2 - \frac{\sigma_1}{2}\eta^2\bar{\rho} - \\ - \frac{\sigma_1^2}{32\pi^2\gamma d^2}\int \frac{\nabla_{2D}\eta^2(\mathbf{r})\nabla_{2D}\eta^2(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (14)$$

где $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ – двумерные векторы.

Два последних слагаемых в выражении (14) отрицательны. Член $-(\sigma_1 / 2)\eta^2\bar{\rho}$ переопределяет критическую температуру фазового перехода: она становится теперь зависимой от средней плотности заряда.

Коэффициент перед параметром η^2 теперь следует заменить (вместо α должно стоять $\tilde{\alpha}$):

$$\tilde{\alpha} = \alpha - \sigma_1\bar{\rho}. \quad (15)$$

Отметим, что присутствие последнего нелокального слагаемого в выражении (14) ведет к нестабильности однородного состояния.

Введем безразмерные параметры Λ и ξ как

$$\Lambda = \eta / \eta_0; \; \xi_x = x / a; \; \xi_y = y / a,$$

где $\eta_0^4 = \beta / \zeta$, $a = [D\zeta^{1/2} / (2\beta^{3/2})]^{1/2}\chi$ (χ – константа, а выражения для констант β, ζ даны формулами (5) и (7)).

Мы выбирали значение константы χ в интервале от 3 до 20. Она позволяет нам варьировать размер области, в которой вычисляется пространственное распределение параметра порядка.

Тогда выражение (14) примет следующий вид:

$$\phi = U_0(\tau\Lambda^2 + \frac{\Lambda^4}{2} + \tilde{\delta}\frac{\Lambda^6}{3} + \frac{\Lambda^8}{4} + \frac{2}{\chi^2}(\nabla\Lambda)^2 - \\ - \frac{A}{\chi}\int \frac{\nabla_{2D}\Lambda^2(\xi)\nabla_{2D}\Lambda^2(\xi')}{|\xi - \xi'|} d\xi'). \quad (16)$$

В этом выражении параметры U_0, τ, χ, A и $\tilde{\delta}$ определены следующим образом:

$$U_0 = \frac{\beta}{2}\eta_0^4 = \frac{\beta^2}{2\zeta}, \quad (17)$$

$$\tau = \frac{\tilde{\alpha}}{\beta\eta_0^2} = \sqrt{\frac{\zeta}{\beta^3}}\alpha'\left(T - T_c - \frac{\sigma_1\bar{\rho}}{\alpha'}\right), \quad (18)$$

$$\chi = a\eta_0\sqrt{\frac{2\beta}{D}}, \quad (19)$$

$$A = \frac{\sigma_1^2}{8\gamma d^2\pi^2\sqrt{2D}\sqrt[4]{\beta\zeta}}, \quad (20)$$

$$\tilde{\delta} = \frac{\delta}{\beta}\eta_0^2 = \frac{2\delta}{\sqrt{\beta\zeta}}. \quad (21)$$

Результаты расчетов и их обсуждение

Для нахождения минимума свободной энергии (12) применялся метод сопряженных операторов (CGM). Мы ввели $N \times N$ ($N = 128$) дискретных точек на квадрате со стороной a и использовали периодические граничные условия. При вычислениях были взяты три параметра: A, τ и χ.

Нами была проанализирована зависимость свободной энергии от параметров A и τ при фиксированном значении константы χ.

На рис. 1, *a* показано пространственное распределение параметра порядка $\Lambda = \Lambda(\xi_x, \xi_y)$ для значений параметров $A = 2{,}5$, $\tau = 0{,}6$, $\chi = 10$ и $N = 128$. Видно, что при этих значениях происходит фазовое разделение. На однородном фоне с параметром порядка, равном нулю (см. шкалу справа), имеется кольцо с отличным от нуля параметром порядка, т. е.

$$0 < \Lambda(\xi_x, \xi_y) \le 1{,}8.$$

Свободная энергия в этом состоянии отрицательна ($\Phi < 0$). Это означает, что пространственно-неоднородное распределение параметра порядка соответствует минимуму свободной энергии. Это состояние энергетически более выгодно, чем однородное, свободная энергия которого равна нулю ($\Phi = 0$ при $\Lambda(\xi_x, \xi_y) = 0$). Такие неоднородные состояния формируются вследствие перераспределения заряда. В области неоднородного распределения параметра $\Lambda(\xi_x, \xi_y)$ существует тройной заряженный слой избыточного заряда. Полный заряд этого слоя равен нулю с высокой точностью, $\Delta\rho > 0$ в центре полосы и $\Delta\rho < 0$ с каждой из сторон.

Для фиксированного значения параметра $A = 2{,}5$ неоднородное распределение параметра порядка существует для значений параметра τ, лежащих в диапазоне

$$\tau_2 \le \tau \le \tau_3$$

($\tau_2 = -9$ и $\tau_3 = 1{,}5$).

Свободная энергия меньше нуля для области $\tau \le \tau_1$ ($\tau_1 = 0{,}8$ для $A = 2{,}5$). В соответствии с выражением (18), τ является линейной функцией разности $T - T_c$ и изменяется в зависимости от $\bar{\rho}$. Здесь T_c — это температура ФП в отсутствие взаимодействия (т. е. при $\Phi_{int} = 0$); $\bar{\rho}$ — это значение среднего заряда, который пропорционален уровню допирования. Параметр A (см. уравнение (20)) зависит от параметра связи σ_1 и от силы кулоновского взаимодействия. При увеличении последнего параметр A снижается. В результате сокращается интервал значений τ, в котором может наблюдаться фазовое разделение.

На рис. 1, *b* показано неоднородное

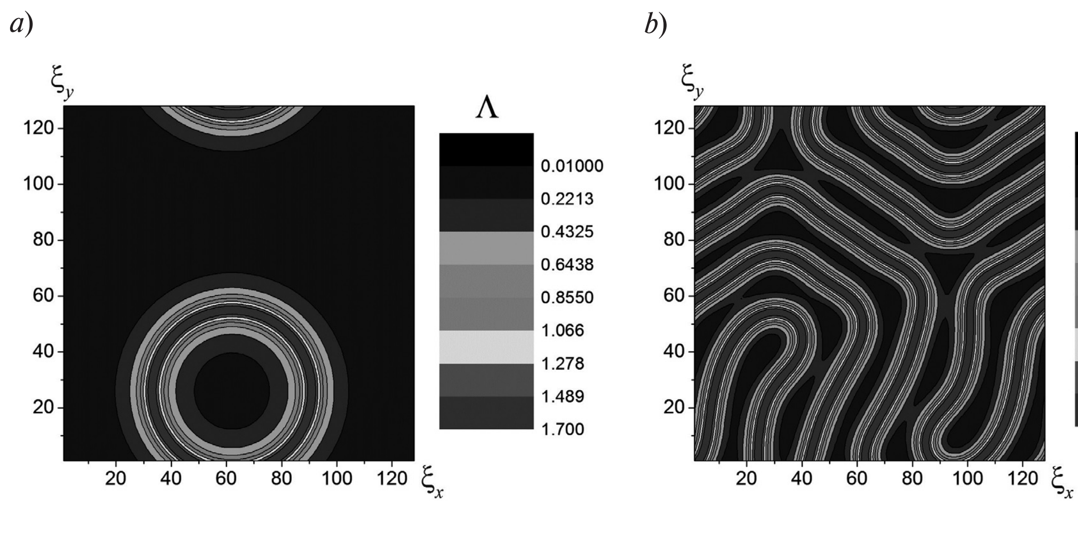


Рис. 1. Расчетные распределения параметра порядка $\Lambda(\xi_x, \xi_y)$ в неоднородном состоянии для $\tau = 0{,}6$ (*a*) и $-3{,}0$ (*b*); $A = 2{,}5$, $\chi = 10$.
Число дискретных точек $N^2 = 128^2 = 16384$

распределение параметра порядка $\Lambda(\xi_x, \xi_y)$ для значений параметров $A = 2{,}5$, $\tau = -3{,}0$, $\chi = 10$ (N = 128). Параметр порядка варьируется от $\Lambda_{\min} = 0{,}5$ до $\Lambda_{\max} = 1{,}7$ (см. шкалу справа). В области неоднородного распределения параметра порядка Λ существует неоднородное распределение избыточного заряда. Расчеты показывают, что изменения параметра χ от 3 до 20 (при A = const) не влияет на интервал значений параметра τ, в котором формируются неоднородные состояния.

Трансформация ландшафта фазового разделения при изменении τ наглядно продемонстрировано на рис. 1. Для $\tau > 0$ (см. рис. 1, *a*) наблюдается фазовое разделение в виде полос или колец. Полоса с $\Lambda > 0$ появляется на фоне состояний с нулевым параметром порядка $\Lambda = 0$. Полоски могут быть прямыми или иметь сложную замкнутую форму. При увеличении значения τ число таких полосок уменьшается, а кольца сжимаются. Отметим, что значение параметра порядка в центре этих полос не меняется. Когда значение τ становится отрицательным (см. рис. 1, *b*) и при дальнейшем уменьшении τ, формы петель меняются. Они изгибаются более сильно, и значение параметра порядка «фона» становится отличным от нуля ($\Lambda_{\min} = 0{,}5$ на рис. 1, *b*). При дальнейшем уменьшении τ (на рис. 1 эти данные не показаны) фазовое разделение становится более мелкомасштабным. Разница между значением Λ внутри и снаружи «полосок» падает до нуля при $\tau = \tau_2$, и наблюдается переход к однородному состоянию с Λ = const.

В нашей модели имеется взаимодействие параметра порядка с зарядом ($\sigma_1 \neq 0$). При наличии такого взаимодействия неоднородное фазово-разделенное состояние с параметром порядка, изменяющимся от $\Lambda_{\min}$ до $\Lambda_{\max}$ (см. рис. 1, *b*), имеет минимальное отрицательное значение свободной энергии $\Phi_{inhom} < 0$.

Рассмотрим изменение фаз, которое наблюдается при уменьшении τ и при постоянном значении A = 2,5. Неоднородное фазовое состояние проявляется скачком (ФП второго рода) при $\tau = \tau_1 = 0{,}8$. Полоски с $\Lambda \neq 0$ растут на «фоне» с нулевым параметром порядка Λ = 0. В этих полосках $\Lambda_{\max} = 1{,}8$. Число таких полосок растет при уменьшении τ от τ_1 до 0. Отметим, что значения $\Lambda_{\max} = 1{,}8$ и $\Lambda_{\min} = 0$ не изменяются в этой области τ. При $\tau = 0$ фазово-разделенное состояние начинает меняться. $\Lambda_{\max}$ начинает уменьшаться, а $\Lambda_{\min}$ – возрастать. При дальнейшем уменьшении $\tau < 0$ разность между $\Lambda_{\max}$ и $\Lambda_{\min}$ уменьшается, и $\Lambda_{\max} = \Lambda_{\min} = \Lambda$ при $\tau = \tau_2 = -9$, т. е. наблюдается ФП второго рода от неоднородного к однородному состоянию. При этом для всего интервала значений параметра $\tau_2 < \tau < \tau_1$ энергия неоднородного состояния $\Phi_{inhom} < 0$ меньше энергии однородного состояния Φ_{hom}, которое существует в случае отсутствия взаимодействия параметра порядка с зарядом, т. е. при $\sigma_1 = 0$.

На рис. 2 фазовая диаграмма неоднородных состояний показана в осях $1/A$ – T (T – температура), для которых $\Delta\Phi < 0$, т. е. энергия неоднородного фазово-разделенного состояния Φ_{inhom}

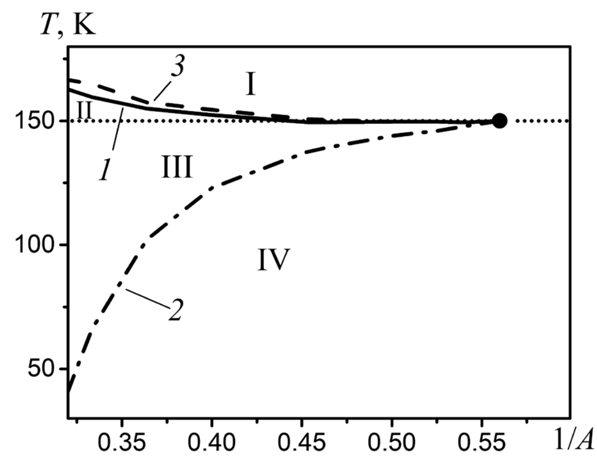


Рис. 2. Фазовая диаграмма неоднородных состояний в осях $1/A$ – T, (T – температура): область I относится к однородному немагнитному состоянию, II, III – к фазово-разделенному, IV – к однородному магнитному; $\Lambda = 0$ в области I; $\Lambda = 0$ и $\Lambda \neq 0$ в области II, $\Lambda \neq 0$ в областях III и IV.
Использованные параметры указаны в тексте. Границы областей: $T = f_1(\tau_1)$ (кривая *1*), $T = f_2(\tau_2)$ (*2*), $T = f_3(\tau_3)$ (*3*); $1/A$ = 0,555 – конечная критическая точка; при $1/A$ > 0,555 фазовое разделение невозможно

меньше, чем энергия однородного состояния Φ_{hom} при $\tau_2 < \tau < \tau_1$. Разность $\Delta\Phi = \Phi_{hom} - \Phi_{inhom}$. Использовались следующие параметры:

$$T_c + \frac{\sigma_1\bar{\rho}}{\alpha'} = 150\ \text{K};\ \frac{\tau}{\alpha'}\sqrt{\frac{\beta^3}{\varsigma}} = 3\ \text{K}.$$

Области I и IV соответствуют однородным фазам с нулевым и ненулевым параметрами порядка, соответственно. Области II и III соответствуют неоднородным фазам. Величина $1/A$ прямо пропорциональна величине кулоновского взаимодействия γ и обратно пропорциональна квадрату σ_1 (см. выражение (20)). При уменьшении параметра A (увеличении $1/A$) интервал значений τ, а значит и интервал температур $T(\tau)$, в котором наблюдается неоднородное распределение параметра порядка Λ, сужается. Фазовое разделение невозможно ниже критической конечной точки $A = 1{,}8$ ($1/A = 0{,}555$), которая показана на фазовой диаграмме рис. 2. В самом деле, при большой величине кулоновского взаимодействия и малой величине энергии двойного обмена кулоновская энергия для модуляции заряда становится слишком большой, так что она всегда больше, чем выигрыш в энергии, связанный с упорядочением. На рис. 2 линия $T(\tau_3)$ показывает границу области неоднородной метастабильной фазы. Для интервала $T(\tau_1) < T < T(\tau_3)$ неоднородное состояние соответствует локальному минимуму свободной энергии, но в этом состоянии свободная энергия положительна ($\Phi > 0$), в то время как однородное состояние имеет энергию, равную нулю. Это метастабильное состояние подобно состоянию «перегретой жидкости».

На рис. 3 показана фазовая диаграмма неоднородного состояния в осях $x - T$ для значений параметров

$$A = 2{,}5,\ \frac{\sigma_1\bar{\rho}}{\alpha' x} = 1200\ \text{K},$$

$$\frac{\tau}{\alpha'}\sqrt{\frac{\beta^3}{\varsigma}} = 3\ \text{K},\ T_c = 30\ \text{K (при } x = 0).$$

Уменьшение величины A приводит к сжатию области, в которой наблюдается фазовое разделение.

Как было отмечено во введении, фазовое разделение наблюдается в манганитах, а также в купратных высокотемпературных сверхпроводниках. Настоящая статья представляет в качестве примера анализ неоднородных фаз в манганитах, в которых наблюдаются последовательные фазовые переходы в неоднородные состояния.

Система $La_{1-x}Sr_xMnO_3$. Проанализируем данную систему. Авторы статьи [19], например, предполагают, что имеющиеся данные указывают на существование электронного фазово-разделенного режима только в области фазовой диаграммы $0{,}10 < x < 0{,}15$ и вблизи ФП из ферромагнитного в парамагнитное состояние.

Рассмотрим область выше температуры структурного ФП от низкотемпературной псевдокубической фазы к орторомбической или к ян-теллеровской искаженной орторомбической фазе при более высоких температурах. В электронном фазово-разделенном режиме, в указанной области, близкой к структурной нестабильности, где дальнодействующие ян-теллеровские искажения подавляются, двойной обмен начи-

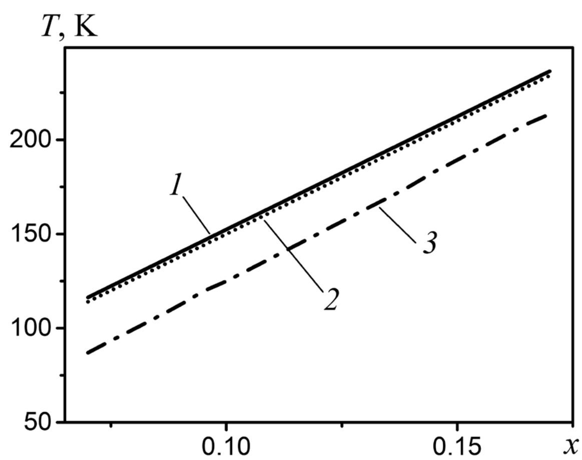


Рис. 3. Фазовая диаграмма в осях $x - T$ при различных значениях параметра τ (остальные использованные параметры указаны в тексте). Область между линиями *1* и *3* относится к фазово-разделенному состоянию (соответствует областям II и III на рис. 2); $\tau = 0{,}8$ (*1*), 0,0 (*2*), −9 (*3*). Линия *2* относится к температуре фазового перехода в отсутствие взаимодействия заряда с параметром порядка

нает играть более фундаментальную роль.

Мы предполагаем, что в этой области фазовой диаграммы для концентрации стронция $x = 0{,}125$ при понижении температуры может наблюдаться следующая последовательность фазовых переходов. Сначала наблюдается переход из однородного парамагнитного в неоднородное состояние II при $T = 184{,}5$ K. Затем при понижении температуры наблюдается переход в неоднородную фазу III. И только после этого при 155 K система испытывает переход к однородному ферромагнитному состоянию. Эта последовательность ФП очень похожа на обсуждаемую в нашей статье. Кроме того, подобные неоднородные состояния могут появиться и в купратах.

Заключение

Мы рассмотрели теорию фазового перехода второго рода, где кроме стандартного разложения свободной энергии по степеням параметра порядка было введено кулоновское взаимодействие и взаимодействие заряда с указанным параметром. Было найдено распределение этого параметра и распределение заряда в двумерной плоскости, которое соответствует минимуму свободной энергии. Были проведены численные вычисления методом CGM.

Вычисления показали, что между областями фазовой диаграммы, которые характеризуются постоянными значениями параметра порядка, имеется область с его неоднородным распределением и неоднородным распределением заряда. Это фазовое разделение может существовать в форме одномерных полос или двумерных колец или «змей». Были найдены серии фазовых переходов. При снижении температуры сначала реализуется фазовый переход от однородного состояния с нулевым параметром порядка к фазово-разделенному состоянию с двумя фазами (с нулевым и ненулевым параметрами порядка). Затем наблюдается фазовый переход первого рода к другому фазово-разделенному состоянию, в котором обе фазы имеют разные, но не равные нулю параметры порядка. И только при дальнейшем уменьшении температуры имеет место переход к однородному упорядоченному состоянию.

Были определены области в пространстве параметров «температура – уровень допирования», для которых имеется сосуществование фаз. Мы проследили за изменениями вида фазового разделения при изменении температуры, уровня допирования материала и при изменении константы связи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Jin S., Tiefel T.H., McCormack M., Fastnacht R.A., Ramesh R., Chen L.H.** Thousandfold change in resistivity in magnetoresistive La-Ca-Mn-O films // Science. 1994. Vol. 264. No. 5157. Pp. 413–415.

2. **Каган М.Ю., Кугель К.И.** Неоднородные зарядовые состояния и фазовое расслоение в манганитах // Успехи физических наук. 2001. Т. 171. № 6. С. 577–596.

3. **Sboychakov A.O., Kugel K.I., Rakhmanov A.L.** Jahn-Teller distortions and phase separation in doped manganites // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 74. No. 1. Pp. 014401(1–13).

4. **Dagotto E., Hotta T., Moreo A.** Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation // Phys. Rep. 2001. Vol. 344. No. 1–3. Pp. 1–153.

5. **Нагаев Э.Л.** Манганиты лантана и другие магнитные проводники с гигантским магнитосопротивлением // Успехи физических наук. 1996. Т. 166. № 8. С. 833–858.

6. **Shen K.M., Ronning F., Lu D.H., Baumberger F., Ingle N.J.C., Lee W.S., Meevasana W., Kohsaka Y., Azuma M., Takano M., Takagi H., Shen Z.-X.** Nodal quasiparticles and antinodal charge ordering in $Ca_{2-x}Na_xCuO_2Cl_2$ // Science. 2005. Vol. 307. No. 5711. Pp. 901–904.

7. **Tranquada J.M., Woo H., Perring T.G., Goka H., Gu G.D., Xu G., Fujita M., Yamada K**. Quantum magnetic excitations from stripes in copper oxide superconductors // Nature (London). 2004. Vol. 429. No. 6991. Pp. 534–538.

8. **Deisenhofer J., Braak D., Krug von Nidda H.-A., Hemberger J., Eremina R.M., Ivanshin V.A., Balbashov A.M., Jug G., Loidl A., Kimura T., Tokura Y.** Observation of a Griffiths phase in paramagnetic $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. No. 25. Pp. 257202(1–4).

9. **Neto E.H. da S., Aynajian P., Frano A., Comin R., Schierle E., Weschke E., Gyenis A., Wen**

J., Schneeloch J., Xu Z., Ono S., Gu G., Le Tacon M., Yazdani A.** Ubiquitous interplay between charge ordering and high-temperature superconductivity in cuprates // Science. 2014. Vol. 343. No. 6169. Pp. 393–396.

10. **Кабанов В.В., Мамин Р.Ф., Шапошникова Т.С.** Локализованные зарядовые неоднородности и фазовое расслоение вблизи фазового перехода второго рода // ЖЭТФ. 2009. Т. 135. № 2. С. 322–329.

11. **Shenoy V.B., Gupta T., Krishnamurthy H.R., Ramakrishnan T.V.** Coulomb interactions and nanoscale electronic inhomogeneities in manganites // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 98. No. 9. Pp. 097201(1–4).

12. **Miranda J., Kabanov V.V.** Coulomb frustrated first order phase transition and stripes // Physica C. 2008. Vol. 468. No. 4. Pp. 358–361.

13. **Ortix C., Lorenzana J., Di Castro C.** Coarse grained models in Coulomb frustrated phase separation // J. Phys.: Condens. Matter. 2008. Vol. 20. No. 43. Pp. 434229(1–8).

14. **Jamei R., Kivelson S., Spivak B.** Universal aspects of Coulomb-frustrated phase separation // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 94. No. 5. Pp. 056805(1–4).

15. **Mamin R.F., Shaposhnikova T.S., Kabanov V.V.** Phase separation and second-order phase transition in the phenomenological model for a Coulomb-frustrated two-dimensional system // Phys. Rev. B. 2018. Vol. 97. No. 9. Pp. 094415(1–7).

16. **De Gennes P.-G.** Effects of double exchange in magnetic crystals // Phys. Rev. 1960. Vol. 118. No.1. Pp. 141–154.

17. **Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н.** Модель двойного обмена и уникальные свойства манганитов // Успехи физических наук. 2001. Т. 171. № 2. С. 121–148.

18. **Zener C.** Interaction between the *d*-shells in the transition metals. II. Ferromagnetic compounds of manganese with perovskite structure // Phys. Rev. 1951. Vol. 82. No. 3. Pp. 403–405.

19. **Paraskevopoulos M., Mayr F., Hemberger J., Loidl A., Heichele R., Maurer D., Muller V., Mukhin A.A., Balbashov A.M.** Magnetic properties and the phase diagram of $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ for $x \leq 0.2$ // J. Phys.: Condens. Matter. 2000. Vol. 12. No. 17. Pp. 3993–4011.

Статья поступила в редакцию 23.05.2018, принята к публикации 24.05.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ШАПОШНИКОВА Татьяна Сергеевна – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Казанского физико-технического института им. Е.К. Завойского – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН, г. Казань, Российская Федерация.*

420029, Российская Федерация, г. Казань, Сибирский тракт, 10/7

t_shap@kfti.knc.ru

МАМИН Ринат Файзрахманович – *доктор физико-математических наук, заместитель директора по научной работе Казанского физико-технического института им. Е.К. Завойского – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН, г. Казань, Российская Федерация.*

420029, Российская Федерация, г. Казань, Сибирский тракт, 10/7

mamin@kfti.knc.ru

REFERENCES

[1] **S. Jin, T.H. Tiefel, M. McCormack, et al.,** Thousandfold change in resistivity in magnetoresistive La-Ca-Mn-O films, Science. 264 (5157) (1994) 413–415.

[2] **M.Yu. Kagan, K.I. Kugel',** Inhomogeneous charge distributions and phase separation in manganites, Phys. Usp. 44 (6) (2001) 553–570.

[3] **A.O. Sboychakov, K.I. Kugel, A.L. Rakhmanov,** Jahn-Teller distortions and phase separation in doped manganites, Phys. Rev. B. 74 (1) (2006) 014401(1–13).

[4] **E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo,** Colossal magnetoresistant materials: the key role of phase separation, Phys. Rep. 344 (1–3) (2001) 1–153.

[5] **E.L. Nagaev,** Lanthanum manganites and other giant-magnetoresistance magnetic conductors, Phys. Usp. 39 (8) (1996) 781–805.

[6] **K.M. Shen, F. Ronning, D.H. Lu, et al.,** Nodal quasiparticles and antinodal charge ordering in $Ca_{2-x}Na_xCuO_2Cl_2$, Science. 307 (5711) (2005) 901–904.

[7] **J.M. Tranquada, H. Woo, T.G. Perring, et al.,** Quantum magnetic excitations from stripes in copper oxide superconductors, Nature (London). 429 (6991) (2004) 534–538.

[8] **J. Deisenhofer, D. Braak, H.-A. Krug von Nidda, et al.,** Observation of a Griffith's phase in paramagnetic $La_{1-x}Sr_xMnO_3$, Phys. Rev. Lett. 95 (25) (2005) 257202(1–4).

[9] **E.H. Neto da S., P. Aynajian, A. Frano, et al.,**

Ubiquitous interplay between charge ordering and high-temperature superconductivity in cuprates, Science. 343 (6169) (2014) 393–396.

[10] **V.V. Kabanov, R.F. Mamin, T.S. Shaposhnikova,** Localized charge inhomogeneities and phase separation near a second-order phase transition, Sov. Phys. JETP. 108 (2) (2009) 286–291.

[11] **V.B. Shenoy, T. Gupta, H.R. Krishnamurthy, T.V. Ramakrishnan,** Coulomb interactions and nanoscale electronic inhomogeneities in manganites, Phys. Rev. Lett. 98 (9) (2007) 097201(1–4).

[12] **J. Miranda, V.V. Kabanov,** Coulomb frustrated first order phase transition and stripes, Physica C. 468 (4) (2008) 358–361.

[13] **C. Ortix, J. Lorenzana, C. Di Castro,** Coarse grained models in Coulomb frustrated phase separation, J. Phys.: Condens. Matter. 20 (43) (2008) 434229 (1–8).

[14] **R. Jamei, S. Kivelson, B. Spivak,** Universal aspects of Coulomb-frustrated phase separation, Phys. Rev. Lett. 94 (5) (2005) 056805(1–4).

[15] **R.F. Mamin, T.S. Shaposhnikova, V.V. Kabanov,** Phase separation and second-order phase transition in the phenomenological model for a Coulomb-frustrated two-dimensional system, Phys. Rev. B. 2018. Vol. 97 (9) (2018) 094415(1–7).

[16] **P.-G. de Gennes,** Effects of double exchange in magnetic crystals, Phys. Rev. 118 (1) (1960) 141–154.

[17] **Yu.A. Izyumov, Yu.N. Skryabin,** Double exchange model and the unique properties of the manganites, Phys. Usp. 2001. Vol. 44. No. 2. Pp. 109–134.

[18] **C. Zener,** Interaction between the *d*-shells in the transition metals. II. Ferromagnetic compounds of manganese with perovskite structure, Phys. Rev. 82 (3) (1951) 403–405.

[19] **M. Paraskevopoulos, F. Mayr, J. Hemberger, et al.,** Magnetic properties and the phase diagram of $La_{1-x}Sr_xMnO_3$ for $x \le 0.2$, J. Phys.: Condens. Matter. 12 (17) (2000) 3993–4011.

Received 23.05.2018, accepted 24.05.2018.

THE AUTHORS

SHAPOSHNIKOVA Tatyana S.
Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC KazanSC of RAS
10/7, Sibirsky tract, Kazan, 420029, Russian Federation
t_shap@kfti.knc.ru

MAMIN Rinat F.
Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC KazanSC of RAS
10/7, Sibirsky tract, Kazan, 420029, Russian Federation
mamin@kfti.knc.ru

DOI: 10.18721/JPM.11303
УДК 517

СЛАБЫЕ РЕШЕНИЯ ПРЕДЕЛЬНЫХ ЗАДАЧ КРОККО

М.Р. Петриченко, Д.Д. Заборова, Е.В. Котов, Т.А. Мусорина

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

В работе предлагается прием построения приближенного решения типичной предельной задачи Крокко, который состоит в замене этой исходной задачи интегральным уравнением. Последнее решено прямым вычислением интеграла с использованием теоремы о среднем. Параметр осреднения исключен интегрированием по параметру в промежутке (0, 1). Продемонстрированы расширения способа решения и найдены слабые решения. Для классического случая полученное слабое решение незначительно отличается от точного решения Блазиуса. Приближенное значение постоянной Блазиуса оказывается равным 1/3 и отличается от точного (0,33206) на 0,3 %.

Ключевые слова: задача Коши, интегральное уравнение, теорема о среднем, группа преобразований, уединенная волна

Ссылка при цитировании: Петриченко М.Р., Заборова Д.Д., Котов Е.В., Мусорина Т.А. Слабые решения предельных задач Крокко // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 27–38. DOI: 10.18721/JPM.11303

WEAK SOLUTIONS OF THE CROCCO BOUNDARY PROBLEMS

M.R. Petrichenko, D.D. Zaborova, E.V. Kotov, T.A. Musorina

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

A procedure for designing an approximate solution of the Crocco boundary typical problem has been proposed in the paper. The procedure calls for the change of this initial problem by a nonlinear integral equation. The latter was solved by direct calculation of the integral using the mean-value theorem. . The averaging parameter was eliminated by integrating over the parameter in the (0, 1) interval. Widening the scope of the solution procedure was demonstrated and weak solutions were found. For the classical case, the weak solution was not too different from the Blasius exact one. The approximate value of the Blasius constant turned out to be 1/3 and differed from the exact one (0.33206) by 0.3 %.

Key words: Cauchy problem, integral equation, mean value theorem, group of transformations, solitary wave

Citation: M.R. Petrichenko, D.D. Zaborova, E.V. Kotov, T.A. Musorina, Weak solutions of the Crocco boundary problems, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 27–38. DOI: 10.18721/JPM.11303

Введение

Известно, что предельные задачи Крокко, в основном, связаны с гидродинамическими приложениями, в частности с продольным обтеканием пластины вязким потоком, с нестационарной фильтрацией в однородной и изотропной (скалярной) пористой среде [1 – 3].

Типичная предельная задача Крокко ставится следующим образом [1]:

$$\begin{gathered} 2\varphi\frac{d^2\varphi}{du^2}+u=0, \\ D(\varphi)=(u:0\le u_0<u<1), \varphi\in C^{(2)}(D(\varphi)), \\ \left(\frac{d\varphi}{du}\right)_{u=u_0}=\varphi(1)=0, \\ \operatorname{Im}(\varphi)=(0,a), a:=\varphi(u_0), \end{gathered} \tag{1}$$

причем в классическом случае Блазиуса $u_0 = 0$.

В представленном виде задача (1) широко используется в гидродинамике, где переменная u трактуется как продольная скорость, а распределение φ – как напряжение трения [1].

В задачах теории фильтрации задача (1) возникает при расчете уединенной волны расхода, т. е. при решении предельной задачи для уравнения Буссинеска [2, 3]:

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial s}\left(ku\frac{\partial u}{\partial s}\right), \tag{1а}$$

где $u = u(t,s) \le 1$ – глубина фильтрационного потока ($t > 0$, $s > 0$); k – коэффициент фильтрации.

В частном случае

$$u(0,s) - 1 = u(t,0) = 0.$$

В общем случае

$$k = k(u),\ c=-k\left(u\right)\left(\frac{\partial u}{\partial s}\right)^c,$$

где c – скорость фильтрации.

В классическом случае Буссинеска $k = 1$, $c = 1$. Тогда уравнение Буссинеска имеет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial s}\left(u\frac{\partial u}{\partial s}\right). \tag{1б}$$

Наконец, уравнение Крокко возникает в задачах о струйных движениях вязкой жидкости (свободная конвекция в обогреваемых каналах, свободные затопленные и пристеночные струи и др.) [4, 5].

В отличие от «естественной» постановки прикладных предельных задач, задача (1) удобна тем, что позволяет найти инъективное отображение компакта $(u_0,1)$ в компакт

$$(0,a), \varphi:(u_0,1)\to(0,a).$$

Выражаясь точнее, утверждаем, что каждая ветвь решения предельной задачи (1) – это 2-диффеоморфизм $\varphi:(u_0,1)\to(0,a)$.

Решения предельной задачи (1) приведены в работах [6 – 32]. Эти работы распадаются на два класса:

в первом используются, в основном, аналитические методы и в том числе решения, полученные в виде степенных и расщепляющих (плоских) рядов;

во втором доминируют численные решения.

К аналитическим относятся работы (мы их относим к первому классу), использующие методы теории групп преобразований Ли и разложения в степенные и обвертывающие ряды.

Например, уравнение Буссинеска (1б) допускает линейное преобразование

$$z=\alpha t\pm\sqrt{\alpha}s,$$

и тогда существует решение уравнения Буссинеска в виде уединенной волны расхода:

$$z=u+c_1-c_2\ln(u+c_2).$$

В этом решении случай $c_2 = 0$ отвечает центрированной волне расхода, распространяющейся со скоростью $\pm\alpha^{1/2}$ либо вверх, либо вниз по течению.

Особое место занимают работы [26 – 31], содержащие аналитический аппарат для построения решений обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) рассматриваемого типа вблизи сингулярной особенности. В указанных публикациях обращается внимание на то, что свойства аналитической функции определяются в основном ее особенностями, которые невозможно изучать, оставаясь на вещественном интервале. «Выход» в комплексную плоскость автоматически означает выход (отображение) на риманову поверхность решения [31].

«Точные» решения предельной задачи для уравнения Крокко получаются также при использовании степенных рядов по u. Но для этих решений неизвестны тауберовские теоремы, а именно – ряды для функции $\varphi(u)$ оказываются «плохо» сходящимися при $u \to 1-0$. Так, в работе [32] продемонстрирована расходимость ряда для $\varphi(u)$ на внешней границе пограничного слоя $(u \to 1-0)$ и бифуркация решения во внешней, струйной части пограничного слоя.

Из приведенного обзора опущены так называемые интегральные методы, в которых вместо уравнений на плотности распределения решаются ОДУ для самих распределений (интегральных соотношений). Эти методы идейно ближе к совершенно иным методам – прямым или вариационным.

Таким образом, на сегодняшний день существует единственная альтернатива численным методам решения уравнений типа Блазиуса, Шази, Крокко – плоские ряды для аналитических решений.

Цель настоящего исследования – построить приближенное решение типичной предельной задачи Крокко с использованием процедуры осреднения.

Построение решения задачи

В данной работе используется прием построения приближенного решения предельной задачи (1), основанный на замене этой исходной предельной задачи интегральным уравнением, с последующим введением фиктивного параметра и осреднения по этому параметру. Другими словами, вместо точного решения используется распределение (функционал) с плотностью, совпадающей с приближенным решением.

Суть этого приема следующая. Пусть

$$f(u) \in C^{(1)}(0,1),\ f(u) \ge 0.$$

Предельная задача Крокко для промежутка (0, 1) имеет вид

$$2\varphi \frac{d^2\varphi}{du^2} + f(u) = 0, \varphi'(0) = \varphi(1) = 0$$

и допускает формальное понижение порядка:

$$2\frac{d\varphi}{du} = -\int_0^u \frac{f(v)dv}{\varphi(v)}.$$

Для положительной ветви решения $\varphi := \varphi^+$ функция $1/\varphi(u)$ представляет собой положительное, монотонно убывающее распределение, отображающее промежуток $u \in (u_0,\ 1)$ на промежуток $\varphi \in (0, a)$, где $a := \varphi(0)$.

Тогда, согласно теореме Бонне, справедливо равенство

$$\frac{d\varphi_\theta^2}{du} = -\int_{\theta u}^{u} f(v)dv, \qquad (\#)$$

где $0 < \theta < 1$ – параметр (правильная дробь).

Пусть в этой формуле $u = 1$. В этом случае при $u \to 1-0$

$$d{\varphi_\theta}^2 / du = O(1).$$

Это означает, что необходимо выполнение равенств

$$\varphi_\theta(u) = O(\varepsilon^m),\ d\varphi_\theta / du = O(\varepsilon^{-m}),$$
$$m = n,$$

где m, n – положительные параметры.

Интегрируя равенство (#) еще раз, получим:

$$\varphi_\theta^2(u) = \int_u^1 dv \int_{\theta v}^{v} f(t)dt.$$

Это равенство и есть приближенное θ-решение уравнения Крокко (отмечено нижним индексом θ). Данное решение зависит непрерывным образом от дроби (параметра) θ, причем ясно, что

$$\varphi_1^2(u) = 0, \varphi_0^2(u) = \int_u^1 dv \int_0^u f(t)dt =$$
$$= \int_0^1 (1-t)f(t)dt - \int_0^u (u-t)f(t)dt > \varphi_\theta^2(u) > 0,$$
$$\forall\theta \in (0,1),$$

и вообще $\partial\varphi / \partial\theta < 0$.

Исключить параметр θ можно, например, осреднением по нему дериватива:

$$\frac{d\varphi^2}{du} := \int_0^1 \frac{d\varphi_\theta^2}{du} d\theta,$$

что приводит к выражению

$$\frac{d\varphi^2}{du} = -1 / u\int_0^u vf(v)dv.$$

Окончательно можем записать следующее приближенное решение предельной задачи (1):

$$\varphi^2(u) = \int_0^1 vf(v)\ln\frac{1}{v}dv - \int_0^u vf(v)\ln\frac{u}{v}dv. \quad (2)$$

Полученный результат не зависит от порядка интегрирования по параметру θ и по аргументу u. Решение (2) назовем слабым θ-решением.

Свойства решений предельной задачи (1)

В данном разделе мы перечислим свойства решений предельной задачи (1) (доказательства этих свойств опускаются).

1. Предельные условия в задаче (1) можно заменить одноточечными условиями (Коши):

$$\left(\frac{d\varphi}{du}\right)_{u=u_0} = \varphi(0) - a = 0, \quad (3)$$

причем в начальных условиях (3) параметр a подбирается так, чтобы $\varphi(1) = 0$. Такое наложение условий оправдано в силу непрерывной зависимости φ от параметра a.

2. Существуют две ветви решения предельной задачи (1) и, соответственно, предельной одноточечной предельной задачи (3):

$$\varphi^+(u) \text{ и } \varphi^-(u)$$

(рис. 1). Эти ветви связаны следующим образом:

$$\varphi^+(u) + \varphi^-(u) = 0, \; 0 < u < 1,$$

причем

$$0 \le \varphi^+(u) \le a, \frac{d\varphi^+}{du} < 0, \frac{d^2\varphi^+}{du^2} < 0;$$

$$a \le \varphi^-(u) \le 0, \frac{d\varphi^-}{du} > 0, \frac{d^2\varphi^-}{du^2} > 0.$$

Предельная задача (1) типична, поскольку к ней сводится, например, однородная предельная задача Крокко. Пусть $u_0 = 0$ и вместо представления (1) рассматривается

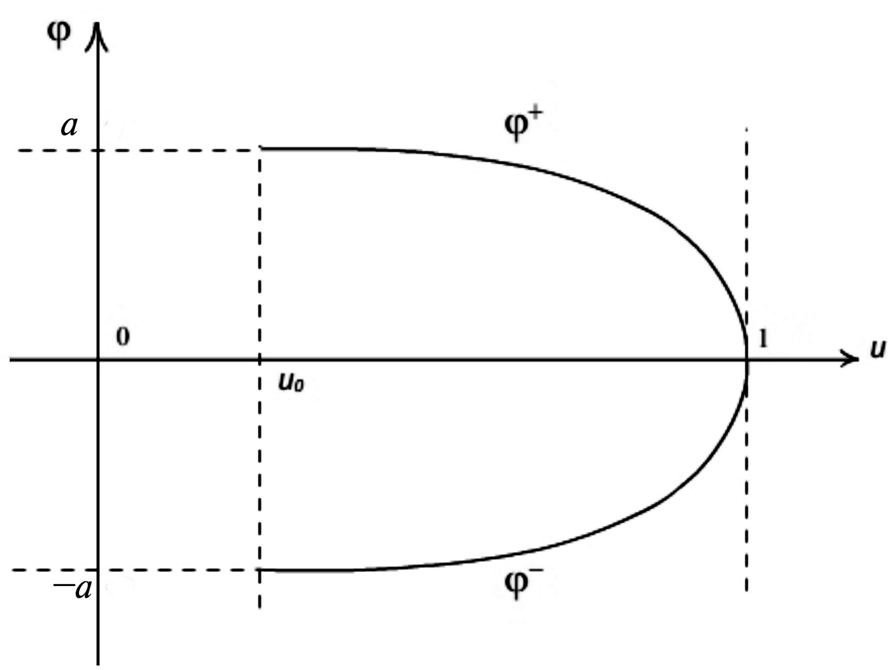


Рис. 1. Решение типичной предельной задачи Крокко: положительная ($\varphi^+(u)$) и отрицательная ($\varphi^-(u)$) монотонные ветви; вертикальными пунктирами показаны границы интервала

однородная предельная задача Крокко:

$$2\varphi\frac{d^2\varphi}{du^2}+u=0, \quad \varphi(0)=\varphi(1)=0. \tag{1в}$$

Решение однородной предельной задачи (1в) состоит из двух ветвей:

$$0\le\varphi^+(u) \text{ и } \varphi^-(u)\le 0$$

(положительной и отрицательной), при этом таких, что

$$\varphi^+(u)+\varphi^-(u)=0$$

для каждого значения u из промежутка $0<u<1$.

Существует значение $u=u^*$ $(0<u^*<1)$, такое, что $d\varphi^\pm/du^*=0$ (согласно теореме Ролля). Поэтому каждая из ветвей решения, $\varphi^\pm(u)$, однородной задачи (1), распадается на два решения типичной предельной задачи Крокко (1):

$$\varphi_l{}^\pm(u),\ D(\varphi_l{}^\pm)=(0,u^*);$$

$$\varphi_r{}^\pm(u),\ D(\varphi_r{}^\pm)=(u^*,1).$$

При этом решения $\varphi(u)=\varphi^\pm_{l,r}(u)$ положительных и отрицательных типичных предельных задач сопрягаются непрерывно и гладко в точке $u=u^*$ (рис. 2):

$$\varphi_l^\pm(0)=\left(\frac{d\varphi_l^\pm}{du}\right)_{u=u^*-0}=$$

$$=\left(\frac{d\varphi_r^\pm}{du}\right)_{u=u^*+0}=\varphi_r^\pm(1)=0.$$

Ветви решения однородной предельной задачи распадаются на решения типичных предельных задач:

$$\varphi_l^\pm(u^*-0)-\varphi_r^\pm(u^*+0)=0, \quad \left(\frac{d^2\varphi^+}{du^2}\right)_{u=u^*}<0, \left(\frac{d^2\varphi^-}{du^2}\right)_{u=u^*}>0. \tag{\#\#}$$

3. Решение предельной задачи (1) – (3) удовлетворяет тождеству

$$\int_{u_0}^{1}\left(\frac{d\varphi}{du}\right)^2du=\frac{1-u_0^2}{4}. \tag{4}$$

4. Решение предельной задачи (1) – (3) равносильно задаче на минимум положительного функционала (распределения):

$$F(\varphi)=(1/2)\int_{u_0}^{1}\left(\left(\frac{d\varphi}{du}\right)^2+u\ln\frac{a}{\varphi}\right)du>0.$$

Другими словами, вдоль экстремалей функционала $F(\varphi)$ выполняется условие $dF\le\delta F$, где dF – вариация вдоль харак-

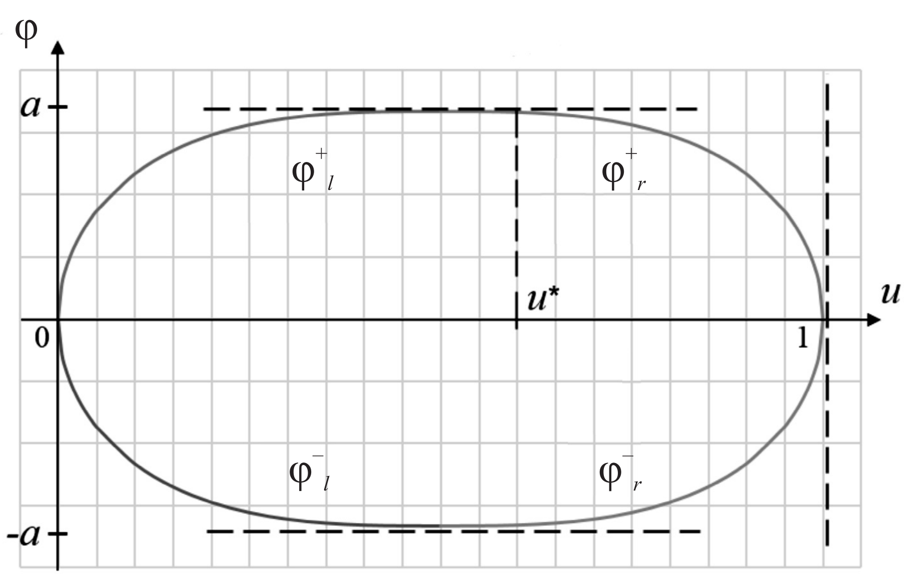


Рис. 2 . Зависимости $\varphi^\pm(u)$, на которых показано, как ветви решения однородной предельной задачи распадаются на решения (##) типичных предельных задач; u^* соответствует максимумам функции $|\varphi|$

теристики (траектории решения), а δF – вариация вдоль допустимой (виртуальной) траектории. Доказательство свойства 4 основано на том, что необходимое условие минимума $F(\varphi)$ совпадает с уравнением Крокко, а достаточность условия гарантирована выпуклостью плотности лагранжиана $F(\varphi)$.

5. Свойство решения при $u_0 = 0$. В этом случае предельная задача (1) равносильна следующему нелинейному интегральному уравнению:

$$\frac{d\varphi}{du} = -\frac{1}{2}\int_0^u \frac{vdv}{\varphi(v)},$$

$$\varphi(u) = \frac{1}{2}\int_u^1 dv \int_0^v \frac{tdt}{\varphi(t)} =$$

$$= \frac{1}{2}\left(\int_0^1 \frac{(1-t)tdt}{\varphi(t)} - \int_0^u \frac{(u-t)tdt}{\varphi(t)}\right).$$

Для решения данного интегрального уравнения можно использовать итерационный процесс.

Пусть нижний индекс обозначает номер итерации, и тогда процесс решения выражается как

$$\frac{d\varphi_s}{du} = -\int_0^u \frac{vdv}{\varphi_{s-1}(v)},$$

$$\varphi_s(u) = \frac{1}{2}\int_u^1 dv \int_0^v \frac{tdt}{\varphi_{s-1}(t)}.$$

Если $1/\varphi \in L_1(0,1)$, то $\varphi \in C^{(1)}(0,1)$. Допустим, что последовательность итераций функции $1/\varphi_s$ образует последовательность Коши. Тогда $\varphi_s \to \varphi$ почти всюду на промежутке $0 < u < 1$, ввиду полноты области $L_1(0, 1)$.

6. Решение позволяет сформулировать следствие из теоремы о среднем. Поскольку $1/\varphi(u)$ – монотонно возрастающее распределение, то, согласно теореме Бонне о среднем, справедливы равенства

$$2\varphi(u)\frac{d\varphi}{du} = -\frac{u^2}{2}(1-\theta^2),$$

$$\varphi_\theta^2(u) = \frac{1}{6}(1-u^3)(1-\theta^2),$$

где θ – правильная дробь ($0 < \theta < 1$).

Окончательное выражение для приближенного решения имеет вид

$$\varphi_\theta(u) = (1/\sqrt{6})\sqrt{(1-u^3)(1-\theta^2)}.$$

Среднее квадратичное значение $\varphi_\theta(u)$, т. е. θ-аппроксимация решения, определяется равенством

$$\varphi^2(u) = \int_0^1 \varphi_\theta^2(u)d\theta = (1/9)(1-u^3). \qquad (5)$$

Отсюда $\varphi(u) = (1/3)\sqrt{1-u^3}$, и это приближение аппроксимирует точное решение Блазиуса, особенно при малых значениях u. Например, значение постоянной Блазиуса составляет $a = 1/3$. Ее точное значение, недавно анонсированное В.П. Вариным, составляет [29, 30]:

$$\begin{gathered} a = 0{,}33205733621519 \\ 629893718006201058 \\ 296654709356141267 \\ 981810047564019872 \\ 417401806440507049 \\ 0731855146368\ldots . \end{gathered}$$

Рациональное значение константы отличается от приведенного иррационального менее, чем на 0,3 %.

Величина $\mathcal{D} := \int_0^1 \varphi du$ в задачах с физическим содержанием представляет диссипацию на отрезке (0, 1). В данном случае ее значение составляет

$$\mathcal{D} = (1/3)\int_0^1 \sqrt{1-u^3}du = \frac{\sqrt{\pi}}{18}\frac{\Gamma(1/3)}{\Gamma(11/6)} \approx 0,27.$$

Видно, что за диссипацию «отвечает» распределение $\varphi(u)$ в окрестности точки $u = 0$.

7. Сформулируем общее определение нормы θ-аппроксимации:

$$\varphi_r(u) = \frac{1}{\sqrt{6}}(1-u^3)\cdot\left(\int_0^1 (1-\theta^2)^{r/2}d\theta\right)^{1/r} =$$

$$= \frac{1-u^3}{\sqrt{6}}\left(\frac{\sqrt{\pi}\Gamma(r/2+1)}{2\Gamma(r/2+3/2)}\right)^{1/r},$$

где $r > 0$ – любое положительное вещественное число.

Далее нижний индекс опускается и норма должна быть понятна из контекста. Например, в предыдущем пункте было принято $r = 2$, и тогда получаем, что

$$\varphi(u) := \varphi_2(u) = \frac{1-u^3}{\sqrt{6}}\sqrt{\frac{\sqrt{\pi}}{2\Gamma(5/2)}} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{\frac{2}{3}}(1-u^3) = (1/3)(1-u^3).$$

Далее выполняется равномерно по $0 < u < 1$ неравенство Коши – Гельдера

$$\varphi_r(u) \le \varphi_{r+\alpha}(u), \forall\alpha > 0,$$

и последовательность норм не убывает с возрастанием индекса r от 0 до ∞, а точнее,

$$(1/\sqrt{6})\exp(-c/2 - 0{,}02) < \|a\|_r < 1/\sqrt{6},$$

где c – постоянная Маскерони.

8. Первое обобщенное свойство решения. Пусть предельная задача Крокко (1) имеет следующий вид:

$$2\varphi\frac{d^2\varphi}{du^2} + u^m = 0,$$
$$\varphi'(0) = \varphi(0) = 0.$$

Данное представление уравнения Крокко возникает из уравнения Буссинеска, если

$$k = k(h) = k_0(h/H)^{m-1}.$$

Тогда θ-аппроксимация решения предельной задачи (1а) имеет вид

$$\varphi_\theta^2(u) = \frac{(1-\theta^{b+1})(1-u^{m+2})}{(m+1)(m+2)}, \qquad (5а)$$

и, если применить среднеквадратичное осреднение по θ, то слабое решение имеет вид:

$$\varphi(u) = \frac{\sqrt{1-u^{m+2}}}{m+2},\quad a = \frac{1}{m+2}. \qquad (5б)$$

Тождество (4) записывается следующим образом:

$$\int_0^1 \left(\frac{d\varphi}{du}\right)^2 du = \frac{1}{2(m+1)}. \qquad (4а)$$

Условие минимума квадратичного функционала практически не меняется и выражается как

$$F(\varphi) = (1/2)\int_0^1 \left(\left(\frac{d\varphi}{du}\right)^2 + u^m \ln\frac{a}{\varphi}\right) du \to \inf \ge 0.$$

Величина диссипации в данном случае следует выражению

$$\mathfrak{D} = \frac{1}{m+2}\int_0^1 \sqrt{1-u^{m+2}}\,du =$$

$$= \frac{1}{(m+2)^2}\frac{\Gamma\left(\frac{1}{m+2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3m+8}{2(m+2)}\right)} = \qquad (6)$$

$$= O\left(\frac{1}{m+2}\right), m \gg 1,$$

и она уменьшается при увеличении m.

В силу тождества (4а) справедливо выражение

$$\bar{\varphi}(u) := \frac{\varphi(u)}{a} = \sqrt{1-u^{m+2}},$$

из которого видно, что с увеличением параметра m степень заполнения профиля

$$\bar{\varphi}(u) := \frac{\varphi(u)}{a}$$

увеличивается.

Вкладывая физическое содержание в решение, предположим, что $\varphi = \varphi(u)$ – трение в пограничном слое. Тогда трение на поверхности пластины, обтекаемой продольным вязким потоком, $a = \varphi(0)$ монотонно снижается и сохраняется от пристеночной к струйной части слоя:

$$\text{при } m \to \infty, \varphi(u) \to \varphi(0) = 0,$$
$$0 < u < 1.$$

9. Второе обобщенное свойство решения. Пусть уравнение Буссинеска и предельные условия для него имеют вид

$$\frac{\partial u^a}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial s}\left(u^b\left(\frac{\partial u}{\partial s}\right)^c\right),$$

где a, b, c – вещественные параметры;

$$D(u) = (t > 0,\ s > 0),$$
$$u(0, s) - 1 = u(t, 0) = 0.$$

Тогда соответствующее преобразование Крокко приводит это уравнение к виду

$$u^b = \frac{a}{c+1}\varphi(u)\left(-\frac{d}{du}\left(u^{1-a}\frac{d\varphi}{du}\right)\right)^c, \qquad (7)$$

причем предельные условия ставятся следующим образом:

$$\varphi(1) = \varphi'(0) = 0. \qquad (8)$$

В этом случае θ-решение предельной задачи (7), (8) имеет вид

$$\varphi_\theta(u) = \frac{(c+1)c^{\frac{c}{c+1}}}{a^{\frac{1}{c+1}}(b+c)^{\frac{c}{c+1}}(b+ac)^{\frac{c}{c+1}}}\times$$
$$\times\,\{(1-\theta^{b/c+1})(1-u^{a+b/c+1})\}^{\frac{c}{c+1}}. \qquad (9)$$

Примечание 1. Если в частном случае $a = b = 1$, то из формулы (9) следует выражение, известное как фильтрационная модель Христиановича для плоского фильтрационного потока:

$$\varphi_\theta(u) = \frac{\left(\left(1-\theta^{\frac{c+1}{c}}\right)\left(1-u^{\frac{2c+1}{c}}\right)\right)^{\frac{c}{c+1}}}{(c+1)^{\frac{c}{c+1}}}. \qquad (9a)$$

Тогда

$$a_\theta = \left(\frac{1-\theta^{\frac{c+1}{c}}}{c+1}\right)^{\frac{c}{c+1}},$$

и, далее

$$a^r = \frac{c}{(c+1)^{\frac{c(r+1)+1}{c}}}\frac{\Gamma\left(\frac{c}{c+1}\right)\cdot\Gamma\left(\frac{c(r+1)+1}{c+1}\right)}{\Gamma\left(\frac{c(r+2)+1}{c+1}\right)},$$

при этом $r \ge 0$.

Очевидно, что

$$\overline{\varphi}(u) := \frac{\varphi(u)}{a} = \left(1-u^{\frac{2c+1}{c}}\right)^{\frac{c}{c+1}},$$

и с уменьшением параметра c происходит заполнение профиля безразмерного распределения $\overline{\varphi}(u)$.

Например, если $c = 1/2$, то

$$\overline{\varphi}(u) = (1-u^4)^{1/3};$$

а если $c = 1/3$, то

$$\overline{\varphi}(u) = (1-u^5)^{1/4}.$$

Примечание 2. Пусть $a = 1$; b, c — свободные параметры. Тогда, в силу θ-решения (9), получаем выражения

$$\varphi_\theta(u) = \frac{(c+1)c^{\frac{c}{c+1}}}{(b+c)^{\frac{2c}{c+1}}}\{(1-\theta^{b/c+1})(1-u^{b/c+2})\}^{\frac{c}{c+1}},$$

$$\overline{\varphi}(u) = (1-u^{b/c+2})^{\frac{c}{c+1}},$$

и при увеличении параметра b заполнение профиля $\overline{\varphi}(u)$ увеличивается.

Например, если $c = 1/2$, то

$$\overline{\varphi}(u) = (1-u^{2(b+1)})^{1/3} \underset{b\to\infty}{\to} 0,\ \ 0 < u < 1.$$

Выводы

В результате проведенного исследования установлено следующее.

Типичная предельная задача Крокко допускает положительную и отрицательную ветви решения (φ^+ и φ^-), такие что

$$\varphi^+(u) + \varphi^-(u) = 0.$$

Однородная предельная задача Крокко редуцируется на две типичные предельные задачи Крокко, сопрягаемые в критической точке $u = u^*$, такой что

$$0 < u_0 < u^* < 1,$$

$$\left(\frac{d\varphi}{du}\right)_{u=u^*} = \varphi(u^*-0) - \varphi(u^*+0) = 0.$$

Типичная предельная задача Крокко равносильна нелинейному интегральному уравнению. Последнее решается прямым вычислением интеграла с использованием второй теоремы о среднем. Параметр осреднения исключается интегрированием по параметру в промежутке (0, 1).

В данной статье демонстрируются расширения предложенного способа решения. Для классического случая $a = b = c = 1$ слабое θ-решение незначительно отличается от точного. Приближенное значение постоянной Блазиуса $a = \varphi(0)$ оказывается равным 1/3. При этом точное значение $\varphi(0) = 0,33206$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Crocco L.** Sulla strato limite laminare nei gas lungo una lamina plana // Rend. Math. Appl. Ser. 5. 1941. Vol. 21. No. 2. Pp. 138–152.

2. **Полубаринова-Кочина П.Я.** Теория движения грунтовых вод. 2-е изд. М.: Наука, 1977. 664 с.

3. **Петриченко М.Р.** Предельная задача Буссинеска и ее гидравлическое приложение // Сб. трудов заочной конф. «Научное обозрение физико-математических и технических наук в XXI веке». М.: «Prospero», 2015. С. 3–7.

4. **Петриченко М.Р.** Предельные задачи Крокко в теории струй вязкой жидкости // Сб. трудов заочной конф. «Научное обозрение физико-математических и технических наук в XXI веке». М.: «Prospero», 2016. С. 10–14.

5. **Nemova D., Reich E., Subbotina S., Khayrutdinova E, Petrichenko M.**

Heat and mass transfer in a vertical channel under heat-gravitational convection conditions // Experimental Fluid Mechanics Proceedings of the International Conference. Prague, 2015. Pp. 604–616.

6. **Akdi M., Sedra M.B.** Numerical solution of the Blasius problem //The African Review of Physics. 2014. Vol. 9. No. 0022. Pp. 165–168;

7. **Allan F.M., Syam M.I.** On the analytic solutions of the nonhomogeneous Blasius problem // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2005. Vol. 182. No. 2. Pp. 362–371.

8. **Aminikhah H.** Analytical approximation to the solution of nonlinear Blasius viscous flow equation by LTNHPM // International Scholarly Research Network. ISRN Mathematical Analysis. 2012. Vol. 2012. Article ID 957473 (10 p.).

9. **Aminikhah H.**, **Kazemi S.** Numerical solution of the Blasius viscous flow problem by quartic B-spline method // Hindawi Publishing Corporation. International Journal of Engineering Mathematics. 2016. Vol. 2016. Article ID 9014354 (6 p.). http://dx.doi.org/10.1155/2016/9014354.

10. **Andrzejczak G., Nockowska-Rosiak M., Przeradzk B.** A note on Blasius type boundary value problems // Opuscula Math. 2013. Vol. 33. No. 1. Pp. 5–17.

11. **Bataller R.C.** Numerical comparisons of Blasius and Sakiadis flows // Matematika. 2010. Vol. 26. No. 2. Pp. 187–196.

12. **Cortell R.** Numerical solutions of the classical Blasius flat-plate problem // Applied Mathematics and Computation. 2005. Vol. 170. No. 1. Pp. 706–710.

13. **Chang C.-W., Liu C.-S.** The Lie-group shooting method for boundary layer equations in fluid mechanics // Proceedings of the Conference of Global Chinese Scholars on Hydrodynamics. Beijing, 2006 –07. Pp. 103–108.

14. **Fang T., Lee C.F.** A moving-wall boundary layer flow of as slightly rarefied gas free stream over a moving flat plate // Applied Mathematics Letters. 2005. Vol. 18. No. 5. Pp. 487–495.

15. **Tiegang Fang, Wei Liang, Chia-fon F. Lee.** A new solution branch for the Blasius – A shrinking equation sheet problem // Computers and Mathematics with Applications. 2008. Vol. 56. No. 12. Pp. 3088–3095.

16. **Fazio R.** Blasius problem and Falkner – Skan model: Tupfer's algorithm and its extension // Computers & Fluids. 2013. Vol. 73. 15 March. Pp. 202–209.

17. **Goh J., Majid A.A., Ismail A.I.M.** A quatic B-spline for second-order singular boundary value problems // Computers and Mathematics with Applications. 2012. Vol. 64. No. 12. Pp. 115–120.

18. **He J.-H.** A simple perturbation approach to Blasius equation // Applied Mathematics and Computation. 2003. Vol. 140. No. 2–3. Pp. 217–222.

19. **Chein-Shan Liu, Jiang-Ren Chang.** The Lie-groups shooting method for multiple-solutions of Falkner – Skan equation under suction-injection conditions // International Journal of Non-Linear Mechanics. 2008. Vol. 43. No. 9. Pp. 844–851.

20. **Liu C.-S.** Cone of non-linear dynamical system and group preserving schemes // International Journal of Non-Linear Mechanics. 2001. Vol. 36. No. 7. Pp. 1047–1068.

21. **Liu C.-S.** The Lie-group shooting method for nonlinear two-point boundary value problems exhibiting multiple solutions // Comput. Model. Eng. Sci. 2006. Vol. 13. No. 2. Pp. 149–163.

22. **Ding Xu, Xin Guo.** Fixed point analytical method for nonlinear differential equations // Journal of Computational and Nonlinear Dynamics. 2013. Vol. 8. No. 1. P. 011005 (9 p.)

23. **Варин В.П.** Плоские разложения и их приложения. М.: Препринты ИПМ РАН им. М.В. Келдыша, 2014. № 23. 25 с. URL: http://keldysh.ru/papers/2014/prep2014_23. pdf.

24. **Варин В.П.** Плоские разложения и их приложения // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2015. Т. 55. № 5. С. 807–821.

25. **Варин В.П.** Плоский асимптотический ряд Блазиуса // Математический форум (сборник). Сер. «Итоги науки. Юг России». Владикавказ, 2015. С. 34–47.

26. **Варин В.П.** Специальные решения уравнения Чейзи. Препринты ИПМ РАН им. М.В. Келдыша. 2015. № 43. 39 с. http://keldysh.ru/papers/2015/prep2015_43_eng.pdf.

27. **Варин В.П.** Специальные решения уравнения Шази // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2017. Т. 57. № 2. С. 210–236.

28. **Варин В.П.** Интегрирование ОДУ на Римановых поверхностях как вычислительный инструмент // Теоретические основы конструирования численных алгоритмов и решение задач математической физики. Тез. докл. XXI Всерос. конф. и молод. школы-конф., посв. памяти К.И. Бабенко. Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. 2016. С. 73–74.

29. **Фаиз Ахмад.** Применение уравнение Крокко – Ванга к решению задачи Бласиуса // Электронный журнал «Техническая акустика». http://ejta.org, 2007, 2.

Статья поступила в редакцию 23.05.2018, принята к публикации 04.06.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПЕТРИЧЕНКО Михаил Романович – *доктор технических наук, заведующий кафедрой гидравлики и прочности Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

ЗАБОРОВА Дарья Дмитриевна – *ассистент кафедры гидравлики и прочности Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

КОТОВ Евгений Владимирович – *аспирант кафедры гидравлики и прочности Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ekotov.cfd@gmail.com

МУСОРИНА Татьяна Александровна – *аспирантка кафедры гидравлики и прочности Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
flamingo-93@mail.ru.

REFERENCES

[1] **L. Crocco,** Sulla strato limite laminare nei gas lungo una lamina plana, Rend. Math. Appl., Ser. 5. 21 (2) (1941) 138–152.

[2] **P.Ya. Polubarinova-Kochina,** Teoriya dvizheniya gruntovykh vod [Groundwater movement theory], 2nd ed., Nauka, Moscow, 1977.

[3] **M.R. Petrichenko,** Predelnaya zadacha Bussineska i yeye gidravlicheskoye prilozheniye [The Boussinesq limit problem and its hydraulic application], In the collection of scientific papers “The Scientific Review of Physics, Mathematics and Engineering Sciences for the 21th Century”, “Prospero” publ. house, Moscow (2015) 3–7.

[4] **M.R. Petrichenko,** Predelnyye zadachi Krokko v teorii struy vyazkoy zhidkosti [The Crocco limit problems in the viscous-fluid jet theory], In the collection of scientific papers “The Scientific Review of Physics, Mathematics and Engineering Sciences for the 21th Century”, “Prospero” publ. house, Moscow, (2016) 10–14.

[5] **D. Nemova, E. Reich, S. Subbotina, et al.,** Heat and mass transfer in a vertical channel under heat-gravitational convection conditions, Experimental Fluid Mechanics Proceedings of the International Conference, Prague (2015) 604–616.

[6] **M. Akdi, M.B. Sedra,** Numerical solution of the Blasius problem, The African Review of Physics 9 (0022) (2014) 165–168.

[7] **F.M. Allan, M.I. Syam,** On the analytic solutions of the nonhomogeneous Blasius problem, Journal of Computational and Applied Mathematics. 182 (2) (2005) 362–371.

[8] **H. Aminikhah,** Analytical approximation to the solution of nonlinear Blasius viscous flow equation by LTNHPM, International Scholarly Research Network, ISRN Mathematical Analysis. 2012 (2012) ID 957473 (10 p).

[9] **H. Aminikhah, S. Kazemi,** Numerical solution of the Blasius viscous flow problem by

quartic B-spline method, Hindawi Publishing Corporation, International Journal of Engineering Mathematics. 4 (2016) ID 9014354 (6 p), http://dx.doi.org/10.1155/2016/9014354..

[10] **G. Andrzejczak, M. Nockowska-Rosiak, B. Przeradzk,** A note on Blasius type boundary value problems, Opuscula Math. 33 (1) (2013) 5–17.

[11] **R.C. Bataller,** Numerical comparisons of Blasius and Sakiadis flows, Matematika. 26 (2) (2010) 187–196.

[12] **R. Cortell,** Numerical solutions of the classical Blasius flat-plate problem, Applied Mathematics and Computation. 170 (1) (2005) 706–710.

[13] **C.-W. Chang, C.-S. Liu,** The Lie-group shooting method for boundary layer equations in fluid mechanics, Proceedings of the Conference of Global Chinese Scholars on Hydrodynamics, Beijing, 2006 –07, 103–108.

[14] **T. Fang, C.F. Lee,** A moving-wall boundary layer flow of as slightly rarefied gas free stream over a moving flat plate, Applied Mathematics Letters. 18 (5) (2005) 487–495.

[15] **Tiegang Fang, Wei Liang, Chia-fon F. Lee,** A new solution branch for the Blasius – A shrinking equation sheet problem, Computers and Mathematics with Applications. 56 (12) (2008) 3088–3095.

[16] **R. Fazio,** Blasius problem and Falkner – Skan model: Tupfer's algorithm and its extension, Computers & Fluids. 73 (15 March) (2013) 202–209.

[17] **J. Goh, A.A. Majid, A.I.M. Ismail,** A quatic B-spline for second-order singular boundary value problems, Computers and Mathematics with Applications. 64 (12) (2012) 115–120.

[18] **J.-H. He,** A simple perturbation approach to Blasius equation, Applied Mathematics and Computation. 140 (2003) 217–222.

[19] **Chein-Shan Liu, Jiang-Ren Chang,** The Lie-groups shooting method for multiple-solutions of Falkner – Skan equation under suction-injection conditions, International Journal of Non-Linear Mechanics. 43 (2008) 844–851.

[20] **C.-S. Liu,** Cone of non-linear dynamical system and group preserving schemes, International Journal of Non-Linear Mechanics. 36 (7) (2001) 1047–1068.

[21] **C.-S. Liu,** The Lie-group shooting method for non-linear two-point boundary value problems exhibiting multiple solutions, Comput. Model. Eng. Sci. 13 (2) (2006) 149–163.

[22] **Ding Xu, Xin Guo.** Fixed point analytical method for nonlinear differential equations, Journal of Computational and Nonlinear Dynamics. 8 (1) (2013) 011005 (9 p).

[23] **V.P. Varin,** Flat expansions and their applications, Moscow, KIAM Preprint (23) (2014). URL: http://keldysh.ru/papers/2014/prep2014_23.eng.pdf.

[24] **V.P. Varin,** Flat expansions and their applications, Computational Mathematics and Mathematical Physics. 55 (5) (2015) 797–810.

[25] **V.P. Varin,** Ploskiy asimptoticheskiy ryad Blaziusa [The Blasius's flat asymptotic expansion], In: Mathematics Forum Ser. "Sciences summary, The South of Russia" (2015) 34–47.

[26] **V.P. Varin,** Special solutions to Chazy equation, Moscow, KIAM Preprint (43) (2015). http://keldysh.ru/papers/2015/prep2015_43_eng.pdf.

[27] **V.P. Varin,** Special solutions to Chazy equation, Computational Mathematics and Mathematical Physics. 57 (2) (2017) 211–235.

[28] **V.P. Varin,** Integrirovaniye ODU na Rimanovykh poverkhnostyakh kak vychislitelnyy instrument, [ODE integration on the Riemann surfaces as numerical instrument], In: Teoreticheskiye osnovy konstruirovaniya chislennykh algoritmov i resheniye zadach matematicheskoy fiziki [Theoretical foundation of synthesizing the numerical algorithms and the solution of math-physical problems], Tezisy dokladov XXI Vserossiyskoy konferentsii i Molodezhnoy shkoly-konferentsii, posvyashchennoy pamyati K.I. Babenko [Sci. abstracts of the 21th All-Russian Conf. and the Youth School-Conf. Dedicated to the Memory of K.I. Babenko], KIAM (2016) 73–74.

[29] **Faiz Ahmad,** Application of Crocco – Wang equation to the Blasius problem, Electronic Journal "Technical Acoustics", http://www.ejta.org, 2007, 2.

Received 23.05.2018, accepted 04.06.2018.

THE AUTHORS

PETRICHENKO Mikhail R.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
fonpetrich@mail.ru

ZABOROVA Dariya D.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
zaborova-dasha@mail.ru

KOTOV Eugeniy V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
ekotov.cfd@gmail.com

MUSORINA Tatiana A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
flamingo-93@mail.ru

ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

DOI: 10.18721/JPM.11304
УДК 628.9

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВОГО РЕЖИМА В МОЩНЫХ СВЕТОДИОДНЫХ МАТРИЦАХ

А.В. Аладов[1], И.В. Белов[2], В.П. Валюхов[3], А.Л. Закгейм[1], А.Е. Черняков[1]

[1] Научно-технологический центр микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

[2]Университет Йончёпинг, Инженерная школа, г. Йончёпинг, Швеция;

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

В работе теоретически и экспериментально исследовались зависимости теплового сопротивления и распределения температуры по площади от тока высокомощных AlGaInN светодиодных матриц, изготовленных по технологии «чип на плате» (chip-on-board). Экспериментальные исследования тепловых процессов проводились как методом релаксации прямого напряжения с использованием прибора T3Ster, так и с применением инфракрасной термографии. Для интерпретации экспериментальных результатов проводилось трехмерное численное моделирование распределения тепла и теплообмена в светодиодной матрице с помощью программного пакета Flotherm 10.1. Получено хорошее соответствие между экспериментальными и расчетными данными. Для оценки влияния деформации платы был предложен метод разбивки теплового сопротивления между радиатором и алюминиевой платой со светодиодной матрицей на зоны для моделирования влияния тепловой деформации. Применение модифицированной CFD-модели позволило прогнозировать распределение температурных полей, наблюдаемых в эксперименте. Деформация платы была подтверждена прямым измерением кривизны поверхности светодиодной матрицы.

Ключевые слова: светодиод, светодиодная матрица, тепловое сопротивление, ИК-термография, CFD-модель

Ссылка при цитировании: Аладов А.В., Белов И.В., Валюхов В.П., Закгейм А.Л., Черняков А.Е. Исследование теплового режима в мощных светодиодных матрицах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 39–51. DOI: 10.18721/JPM.11304

A STUDY OF THERMAL REGIME IN THE HIGH-POWER LED ARRAYS

A.V. Aladov[1], I.V. Belov[2], V.P. Valyukhov[3], A.L. Zakgeim[1], A.E. Chernyakov[1]

[1] Submicron Heterostructures for Microelectronics, Research & Engineering Center of RAS, St. Petersburg, Russian Federation;

[2] Jönköping University, School of Engineering, Jönköping, Sweden;

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

Thermal resistance and temperature distribution for high-power AlGaInN LED chip-on-board arrays were measured by different methods and tools. The *p—n* junction temperature was determined through measuring a temperature-dependent forward voltage drop on the *p—n* junction, at a low measuring current after applying a high heating current. Furthermore, the infrared thermal imaging technique was employed to obtain the temperature map for the test object. A steady-state 3D computational model of the experimental setup was created including temperature-dependent power dissipation in the LED chips. Simulations of the heat transfer in the LED array were performed to further investigate temperature gradients observed in the measurements. Simulations revealed possible thermal deformation of the assembly as the reason for the hot spot formation. The bending of the assembly was confirmed by surface curvature measurements.

Key words: LED, LED matrix, thermal resistance, infrared thermography, thermal interface, CFD model

Citation: A.V. Aladov, I.V. Belov, V.P. Valyukhov, A.L. Zakgeim, A.E. Chernyakov, A study of thermal regime in the high-power LED arrays, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 39–51. DOI: 10.18721/JPM.11304

Введение

Одной из главных тенденций последних лет в разработке и применении светодиодных (СД) источников для общего освещения является постоянное увеличение рабочих токов и плотности монтажа излучающих кристаллов в матрицах для обеспечения все более высоких значений выходной мощности [1, 2]. Повышение мощности и усложнение конструкции СД-источников света требует особого внимания к тепловым процессам как внутри отдельных СД, так и матрицы в целом; при этом не следует ограничиваться только оценкой общего теплового сопротивления, необходимо детально анализировать распределение температурных полей по площади (температурный мэппинг).

Поскольку температура в значительной степени влияет на значение внутреннего квантового выхода (ВКВ), ее распределение становится фактором, определяющим общие выходные характеристики СД-матриц (оптическую мощность и КПД). Соответственно, исследование неоднородности температурного распределения по площади матрицы как функции тока, представляется особенно важным применительно к современным СД-матрицам большой мощности.

Цель данной работы — детальный анализ теплового сопротивления и распределения температуры в высокомощных светодиодных матрицах белого свечения.

Экспериментальная часть

Экспериментально исследовались тепловые процессы СД-матриц. Последние были изготовлены по технологии «chip-on-board» [3] с применением высокомощных AlInGaN СД-кристаллов конструкции «face-up» [4]. В данном контексте особый интерес представляет проблема точного определения температурных градиентов на поверхности СД-матрицы, связанных с неравномерным выделением и отводом тепла от каждого кристалла в этой матрице. С этой целью было проведено как детальное моделирование теплового и токового распределения в реальной СД-матрице, так и экспериментальное определение прямыми и косвенными методами температуры излучающих кристаллов, расположенных в различных точках матрицы.

Прямой метод оценки температуры СД-кристаллов основан на использовании инфракрасного термографирования с высоким разрешением с применением ИК-тепловизора СВИФТ [5, 6]. Тепловое сопротивление измерялось методом релаксации температурочувствительного параметра — прямого напряжения с помощью прибора Thermal Transient Tester T3Ster [7, 8].

Данный раздел содержит описание экспериментальных образцов и применяемых экспериментальных методов оценки тепловых характеристик, включающих измерение тепловых сопротивлений, ИК-мэппинг, а также измерение тепловой деформации платы СД в рабочем режиме.

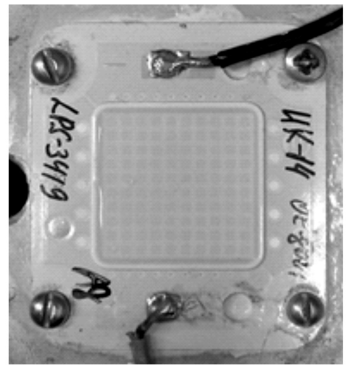
Объекты исследования. В работе исследовались мощные матрицы на основе коммерческих кристаллов компании Epistar “ES-CABLV45P”. Излучающие кристаллы имели конструкцию “face-up” [9], в которой эпитаксиальная гетероструктура AlInGaN сохраняется на сапфировой подложке с низкой теплопроводностью (≈ 0,34 Вт/(см·K)). Оба контакта расположены на лицевой стороне, и вывод света осуществляется через полупрозрачный *p*-контакт. Излучающие кристаллы имели сложную «разветвленную» топологию электродов для достижения равномерного распределения тока при рабочем токе 400 мА [10]. СД-кристаллы размером 1140 × 1140 мкм и толщиной 150 мкм были смонтированы на алюминиевой печатной плате MPCB методом “chip on board” (COB). СД-матрица представляла из себя сборку из 100 кристаллов, размером 45 × 45 × 1,0 мм, суммарной входной мощностью до 100 Вт, что соответствует току 350 мА, проходящему через отдельный кристалл.

Светодиодная матрица содержала 10 параллельно соединенных светодиодных линеек, каждая из которых включала 10 кристаллов, соединенных последовательно. Общая площадь светодиодной матрицы составила 20 × 20 мм. Кристаллы были защищены силиконовым гелем с люминофором.

Алюминиевая плата с СД-матрицей была привинчена к радиатору. Диагональное расстояние между головками винтов крепления платы к радиатору составило 44 мм. Внешний вид СД-матрицы и поперечное сечение конструкции показаны на рис. 1.

Измерение тепловых сопротивлений. Тепловое сопротивление определяется на основе термоэлектрической аналогии, где вместо электрического тока рассматривается тепловой поток, а вместо напряжения – температура. Тепло распространяется от активной области к основанию кристалла, далее к алюминиевой плате носителю через клей, далее через термопасту к радиатору,

a)



b)

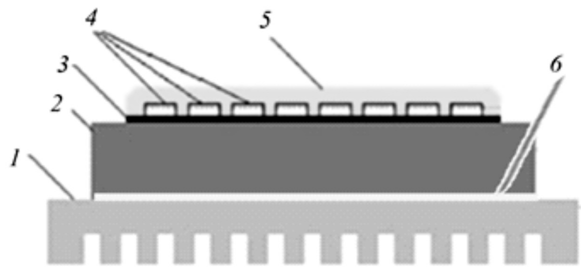


Рис. 1. Внешний вид СД-матрицы сверху (*a*) и схематическое изображение ее поперечного сечения (*b*):
1 – радиатор, *2* – алюминиевая плата, *3* – клей, *4* – СД-кристаллы, *5* – силиконовый гель, 6 – термопаста

которые составляют элементы эквивалентной тепловой цепи: СД-кристалла (R_{chip}), клея (R_{glue}), алюминиевой платы ($R_{Al\ plate}$). Подобная цепь в рамках модели Кауэра состоит из набора тепловых резисторов, подключенных через тепловые емкости к общей шине. Теплоемкости различных слоев конструкции СД-матрицы влияют лишь на переходные характеристики – скорости разогрева или охлаждения прибора при включении/выключении тока.

Для определения теплового сопротивления методом температурочувствительного параметра – времени релаксации прямого напряжения, первоначально матрица включается на малый тестовый ток 50 мА. При таком токе саморазогрев прибора исключен, и температура *p*–*n*-перехода задается внешним нагревателем в диапазоне 20 – 100 °C с точностью 0,5 °C. Прямое напряжение регистрируется как функция температуры. Таким образом получается калибровочная кривая «прямое напряжение–температура», близкая к линейной зависимости с коэффициентом – 13 мВ/К. Это значение в дальнейшем используется для определения температуры *p–n*-перехода в реальном рабочем режиме.

Релаксация прямого напряжения (переходная характеристика) исследовалась при быстром переключении с малого тестового на большой рабочий ток. С этого момента начинался разогрев прибора с распространением теплового потока от активной области через кристалл, печатную плату к радиатору и окружающей среде. Изменение температуры *p–n*-перехода в процессе разогрева регистрировалось по изменению прямого напряжения в момент подачи коротких импульсов тестового тока, «прорезающих» постоянный греющий рабочий ток с определенной частотой. Последующий математический анализ переходной характеристики напряжения на *p–n*-переходе, с привлечением аппарата структурной функции [11], позволяет рассчитать компоненты эквивалентной тепловой цепи $R_{th,i}$, $C_{th,i}$, общее тепловое сопротивление ΣR_{th} и полную теплоемкость ΣC_{th}. График непрерывной кумулятивной структурной функции аппроксимировался ступенчатой функцией, являвшейся прямым представлением модели Кауэра теплового импеданса. Более детально с методами переходных характеристик и привлекаемым математическим аппаратом можно ознакомиться в работе [12] и приводимых в ней ссылках.

Прибор T3Ster первоначально предназначался для электронных устройств, и обработка данных предполагала, что электрическая мощность, подаваемая на устройство, полностью преобразуется в тепло. В современных высокоэффективных СД значительная доля подводимой электрической мощности преобразуется в световое излучение и, следовательно, не участвует в нагреве устройства. Для учета этого выходная оптическая мощность P_{opt} измерялась с помощью оборудования с интегрирующей сферой – «OL 770-LED High speed LED Test and Measurement» [13]. КПД исследуемых излучателей составлял 15 – 20 % (в зависимости от входного тока). Соответствующая часть входной мощности, уносимая излучением, учитывалась при расчете теплового сопротивления.

ИК-термография. ИК-тепловизор СВИФТ с областью чувствительности в диапазоне 2,5 – 3,0 мкм [10] использовался для определения температуры поверхности СД-матрицы. Непосредственное измерение температуры с помощью тепловизора позволяет получать ее распределение по площади (так называемый температурный мэппинг).

Основными методическими проблемами теплового отображения структур на основе AlInGaN являлись прозрачность сапфировой подложки и эпитаксиальных слоев для длин волн ИК-диапазона и большая разница в излучательной способности материалов, используемых в СД, то есть полупроводниковых слоев, металлических контактов, отражающих покрытий, монтажных элементов и т. п. [14]. По этой причине для корректного пересчета интенсивности ИК-излучения в температуру требуется предварительная калибровка. Такая

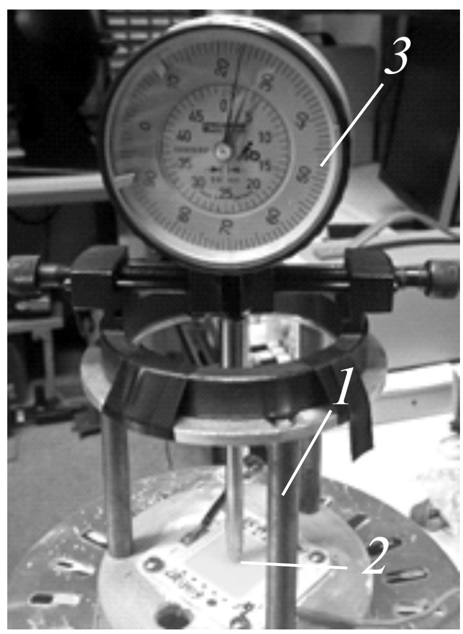


Рис. 2. Фотография сферометра, использованного для измерения радиуса кривизны СД-матрицы:
1 – металлический штатив, *2* – заостренный наконечник, *3* – индикатор

калибровка проводилась под контролем температуры с помощью внешнего нагревателя в диапазоне 20 – 100 °С посредством записи ИК-излучения СД-матрицы при нулевом токе. Используя указанный выше подход, удалось провести измерения температуры с точностью до 2 К.

Измерения кривизны поверхности. Для оценки тепловой деформации СД-матрицы в процессе работы, использовался сферометр с индикатором часового типа фирмы Suss (Германия). С его помощью измеряли уровень подъема центра СД-матрицы в рабочем режиме (при протекании тока 3,5 А), по сравнению с положением этого центра при нулевом токе.

Сферометр состоит из металлического штатива, закрепленного на трех фиксированных ножках одинаковой длины (рис. 2 [15]), заостренного наконечника, проходящего по центру рамы параллельно трем опорам, и стандартного индикатора часового типа с градуировкой 0,01 мм, показывающего высоту наконечника выше или ниже поверхности, на которой находятся ножки сферометра. Смещение наконечника можно считывать с точностью до 5 мкм.

Гидродинамическая CFD-модель

На первом этапе моделирования теплорастекания использовалась стационарная гидродинамическая модель (Computational Fluid Dynamics, CFD) для плоской матрицы, а затем (второй этап) учитывалась возможная деформация СД-матрицы (возникновение кривизны теплоотводящей поверхности).

Стационарная CFD-модель, описывающая тепловые процессы в экспериментальных образцах, была создана в программе

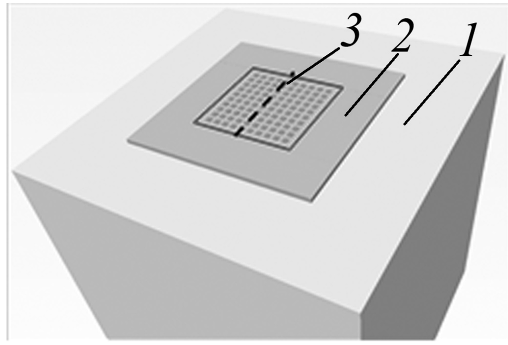


Рис. 3. CFD-модель экспериментальной установки:
1 – алюминиевый блок; *2* – СД-матрица, «покрытая силиконовым гелем»; *3* –исследованная центральная часть матрицы (обозначена пунктиром)

Flotherm 10.1 от компании Mentor Graphics (рис. 3 [16]). Цель моделирования состояла в том, чтобы воспроизвести результаты, полученные в эксперименте, и исследовать причины температурных градиентов между центром и периферией СД-матрицы. Массивный алюминиевый радиатор, имеющий цилиндрическую форму, был представлен алюминиевым блоком, а эффект от охлаждающих ребер – высоким коэффициентом теплопередачи (10000 Вт/(м^2·К)), приложенным к стенкам алюминиевого блока.

Слой клея, который использовался для монтажа чипа, и слой термопасты (толщина 15 мкм) между пластиной и радиатором были смоделированы как тепловые сопротивления на соответствующих интерфейсах. Слой защитного силиконового геля имел толщину 300 мкм. Тепловое сопротивление клея, равное 2,6 К/Вт для каждого чипа, было получено из совокупной структурной функции, соответствующей греющему току в 1 А. Указанное значение тока обе-

Таблица

Термофизические свойства моделируемой системы [16 –18]

Элемент системы (материал)	Теплопроводность, Вт/(м·К)	Плотность, кг/м^3
СД-кристалл (сапфир)	36,0	3980,0
Плата и радиатор (алюминий)	201,0	2710,0
Защитный гель (силикон)	1,0	1000,0
Термопаста	0,67	–

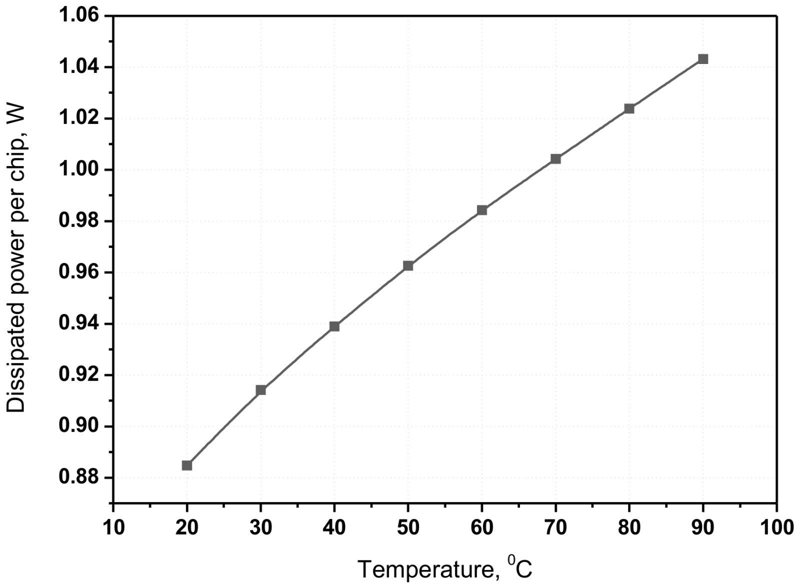


Рис. 4. Зависимость рассеиваемой мощности от температуры на одном СД-кристалле

спечивало наиболее равномерный нагрев СД-матрицы. Термофизические свойства материалов приведены в таблице.

На границах расчетной области заданы условия постоянного давления. Температура окружающей среды составляла 20 °C. В модели также учитывалось тепловое излучение. Для расчета была использована алгебраическая модель турбулентности. Результаты, не зависящие от расчетной сетки, были получены путем вычисления модели с различной плотностью ячеек. Расчетная область содержала 1,8 млн. ячеек с частными сетками для СД-кристалла, силиконового геля и алюминиевой платы. Зависимость выделяемой мощности СД от температуры, при фиксированном напряжении на СД (рис. 4), была получена по результатам измерений отдельного кристалла и учитывала оптическое охлаждение.

Результаты и их обсуждение

Результаты измерения теплового сопротивления для СД-матрицы представлены в виде кумулятивных структурных функций на рис. 5. По горизонтальной оси отложены значения теплового сопротивления R_{th}, по вертикальной – значения теплоемкости C_{th} (в логарифмическом масштабе) от источника тепла до окружающей среды.

Значение общего теплового сопротивления

$$\Sigma R_{th} = R_{chip} + R_{glue} + R_{Al\ plate} \quad (1)$$

получено для трех токов: 1,0; 3,5 и 4,0 А. При этом, как можно видеть, с ростом тока величина (1) увеличивается от 0,3 до 0,5 К/Вт (примерно в 1,7 раза). Точки перегиба на кривых показывают значение теплового сопротивления при движении вдоль тепловой цепи. Причиной роста теплового сопротивления с током могло быть его перераспределение в пользу центральных линеек, по сравнению с периферийными и, таким образом, уменьшение размеров области генерации тепла и, соответственно, сечения теплоотвода. Однако проверка показала, что разница в токах несущественна (в пределах 4 %), и, соответственно, выделение тепла может считаться почти однородным во всей СД-матрице. Следовательно, рост теплового сопротивления с током обусловлен не изменением генерации тепла, а изменением условий теплоотвода.

Передача тепла от центра матрицы к окружающей среде становится хуже, чем

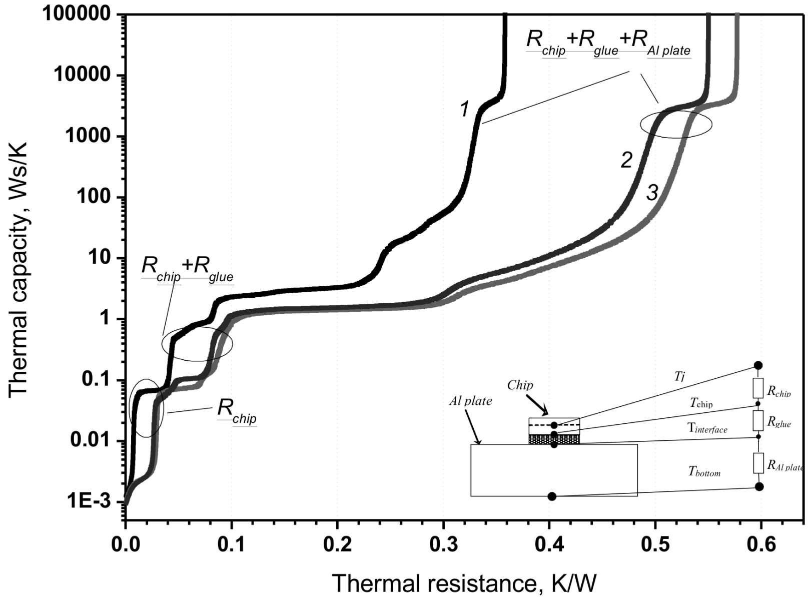


Рис. 5. Кумулятивные структурные функции (зависимости теплоемкости от теплового сопротивления) для СД-матрицы при разных токах, А: 1,0 (*1*) 3,5 (*2*) и 4,0 (*3*). На вставке дана упрощенная схема тепловой цепи

на периферии пластины. Последнее было подтверждено прямым измерением распределения тепла с помощью ИК-тепловизора. Наблюдаемое распределение температуры вдоль центральной оси матрицы показано на рис. 6. Заметная разница температур, достигающая 13 K, наблюдается между центральной и периферийной частями матрицы.

Первые результаты моделирования показали, что максимальная разница между значениями температуры в центре и на периферии СД-матрицы составляет 3 – 4 K.

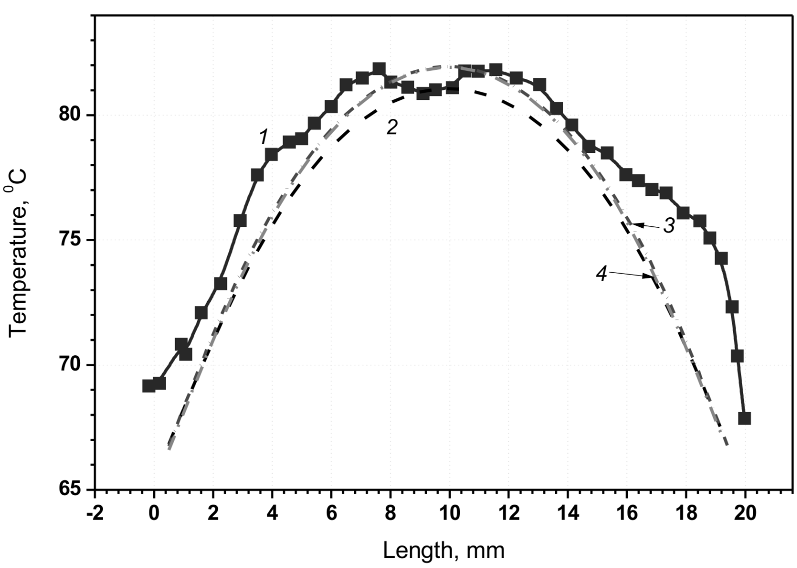


Рис. 6. Экспериментальные (символы *1*) и расчетные (линии *2* – *4*) температурные распределения вдоль центральных осей СД-матриц

Первоначально в CFD-модели предполагалось, что тепловое сопротивление между алюминиевой платой и радиатором не меняется в различных точках, то есть слой термопасты между алюминиевой пластиной и радиатором предполагался однородным.

В результате анализа расчетных данных и тщательного осмотра образцов СД-матриц было выдвинуто предположение, что изменение температуры (вплоть до 13 K) между центральными и периферийными чипами может быть вызвано изгибом алюминиевой платы. Изгиб же возникает ввиду интенсивного нагрева СД-кристаллов при жестких механических ограничениях, которые создаются винтами по углам пластины.

Тепловая деформация СД-матрицы была измерена сферометром в двух точках: в центре алюминиевой пластины и рядом с одним из винтов. Вертикальный сдвиг в рабочем режиме в центре СД-матрицы составил 80 мкм, а около винта практически не изменился. Следовательно, эксперимент подтвердил, что перегрев в центре СД-матрицы обусловлен тепловой деформацией алюминиевой пластины, приводящей к ухудшению теплового контакта между алюминиевой пластиной и радиатором.

Ухудшение теплового сопротивления на границе раздела между алюминиевой платой и радиатором было учтено в модели путем разбивки тепловых сопротивлений между радиатором и алюминиевой платой на зоны. На рис. 7 приведены примеры разбивки алюминиевой платы на 4 и 6 зон тепловых сопротивлений. Основанием для такой разбивки стало то, что из-за изгиба алюминиевой платы изменение (рост) теплового сопротивления вблизи ее краев должно быть меньше, по сравнению с центральной частью. Значения тепловых сопротивлений, присвоенные отдельным зонам, были получены в результате калибровки смоделированных температур относительно результатов измерений в центральной части СД-матрицы (температура поверхности силикона выше 80 – 82 °C для центральных чипов, и выше 65 – 68 °C для периферии, см. рис. 6). Кроме этого, результаты разбивки на тепловые зоны были сопоставлены с результатами для сопротивления равномерного слоя термопасты (без разбивки на зоны). Использование в модели зон теплового сопротивления привело к хорошему согласованию с экспериментальными данными в измеренном диапазоне температур. Значения теплового сопротивления для тепловых зон представлены на рис. 8, а результаты моделирования и сравнения между измеренными дан-

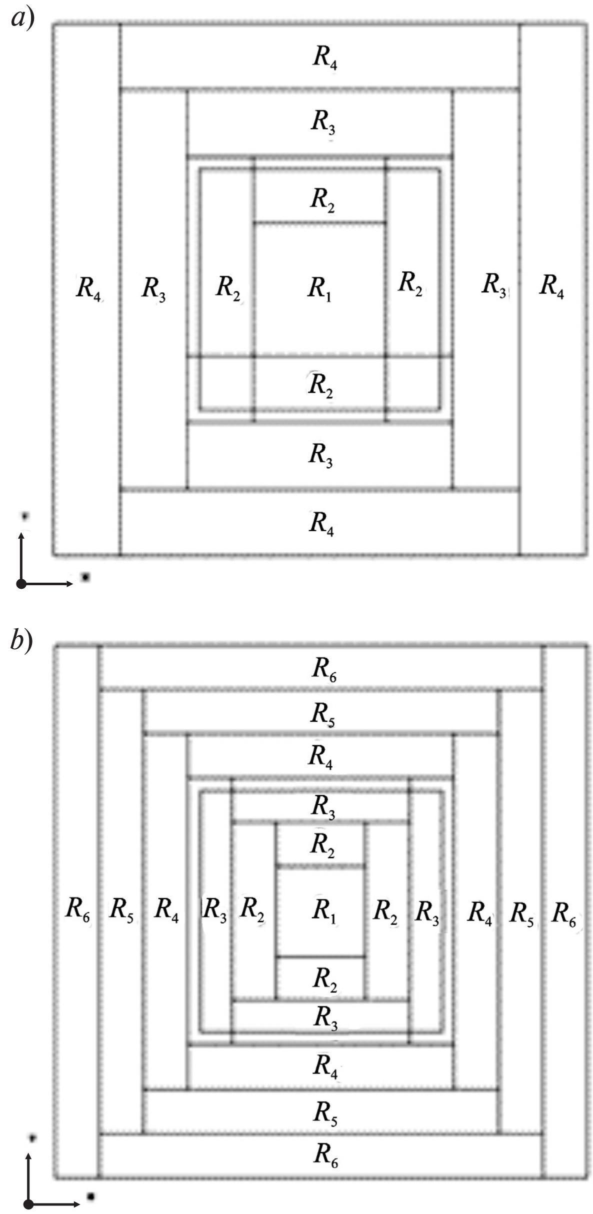


Рис. 7. Выбранные способы разбивки модели алюминиевой платы на 4 (*a*) и 6 (*b*) зон теплового сопротивления (R_i – сопротивление *i*-ой зоны)

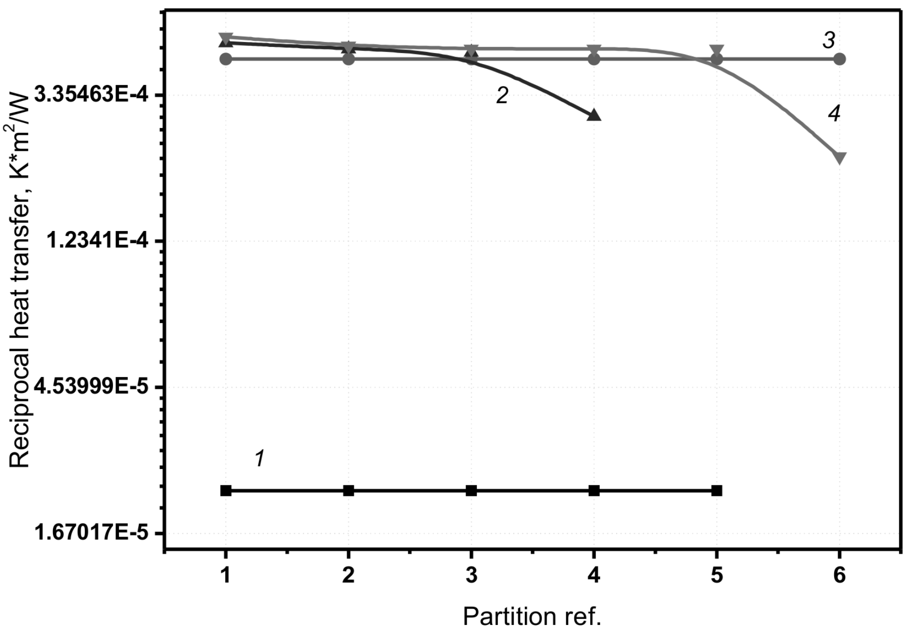


Рис. 8. Значения коэффициентов обратной теплопроводности, соответствующие различным зонам разбивки, по отношению к сопротивлению равномерного слоя термопасты: *1* – равномерный слой термопасты, *2* – четыре зоны разбивки, *3* – без разбивки на зоны, *4* – шесть зон разбивки

ными и смоделированными температурами приведены на рис. 6. Были протестированы результаты разбивки на различное число зон. Как видно из данных рис. 6, увеличение числа зон тепловых сопротивлений до шести не привело к существенной разнице в результатах, по сравнению с более грубой разбивкой.

Достигнутое хорошее согласие между моделируемыми и экспериментально полученными температурами в результате использования метода разбивки тепловых сопротивлений показано на рис. 6.

Результаты использования многозональной разбивки показывают, что тепловое сопротивление значительно ухудшается, начиная с зоны, расположенной рядом с краем алюминиевой пластины (то есть R_3 и R_5). Это согласуется с тем фактом, что под частью изогнутой алюминиевой платы непрерывного слоя термопасты не остается. Поскольку общая измеренная высота изгиба составила 80 мкм, а максимальная толщина слоя термопасты – 15 мкм, то площадь, заполненная термопастой, могла находиться только под зоной, соответствующей тепловому сопротивлению R_4 (при разбивке на четыре зоны) и R_6 (при разбивке на шесть зон). Установленное путем калибровки модели эффективное тепловое сопротивление этих зон 0,1 К/Вт, было примерно в 10 раз хуже, чем тепловое сопротивление однородного слоя термопасты 0,011 К/Вт под недеформированной алюминиевой платой. Такое высокое значение можно объяснить деформацией алюминиевой пласты вдоль краев при нагревании. Из результатов моделирования и температурных измерений также ясно, что влияние тепловой деформации алюминиевой платы на профиль температурного распределения СД-матрицы может быть представлено одним эффективным тепловым сопротивлением, как показано на рис. 6 и 8 – без разбивки. Использование этой альтернативы не имеет физического обоснования, однако приводит к удовлетворительному согласию между моделируемой и измеренной температурой.

Распределение температуры по площади светодиодной матрицы показано на рис. 9. Метод разбивки на тепловые сопро-

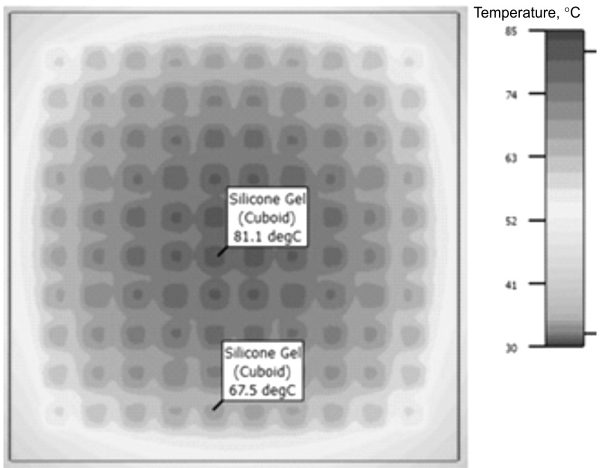


Рис. 9. Расчетная температурная карта поверхности СД-матрицы (с учетом тепловой деформации)

тивления позволяет прогнозировать формирование мест локального перегрева на поверхности матрицы, и тем самым воспроизводить эффект измеренной тепловой деформации алюминиевой платы.

Заключение

Тепловые свойства высокомощных белых светодиодных матриц AlInGaN на базе излучающих кристаллов «face-up», смонтированных по технологии «chip-on-board» на алюминиевой плате MPCB, были исследованы экспериментально и путем компьютерного моделирования. В экспериментальных исследованиях были задействованы как косвенные методы определения тепловых параметров по переходным температурно-зависимым характеристикам, так и прямое определение температуры с помощью ИК-тепловидения.

В процессе проведенных исследований установлено, что значение общего теплового сопротивления СД-матрицы выросло в 1,7 раза при увеличении рабочего тока от 1 до 4 А, что вызвано значительным ухудшением отвода тепла от кристаллов, расположенных в центре матрицы, по сравнению с расположенными на периферии. Это есть следствие деформации из-за линейного теплового расширения, а именно – центральная часть выгибается при фиксации винтами за углы алюминиевой платы. С увеличением зазора между этой платой и радиатором соответственно ухудшается тепловой контакт. Это подтверждается как распределением температуры, полученным из инфракрасного температурного мэппинга, так и непосредственным измерением кривизны поверхности СД-матрицы в рабочем режиме.

Необходимо подчеркнуть роль математического и экспериментального моделирования в выявлении и понимании наблюдаемого явления тепловой деформации. Небольшое изменение температуры поверхности, полученное в результате CFD-моделирования с однородным слоем термопасты, позволило авторам данной статьи выдвинуть гипотезу о тепловой деформации СД-матрицы как причине реально измеряемого температурного градиента. В дальнейшем результаты моделирования были подтверждены непосредственным измерением значительной высоты изгиба (до 80 мкм) алюминиевой платы в рабочем режиме.

Кроме того, был предложен метод разбивки теплового сопротивления на зоны и приведен пример CFD-моделирования экспериментальных образцов, хорошо согласующийся с тепловизионными результатами. Разница в температуре между центральными и периферийными чипами может достигать 13 К при входной мощности 100 Вт. Перегрев центральных чипов уменьшает срок службы СД-матрицы. Это следует учитывать при оценке значений теплового сопротивления, полученных методом релаксации прямого напряжения.

Наконец, представленная комбинация экспериментальных методов и методов моделирования поможет разработчикам электроники облегчить анализ и решение проблем надежности, вызванных образованием мест локального разогрева в светодиодной матрице в результате термомеханической деформации деталей матрицы в рабочих условиях.

Измерения светодиодных характеристик были произведены на базе Центра коллективного пользования «Элементная база радиофотоники и наноэлектроники: технология, диагностика, метрология», Санкт-Петербург, Российская Федерация.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ping Zh., Jianhua Z., Xianping C., Miao C., Jing X., Daoguo Y.** An experimental investigation of a 100-W high-power light-emitting diode array using vapor chamber-based plate // Advances in Mechanical Engineering. 2015. Vol. 7. No. 11. Pp. 1–7.

2. **Jiajie F., Chaoyi X., Cheng Q., Xuejun F., Guoqi Z.** Luminescence mechanism analysis on high power tunable color temperature Chip-on-Board white LED modules // Proceedings of the 18th International Conference on Thermal, Mechanical and Multi-Physics Simulation and Experiments in Microelectronics and Microsystems (EuroSimE). 3–5 April 2017. Dresden, Germany, 2017. Pp. 1–6.

3. **John H.L.** Chip on board. Technology for multichip modules. New York: Springer, 1994. 556 p.

4. **Konsowski S.G., Helland A.R.** Electronic packaging of high speed circuitry. New York: McGraw Hill Professional, 1997. 445 p.

5. **Шушарин А.Г., Половинка М.П., Морозов В.В.** Медицинское тепловидение – современные возможности метода // Современные проблемы науки и образования. 2011. № 4. URL: http://science-education.ru/ru/article/view?id=4726.

6. **Ki S.C., Sun C.Y., Jae-Young K., Myung H.K., Seon Y.R., Hae Y.C., Geon H.K.** Precise temperature mapping of GaN-based LEDs by quantitative infrared micro-thermography // Sensors. 2012. Vol. 12. No. 4. Pp. 4648–4660.

7. MicReD. T3Ster URL: https://www.mentor.com/products/mechanical/micred/t3ster/.

8. Thermal management for LED applications. Lasance C.J.M., Poppe A. (Eds). New York: Springer, 2014. 551 p.

9. ES-CABLV45P data sheet. 2017. URL: http://www.epistar.com.tw/upfiles/files_/ES-CABLV45P.pdf.

10. **Аладов А.В., Булашевич К.А., Черняков А.Ф., Карпов С.Ю., Валюхов В.П., Закгейм А.Л.** Тепловое сопротивление и неоднородность распределения электролюминесценции и температуры в мощных AlGaInN-светодиодах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2015. № 2 (218) С. 74–83.

11. **Schweitzer D., Pape H., Chen L., Kutscherauer R., Walder M.** Transient dual interface measurement – A new JEDEC standard for the measurement of the junction-to-case thermal resistance // Proceedings of the 27th Annual IEEE Semiconductor Thermal Measurement and Management Symposium (SEMI-THERM'11). 20 – 24 March, 2011. San Jose, USA. Pp. 222–229.

12. **Smirnov V.I., Sergeev V.A., Gavrikov A.A.** Apparatus for measurement of thermal impedance of high-power light-emitting diodes and LED assemblies // IEEE Transactions on Electron Devices. 2016. Vol. 63. No. 6. Pp. 2431–2435.

13. **Закгейм А.Л., Курышев Г.Л., Мизеров М.Н., Половинкин В.Г., Рожанский И.В., Черняков А.Е.** Исследование тепловых процессов в мощных InGaN/GaN флип-чип светодиодах с использованием инфракрасной тепловизионной микроскопии // Физика и техника полупроводников. 2010. Т. 44. Вып. 3. С. 390–396.

14. **Hopper R.H., Haneef I., Ali S.Z., Udrea F., Oxley C.H.** Use of carbon micro-particles for improved infrared temperature measurement of CMOS MEMS devices // Measurement Science and Technology. 2010. Vol. 21. No. 4. Pp. 1–6.

15. **Shukla R.P., Udupa D.** Measurement of radius of curvature of cylindrical surfaces // Journal of Optics (India). 2001. Vol. 30. No. 3. Pp. 131–142.

16. Mentor Graphics Corporation. Flotherm v.10.1 User Manual, 2014.

17. Silicone Gel. 2017. URL: https://www.acc-silicones.com.

18. Organo-silicon heat-conducting paste. Specifications. 2017. URL: http://pripoi.ru.

19. **Zakgeim A.L., Chernyakov A.E.** A measuring system for obtaining spectroradiometric, photocolorimetric, and thermal characteristics of semiconductor radiators // Light and Engineering. 2013. Vol. 21. No. 4. Pp. 64–70.

Статья поступила в редакцию 25.06.2018, принята к публикации 09.07.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АЛАДОВ Андрей Вальменович – *старший научный сотрудник Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

aaladov@mail.ioffe.ru

БЕЛОВ Илья Владимирович – *кандидат физико-математических наук, доцент Инженерной школы Университета Йончёпинг, г. Йончёпинг, Швеция.*

Швеция, г. Йончёпинг, ул. Хутеригатан, 5

ilia.belov@ju.se.ru

ВАЛЮХОВ Владимир Петрович – *доктор технических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Valyukhov@yandex.ru

ЗАКГЕЙМ Александр Львович – *кандидат физико-математических наук, заведующий сектором Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
zakgeim@mail.ioffe.ru

ЧЕРНЯКОВ Антон Евгеньевич – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая улица, 26
chernyakov.anton@yandex.ru

REFERENCES

[1] **Zh. Ping, Z. Jianhua, C. Xianping C., et al.,** An experimental investigation of a 100-W high-power light-emitting diode array using vapor chamber-based plate, Advances in Mechanical Engineering. 7 (11) (2015) 1–7. https//doi.org/10.1177/1687814015620074.

[2] **F. Jiajie, X. Chaoyi, Q. Cheng, et al.,** Luminescence mechanism analysis on high power tunable color temperature Chip-on-Board white LED modules, Proc. of the 18th International Conference on Thermal, Mechanical and Multi-Physics Simulation and Experiments in Microelectronics and Microsystems (EuroSimE), 3–5 April 2017, Dresden, Germany (2017) 1–6.

[3] **H.L. John,** Chip on board, Technology for multichip modules, Springer, New York, 1994.

[4] **S.G. Konsowski, A.R. Helland,** Electronic packaging of high speed circuitry, McGraw Hill Professional, New York, 1997.

[5] **A.G. Shusharin, V.V. Morozov, M.P. Polovinka,** Medical infrared imaging – modern features of the method, Modern problems of science and education. (4) (2011), URL: http://science-education.ru/ru/article/view?id=4726.

[6] **S.C. Ki, C.Y. Sun, K. Jae-Young, et al.,** Precise temperature mapping of GaN-based LEDs by quantitative infrared micro-thermography, Sensors. 12 (4) (2012) 4648–4660.

[7] MicReD. T3Ster, URL: https://www.mentor.com/products/mechanical/ micred/t3ster/.

[8] Thermal management for LED applications, C.J.M. Lasance, A. Poppe (Eds), Springer, New York, 2014.

[9] ES-CABLV45P data sheet, 2017, URL: http://www.epistar.com. tw/upfiles/files_/ES-CABLV45P.pdf

[10] **A.V. Aladov, K.A. Bulashevich, A.E. Chernyakov, et al.,** Thermal resistanse and nonuniform distribution of electroluminescence and temperature in high-power AlGaInN light-emitting diodes, St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. (2 (218)) (2015) 151–158.

[11] **D. Schweitzer, H. Pape, L. Chen, et al.,** Transient dual interface measurement – A new JEDEC standard for the measurement of the junction-to-case thermal resistance, Proc. of the 27th Annual IEEE Semiconductor Thermal Measurement and Management Symposium (SEMI-THERM'11), 20–24 March, 2011, San Jose, USA. (2011) 222–229.

[12] **V.I. Smirnov, V.A. Sergeev, A.A. Gavrikov,** Apparatus for measurement of thermal impedance of high-power light-emitting diodes and LED assemblies, IEEE Transactions on Electron Devices. 63 (6) (2016) 2431–2435.

[13] **A.L. Zakgeim, G.L. Kuryshev, M.N. Mizerov, et al.,** A study of thermal processes in highpower InGaN/GaN FlipC-hip LEDs by IR thermal imaging microscopy, Semiconductors. 44 (3) (2010) 373–379.

[14] **R.H. Hopper, I. Haneef, S.Z. Ali, et al.,** Use of carbon micro-particles for improved infrared temperature measurement of CMOS MEMS devices, Measurement Science and Technology. 21 (4) (2010) 1–6.

[15] **R.P. Shukla, D. Udupa,** Measurement of radius of curvature of cylindrical surfaces, Journal of Optics (India). 30 (3) (2001) 131–142.

[16] Mentor Graphics Corporation. Flotherm v.10.1 User Manual (2014).

[17] Silicone Gel, 2017, URL: https://www.

acc-silicones.com.

[18] Organo-silicon heat-conducting paste, Specifications, 2017, URL: http://pripoi.ru.

[19] **A.L. Zakgeim, A.E. Chernyakov,** A measuring system for obtaining spectroradiometric, photocolorimetric, and thermal characteristics of semiconductor radiators, Light and Engineering. 21 (4) (2013) 64–70.

Received 25.06.2018, accepted 09.07.2018.

THE AUTHORS

ALADOV Andrey V.
Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS
26 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
aaladov@mail.ioffe.ru

BELOV Ilia V.
Jönköping University, School of Engineering
5 Gjuterigatan St., Jönköping, Sweden
ilia.belov@ju.se.ru

VALYUKHOV Vladimir P.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Valyukhov@yandex.ru

ZAKGEIM Alexader L.
Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS
26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
zakgeim@mail.ioffe.ru

CHERNYAKOV Anton E.
Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS
26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
chernyakov.anton@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.11305
УДК 537.534.7; 621.319.7

ОБОБЩЕНИЕ ПОНЯТИЯ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ РАДИОЧАСТОТНЫХ КВАДРУПОЛЬНЫХ ПОЛЕЙ

А.С. Бердников[1], Л.Н. Галль[1], Н.Р. Галль[1], К.В. Соловьев[2]

[1] Институт аналитического приборостроения Российской академии наук,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;
[2] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе показано, что псевдопотенциальную функцию, которая для неоднородных радиочастотных полей описывает усредненное движение заряженных частиц с точностью до квадратичных членов, для квадрупольных радиочастотных электрических полей можно заменить более точной, представленной в виде бесконечного псевдопотенциального ряда. Это позволяет расширить диапазон параметров радиочастотного поля, при котором появляется возможность не только качественного, но и количественного описания движения заряженных частиц. Но даже расширенное таким образом понятие псевдопотенциала, к сожалению, оказывается не слишком пригодным для описания движения заряженных частиц при приближении к области параметрического резонанса, где движение заряженных частиц в квадрупольных радиочастотных полях теряет устойчивость.

Ключевые слова: высокочастотное электрическое поле, квадрупольный масс-фильтр, секулярное колебание, псевдопотенциал

Ссылка при цитировании: Бердников А.С., Галль Л.Н., Галль Н.Р., Соловьев К.В. Обобщение понятия псевдопотенциала для радиочастотных квадрупольных полей // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 52–64. DOI: 10.18721/JPM.11305

GENERALIZATION OF THE PSEUDOPOTENTIAL CONCEPT FOR RADIO-FREQUENCY QUADRUPOLE FIELDS

A.S. Berdnikov[1], L.N. Gall[1], N.R. Gall[1], K.V. Solovyev[2]

[1] Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences,
St. Petersburg, Russian Federation;
[2] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

It is shown that the pseudopotential function, which describes the averaged motion of charged particles with accuracy up to quadratic terms for nonuniform radio-frequency fields, can be replaced by an infinite pseudopotential series for quadrupole radio-frequency electric fields. This replacement provides a more accurate description. It allows us to extend the parameter's range of the radio-frequency field; in this range, it makes possible to describe the motion of charged particles quantitatively and not just qualitatively. Unfortunately, even this extended concept of pseudopotential is not suitable enough for describing the motion of charged particles when approaching the region of the parametric resonance, where the motion of charged particles loses stability in the quadrupole radio-frequency fields.

Key words: high-frequency electric field, quadrupole mass filter, secular oscillation, pseudopotential

Citation: A.S. Berdnikov, L.N. Gall, N.R. Gall, K.V. Solovyev, Generalization of the pseudopotential concept for radio-frequency quadrupole fields, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 52–64. DOI: 10.18721/JPM.11305

Введение

Псевдопотенциальный подход служит полезным инструментом для качественного описания движения ионов в неоднородных радиочастотных электрических полях [1 – 12]. Однако для радиочастотных квадрупольных масс-фильтров [11 – 15] и (в меньшей степени) для радиочастотных квадрупольных ловушек [16, 17] классический псевдопотенциальный подход дает слишком низкую точность, чтобы можно было всерьез признать этот метод полезным для исследования особенностей движения заряженных частиц в соответствующих устройствах. Исключениями являются псевдопотенциальные функции для стробоскопических отсчетов координат и скоростей [18 – 20], а также интерпретация матриц Флоке – Ляпунова для решений линейных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами в смысле псевдопотенциальной модели движения [21, 22]. Перечисленные псевдопотенциальные функции основаны на принципиально ином математическом формализме, но эти модели движения, однако, не слишком удобны для практических вычислений.

В данной работе рассматривается разумный компромисс между классическими моделями, которые практичны, но не слишком точны в плане анализа особенностей движения заряженных частиц в квадрупольных радиочастотных полях [1 – 12], и математически точными, но не слишком практичными моделями [18 – 22]. Предлагаемые далее модели позволяют значительно расширить диапазон параметров радиочастотного квадрупольного электрического поля в пределах первой зоны устойчивости. При использовании указанных параметров достигается совпадение (не только качественное, но и количественное) приближенных траекторий движения с точными решениями соответствующих дифференциальных уравнений.

Рассматриваемые в работе псевдопотенциальные модели движения следуют общей идеологии классической теории псевдопотенциала [1 – 12] и приводят к легко вычисляемым алгебраическим выражениям. Однако эти модели плохо работают вблизи границы зоны устойчивости радиочастотных квадруполей, соответствующей параметрическому резонансу между вынуждающим радиочастотным полем и собственными секулярными движениями заряженной частицы, где нарушаются базовые предположения о малости радиочастотной составляющей движения заряженной частицы, по сравнению с «медленной» (усредненной по радиочастотным колебаниям) компонентой движения. Кроме того, полученные формулы специфичны именно для квадрупольных радиочастотных электрических полей и не пригодны для обобщения на случай движения заряженных частиц в нелинейных радиочастотных электрических полях.

Классическая модель псевдопотенциала при движении в квадрупольном радиочастотном поле

Рассмотрим движение иона в радиочастотном электрическом поле линейного квадруполя с гиперболическими стержнями [11 – 17]. Электрический потенциал $U(x,y,t)$ для такой системы имеет вид

$$U(x,y,t) = \\ = (U_0 + V_0\cos(\Omega t + \varphi_0))(x^2 - y^2)/r_0^2, \qquad (1)$$

где U_0 – постоянная составляющая напряжений, приложенных к электродам; V_0 – амплитуда косинусоидальной радиочастотной составляющей напряжений, приложенных к электродам; Ω – круговая частота радиочастотного напряжения, φ_0 – фаза радиочастотного напряжения в момент начала движения иона; r_0 – кратчайшее расстояние от оси квадруполя до гиперболических электродов (характеризует межэлектродный зазор радиочастотного линейного квадруполя); x, y – декартовы координаты; t – время движения.

В безразмерных координатах траектория $x(t), y(t)$ для иона с массой m и зарядом e удовлетворяет уравнениям типа Матьё [23 – 30], которые представляют собой частный случай линейных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами:

$$\frac{d^2x}{d\xi^2} + (a + 2q\cos(2\xi + \varphi_0))x = 0, \qquad (2)$$

$$\frac{d^2y}{d\xi^2} - (a + 2q\cos(2\xi + \varphi_0))y = 0, \qquad (3)$$

где $\xi = \Omega t/2$ – безразмерное время; $a = 8eU_0/m\Omega^2 r_0^2$, $q = 4eV_0/m\Omega^2 r_0^2$ – безразмерные параметры; $f(\xi) = \cos(2\xi + \varphi_0)$ – косинусоидальная периодическая функция с безразмерным периодом $T' = \pi$ (безразмерной круговой частотой $\Omega' = 2$) и начальной фазой φ_0.

Для иллюстрации особенностей классического псевдопотенциального подхода рассмотрим одномерное движение иона с массой m и зарядом e в радиочастотном электрическом поле с электрическим потенциалом общего вида

$$U(x,t) = U^0(x,t) + V(x,t)\cos(\Omega t + \varphi_0) + W(x,t)\sin(\Omega t + \varphi_0), \qquad (4)$$

где $U^0(x,t)$, $V(x,t)$, $W(x,t)$ считаются «медленными» функциями времени, по сравнению с «быстро» осциллирующими синусоидальными функциями $\cos(\Omega t + \varphi_0)$, $\sin(\Omega t + \varphi_0)$.

Ньютоновские уравнения движения иона в таком электрическом поле приобретают вид

$$(m/e)\ddot{x} = -U_x^0(x,t) - V_x(x,t)\cos(\Omega t + \varphi_0) - W_x(x,t)\sin(\Omega t + \varphi_0), \qquad (5)$$

где нижние индексы обозначают частные производные, для того чтобы в дальнейшем избежать излишне громоздких математических выражений.

Для псевдопотенциальной модели движения [1 – 12] используется предположение, что решение дифференциального уравнения (5) можно с хорошей точностью представить в виде суммы

$$\begin{gathered} x(t) = x_0(t) + \delta x(t), \\ \delta x(t) \approx \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\Omega^k}\big(x_k^c(t)\cos(\Omega t + \varphi_0) + \\ + x_k^s(t)\sin(\Omega t + \varphi_0) + x_k^{2c}(t)\cos 2(\Omega t + \varphi_0) + \\ + x_k^{2s}(t)\sin 2(\Omega t + \varphi_0) + \cdots\big), \end{gathered} \qquad (6)$$

где «быстрая» компонента траектории $\delta x(t)$, как и ее производная по времени, обладает нулевым средним (рассчитанным за период радиочастотного поля (4)) и является малой, по сравнению с основной («медленной») компонентой траектории $x_0(t)$.

Подставим сумму (6) в уравнение (5) и разложим как сами функции $U^0(x,t)$, $V(x,t)$, $W(x,t)$,, так и их частные производные в усеченные ряды Тейлора по малому приращению $\delta x(t)$. В этом случае при определенных условиях, а именно:

а) если допустить, что функции $x_k^c(t)$, $x_k^s(t)$, $x_k^{2c}(t)$, $x_k^{2s}(t)$, ... будут «медленными»,

б) если объединить вместе члены, представляющие собой базовые тригонометрические функции с одинаковыми частотами и одинаковыми степенями Ω,

в) если потребовать, чтобы соответствующие коэффициенты (за исключением членов, соответствующих нулевой гармонике радиочастотного поля) обращались в нуль по отдельности,

будут получены следующие приближенные соотношения:

$$x(t) \approx x_0(t) + \frac{e}{m\Omega^2}V_x(x_0(t),t)\cos(\Omega t + \varphi_0) + \frac{e}{m\Omega^2}W_x(x_0(t),t)\sin(\Omega t + \varphi_0) + \cdots; \qquad (7)$$

$$\dot{x}(t) \approx \dot{x}_0(t) + \frac{e}{m\Omega}W_x(x_0(t),t)\cos(\Omega t + \varphi_0) - \frac{e}{m\Omega}V_x(x_0(t),t)\sin(\Omega t + \varphi_0) - \qquad (8)$$

$$-\frac{e}{m\Omega^2}[V_{xt}(x_0(t),t)+\dot{x}_0(t)V_{xx}(x_0(t),t)]\times$$
$$\times\cos(\Omega t+\varphi_0)-\frac{e}{m\Omega^2}[W_{xt}(x_0(t),t)+ \qquad (8)$$
$$+\dot{x}_0(t)W_{xx}(x_0(t),t)]\sin(\Omega t+\varphi_0)+\cdots;$$

$$\ddot{x}_0(t)\approx-\frac{e}{m}U_x(x_0(t),t)-\frac{e}{m}\bar{U}_x^{rf}(x_0(t),t)+\cdots. \qquad (9)$$

Здесь сохранены степени Ω вплоть до $1/\Omega^2$, а старшие степени, представляющие собой малые поправки в силу предположения о «большой» частоте радиочастотного электрического поля, отброшены.

Следует, однако, отметить, что для получения правильного выражения для скорости $\dot{x}(t)$ (вплоть до членов вида $1/\Omega^2$) приходится в процессе выкладок, до операции дифференцирования функции $x(t)$ по времени, временно сохранять также и кубические члены $1/\Omega^3$; их можно отбросить только после корректного определения функции $\dot{x}(t)$.

Функция

$$\bar{U}^{rf}(x,t)=\frac{e}{4m\Omega^2}[(V_x(x,t))^2+(W_x(x,t))^2] \qquad (10)$$

носит название псевдопотенциала (эффективный потенциал, радиочастотный потенциал, потенциал пондеромоторной силы и т. п.), а уравнение (9) можно интерпретировать как движение иона с массой m и зарядом e в квазистационарном электрическом поле с потенциалом $U(x,t)+\bar{U}^{rf}(x,t)$.

Важно подчеркнуть, что неотъемлемой частью псевдопотенциальной модели движения является не только псевдопотенциальное уравнение (9) для «медленной» части траектории иона, но и уравнения (7), (8). Последние позволяют выразить в явном виде высокочастотные поправки для траектории и скорости иона и тем самым найти приближенное выражение для истинной траектории иона в радиочастотном электрическом поле. В частности, из уравнений (7), (8) следует, что быстро осциллирующие поправки к «медленной» части траектории иона будут прямо пропорциональны амплитуде радиочастотной компоненты напряженности электрического поля в рассматриваемой точке траектории. Кроме того, с помощью нелинейных алгебраических уравнений (7), (8) функции $x_0(t)$, $\dot{x}_0(t)$ можно выразить через функции $x(t)$, $\dot{x}(t)$ в виде рядов по степеням $1/\Omega^k$:

$$x_0(t)\approx x(t)-\frac{e}{m\Omega^2}V_x(x(t),t)\cos(\Omega t+\varphi_0)- \qquad (11)$$
$$-\frac{e}{m\Omega^2}W_x(x(t),t)\sin(\Omega t+\varphi_0)+\cdots;$$

$$\dot{x}_0(t)\approx\dot{x}(t)-\frac{e}{m\Omega}W_x(x(t),t)\cos(\Omega t+\varphi_0)+$$
$$+\frac{e}{m\Omega}V_x(x(t),t)\sin(\Omega t+\varphi_0)+ \qquad (12)$$
$$+\frac{e}{m\Omega^2}[V_{xt}(x(t),t)+\dot{x}(t)V_{xx}(x(t),t)]\times$$
$$\times\cos(\Omega t+\varphi_0)+\frac{e}{m\Omega^2}[W_{xt}(x(t),t)+$$
$$+\dot{x}(t)W_{xx}(x(t),t)]\sin(\Omega t+\varphi_0)+\cdots,$$

где сохранены члены вплоть до $1/\Omega^2$ как для $x_0(t)$, так и для $\dot{x}_0(t)$.

В частности, уравнения (11), (12) позволяют в явном виде выразить начальные условия для «медленного» движения (9) через начальные условия истинного движения (5) в радиочастотном поле.

Здесь необходимо отметить, что несовпадение начальных условий для функций $x_0(t), \dot{x}_0(t)$ и $x(t), \dot{x}(t)$, а также различие между усредненными траекториями $x_0(t)$, $\dot{x}_0(t)$ и приближенными траекториями $x(t)$, $\dot{x}(t)$ не всегда принимается исследователями во внимание при оценке точности псевдопотенциальной модели движения. Такое пренебрежение приводит к худшей оценке, чем она есть на самом деле.

Нормализованное уравнение движения (2) получается из уравнения (5) при следующей подстановке:

$$U^0(x,t)=ax^2/2,\ V(x,t)=qx^2,$$
$$W(x,t)=0,\ \Omega=2,$$
$$e=1,\ m=1,\ t=\xi.$$

В результате псевдопотенциальная модель движения иона (7) – (12) дает для уравнения (2) приближенное решение, записанное в безразмерной форме:

$$x_0''(\xi) \approx -\left(a + \frac{q^2}{2}\right)x_0(\xi) + \cdots; \qquad (13)$$

$$x_0(0) \approx x(0)\left(1 - \frac{q}{2}\cos\varphi_0\right) + \cdots;$$
$$x_0'(0) \approx x(0)q\sin\varphi_0 + x'(0)\left(1 + \frac{q}{2}\cos\varphi_0\right) + \cdots; \qquad (14)$$

$$x(\xi) \approx x_0(\xi)\left(1 + \frac{q}{2}\cos(2\xi + \varphi_0)\right) + \cdots;$$
$$x'(\xi) \approx -qx_0(\xi)\sin(2\xi + \varphi_0) + \qquad (15)$$
$$+\, x_0'(\xi)\left(1 - \frac{q}{2}\cos(2\xi + \varphi_0)\right) + \cdots.$$

Здесь предполагается, что

$$a + q^2/2 = \tilde{\beta}^2 > 0,$$

где $\tilde{\beta} = \sqrt{a + q^2/2}$ — это псевдопотенциальное приближение для точного значения нормализованной секулярной частоты β [23 – 31].

Условие

$$a + q^2/2 = \tilde{\beta}^2 > 0$$

соответствует стабильному движению иона в радиочастотном квадрупольном электрическом поле в рамках псевдопотенциальной модели. Рис. 1 показывает разницу между приближенными траекториями (13) – (15) и точными (вычисленными)

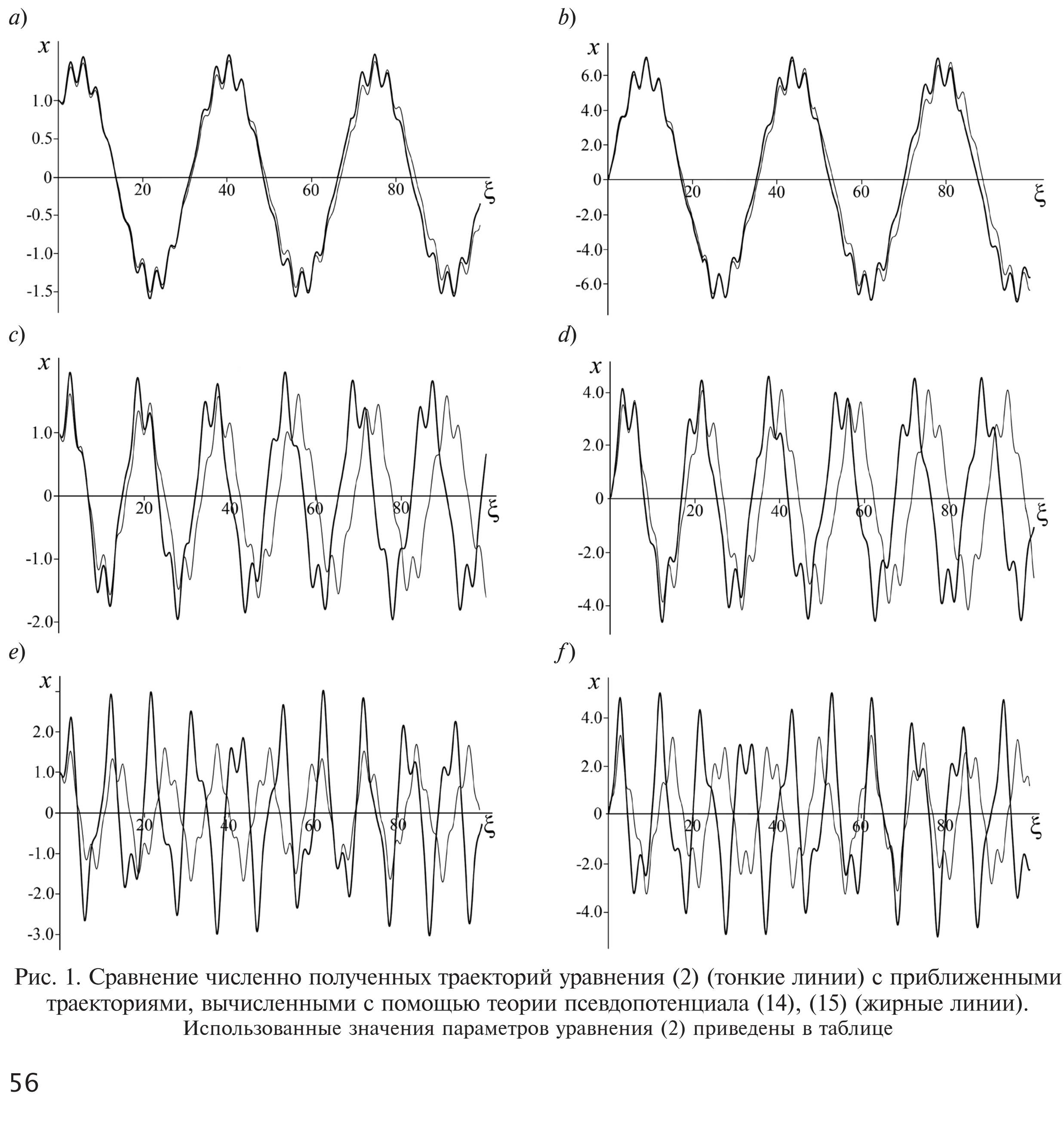


Рис. 1. Сравнение численно полученных траекторий уравнения (2) (тонкие линии) с приближенными траекториями, вычисленными с помощью теории псевдопотенциала (14), (15) (жирные линии). Использованные значения параметров уравнения (2) приведены в таблице

Таблица

Значения параметров уравнения (2) при вычислении его точных решений

Рис. 1, 2	q	$x(0)$	$x'(0)$
a	0,25	1	0
b	0,25	0	1
c	0,50	1	0
d	0,50	0	1
e	0,75	1	0
f	0,75	0	1

Примечание. Параметр $a = 0$ для всего приведенного набора остальных параметров.

решениями уравнения (2) при $a = 0$ для разных значений параметра q.

Псевдопотенциальное разложение в бесконечный ряд

Если в разложении (6) сохранить больше степеней вида $1/\Omega^k$, то можно получить уточненные уравнения для «медленного» движения $x_0(t)$, а также уточненные уравнения связи между истинным движением $x(t)$ и «медленным» (усредненным) движением $x_0(t)$. Однако в общем случае произвольного радиочастотного электрического поля получаемые на этом пути выражения оказываются крайне сложными и уже не допускают такой изящной и физически наглядной интерпретации, как классическая модель псевдопотенциала (см., впрочем, работу [32]). Исключение составляют квадрупольные электрические поля (для них зависимость электрического потенциала от координат выражается квадратичным полиномом), для которых поправки высокого порядка по-прежнему имеют вид искусственно сконструированной псевдопотенциальной функции.

В качестве примера рассмотрим одномерное движение в косинусоидальном радиочастотном электрическом поле с квадратичным электрическим потенциалом:

$$\frac{dx}{dt} = v;$$
$$\frac{dv}{dt} = -\widehat{U}x - \widehat{V}x\cos(\Omega t + \varphi_0), \qquad (16)$$

где применительно к линейному квадруполю с электрическим потенциалом (1) величина

$$(m/2e)\widehat{U}x^2 = U_0\, x^2/r_0^2$$

есть постоянная составляющая электрического потенциала, а величина

$$(m/2e)\widehat{V}x^2 = V_0\, x^2/r_0^2$$

есть амплитуда радиочастотной составляющей электрического потенциала.

Псевдопотенциальное разложение для решений системы уравнений (16) можно записать в виде специфического ряда, представляющего собой гибрид тригонометрических рядов Фурье и степенных рядов Тейлора:

$$\begin{aligned} x(t) &= x_0(t) + \\ &+ x_0(t)\sum_{k=1,\infty}\cos k(\Omega t + \varphi_0)\left(\sum_{j=k,\infty}\frac{x_{k,2j}^{(c)}}{\Omega^{2j}}\right) + \\ &+ v_0(t)\sum_{k=1,\infty}\sin k(\Omega t + \varphi_0)\left(\sum_{j=k,\infty}\frac{x_{k,2j+1}^{(s)}}{\Omega^{2j+1}}\right); \\ v(t) &= v_0(t) + \\ &+ x_0(t)\sum_{k=1,\infty}\sin k(\Omega t + \varphi_0)\left(\sum_{j=k,\infty}\frac{v_{k,2j-1}^{(s)}}{\Omega^{2j-1}}\right) + \\ &+ v_0(t)\sum_{k=1,\infty}\cos k(\Omega t + \varphi_0)\left(\sum_{j=k,\infty}\frac{v_{k,2j}^{(c)}}{\Omega^{2j}}\right); \end{aligned} \qquad (17)$$

$$\dot{x}_0(t) = v_0(t);$$
$$\dot{v}_0(t) = -\left(X_0 + \sum_{j=1,\infty}\frac{1}{\Omega^{2j}}X_{2j}\right)x_0(t). \qquad (18)$$

В этих уравнениях $x_{k,2j}^{(c)}$, $x_{k,2j+1}^{(s)}$, $v_{k,2j-1}^{(s)}$, $v_{k,2j}^{(c)}$, X_{2j} – это неизвестные константы, которые необходимо подобрать так, чтобы решение (17), (18) удовлетворяло системе уравнений (16). Действительно, после подстановки решения (17), (18) в систему (16), а также объединения вместе коэффициентов для подобных тригонометрических членов

$$\cos k(\Omega t + \varphi_0),\ \ \sin k(\Omega t + \varphi_0)$$

и степенных членов $1/\Omega^j$, можно выразить константы $x_{k,2j}^{(c)}$, $x_{k,2j+1}^{(s)}$, $v_{k,2j-1}^{(s)}$, $v_{k,2j}^{(c)}$, X_{2j} непротиворечивым способом с помощью рекуррентных соотношений через константы $\widehat{U}$ и $\widehat{V}$, входящие в уравнения (16). В таком случае функцию

$$\widehat{U}^{rf}(x_0) = \frac{1}{2}\left(X_0 + \sum_{j=1,\infty}\frac{1}{\Omega^{2j}}X_{2j}\right)x_0^2 = \frac{1}{2}\hat{\beta}^2 x_0^2, \qquad (19)$$

с помощью которой дифференциальное уравнение (18) записывается в форме

$$\ddot{x}_0 = -d\widehat{U}^{rf}(x_0)\big/dx_0 \,,$$

можно интерпретировать как уточненный квадратичный псевдопотенциал. Последний характеризует «медленное» (секулярное) движение ионов в квадратичном радиочастотном электрическом поле.

В частности, ненулевые коэффициенты $x^{(c)}_{k,2j}$, $x^{(s)}_{k,2j+1}$, $v^{(s)}_{k,2j-1}$, $v^{(c)}_{k,2j}$, X_{2j}, которые потребуются для вычисления уравнений (17), (18) с точностью до членов вида $1/\Omega^6$, определяются как

$$\begin{gathered}
X_0 = \widehat{U},\ X_2 = \frac{1}{2}\widehat{V}^2, X_4 = 2\widehat{U}\widehat{V}^2,\\
X_6 = \widehat{V}^2\left(8\widehat{U}^2 + \frac{25}{32}\widehat{V}^2\right);\\
v^{(s)}_{1,1} = -\widehat{V},\ v^{(s)}_{1,3} = -2\widehat{U}\widehat{V},\\
v^{(s)}_{1,5} = -\widehat{V}\left(8\widehat{U}^2 + \frac{9}{16}\widehat{V}^2\right);\\
v^{(c)}_{1,2} = -\widehat{V}, v^{(c)}_{1,4} = -4\widehat{U}\widehat{V},\\
v^{(c)}_{1,6} = -\widehat{V}\left(16\widehat{U}^2 + \frac{3}{4}\widehat{V}^2\right);\\
x^{(c)}_{1,2} = \widehat{V}, x^{(c)}_{1,4} = 4\widehat{U}\widehat{V}, \qquad (20)\\
x^{(c)}_{1,6} = \widehat{V}\left(16\widehat{U}^2 + \frac{25}{16}\widehat{V}^2\right);\\
x^{(s)}_{1,3} = -2\widehat{V}, x^{(s)}_{1,5} = -8\widehat{U}\widehat{V};\\
v^{(s)}_{2,3} = -\frac{1}{4}\widehat{V}^2, v^{(s)}_{2,5} = -\frac{11}{8}\widehat{U}\widehat{V}^2,\\
v^{(c)}_{2,4} = -\frac{5}{8}\widehat{V}^2, v^{(c)}_{2,6} = -\frac{23}{8}\widehat{U}\widehat{V}^2;\\
x^{(c)}_{2,4} = \frac{1}{8}\widehat{V}^2, x^{(c)}_{2,6} = \frac{7}{8}\widehat{U}\widehat{V}^2, x^{(s)}_{2,5} = -\frac{3}{8}\widehat{V}^2;\\
v^{(s)}_{3,5} = -\frac{1}{48}\widehat{V}^3, v^{(c)}_{3,6} = -\frac{5}{72}\widehat{V}^3, x^{(c)}_{3,6} = \frac{1}{144}\widehat{V}^3, \ldots\,.
\end{gathered}$$

С помощью линейных уравнений (17) можно выразить функции $x_0(t), v_0(t)$ через функции $x(t), v(t)$. Это позволяет, в частности, правильно рассчитать начальные условия для «медленного» движения $x_0(t), v_0(t)$ через начальные условия, заданные для траектории $x(t), v(t)$.

При разложении полученных выражений в степенной ряд по $1/\Omega^k$ получаются выражения вида

$$\begin{aligned}
x_0(t) &= x(t)\left(1 + \sum_{k=2,\infty}\frac{\tilde{x}^{(0)}_{2k}}{\Omega^{2k}}\right) +\\
&+ x(t)\sum_{k=1,\infty}\cos k(\Omega t + \varphi_0)\left(\sum_{j=k,\infty}\frac{\tilde{x}^{(c)}_{k,2j}}{\Omega^{2j}}\right) +\\
&+ v(t)\sum_{k=1,\infty}\sin k(\Omega t + \varphi_0)\left(\sum_{j=k,\infty}\frac{\tilde{x}^{(s)}_{k,2j+1}}{\Omega^{2j+1}}\right);\\
v_0(t) &= v(t)\left(1 + \sum_{k=2,\infty}\frac{\tilde{v}^{(0)}_{2k}}{\Omega^{2k}}\right) + \qquad (21)\\
&+ x(t)\sum_{k=1,\infty}\sin k(\Omega t + \varphi_0)\left(\sum_{j=k,\infty}\frac{\tilde{v}^{(s)}_{k,2j-1}}{\Omega^{2j-1}}\right) +\\
&+ v_0(t)\sum_{k=1,\infty}\cos k(\Omega t + \varphi_0)\left(\sum_{j=k,\infty}\frac{\tilde{v}^{(c)}_{k,2j}}{\Omega^{2j}}\right).
\end{aligned}$$

В частности, если подставить выражения (21) в соотношения (17) и объединить подобные члены, то можно с помощью системы рекуррентных алгебраических соотношений прямо выразить неизвестные коэффициенты $x^{(c)}_{k,2j}$, $x^{(s)}_{k,2j+1}$, $\tilde{x}^{(0)}_{2k}$, $v^{(s)}_{k,2j-1}$, $v^{(c)}_{k,2j}$, $\tilde{v}^{(0)}_{2k}$:

$$\begin{gathered}
\tilde{v}^{(0)}_4 = \frac{3}{2}\widehat{V}^2,\ \tilde{v}^{(0)}_6 = 10\widehat{U}\widehat{V}^2;\\
\tilde{x}^{(0)}_4 = \frac{3}{2}\widehat{V}^2, \tilde{x}^{(0)}_6 = 10\widehat{U}\widehat{V}^2;\\
\tilde{v}^{(s)}_{1,1} = \widehat{V},\ \tilde{v}^{(s)}_{1,3} = 2\widehat{U}\widehat{V}, \tilde{v}^{(s)}_{1,5} = \widehat{V}\left(8\widehat{U}^2 + \frac{33}{16}\widehat{V}^2\right);\\
\tilde{v}^{(c)}_{1,2} = \widehat{V}, \tilde{v}^{(c)}_{1,4} = 4\widehat{U}\widehat{V},\\
\tilde{v}^{(c)}_{1,6} = -\widehat{V}\left(16\widehat{U}^2 + \frac{49}{16}\widehat{V}^2\right);\\
\tilde{x}^{(s)}_{1,3} = 2\widehat{V}, \tilde{x}^{(s)}_{1,5} = 8\widehat{U}\widehat{V};\\
\tilde{x}^{(c)}_{1,2} = -\widehat{V}, \tilde{x}^{(c)}_{1,4} = -4\widehat{U}\widehat{V}, \qquad (22)\\
\tilde{x}^{(c)}_{1,6} = -\widehat{V}\left(16\widehat{U}^2 + \frac{9}{4}\widehat{V}^2\right);\\
\tilde{v}^{(s)}_{2,3} = \frac{1}{4}\widehat{V}^2, \tilde{v}^{(s)}_{2,5} = \frac{11}{8}\widehat{U}\widehat{V}^2, \tilde{v}^{(c)}_{2,4} = \frac{1}{8}\widehat{V}^2,\\
\tilde{v}^{(c)}_{2,6} = \frac{7}{8}\widehat{U}\widehat{V}^2;\\
\tilde{x}^{(s)}_{2,5} = \frac{3}{8}\widehat{V}^2, \tilde{x}^{(c)}_{2,4} = -\frac{5}{8}\widehat{V}^2, \tilde{x}^{(c)}_{2,6} = -\frac{23}{8}\widehat{U}\widehat{V}^2;\\
\tilde{v}^{(s)}_{3,5} = \frac{1}{48}\widehat{V}^3, \tilde{v}^{(c)}_{3,6} = \frac{1}{144}\widehat{V}^3, \tilde{x}^{(c)}_{3,6} = -\frac{5}{72}\widehat{V}^3, \ldots\,.
\end{gathered}$$

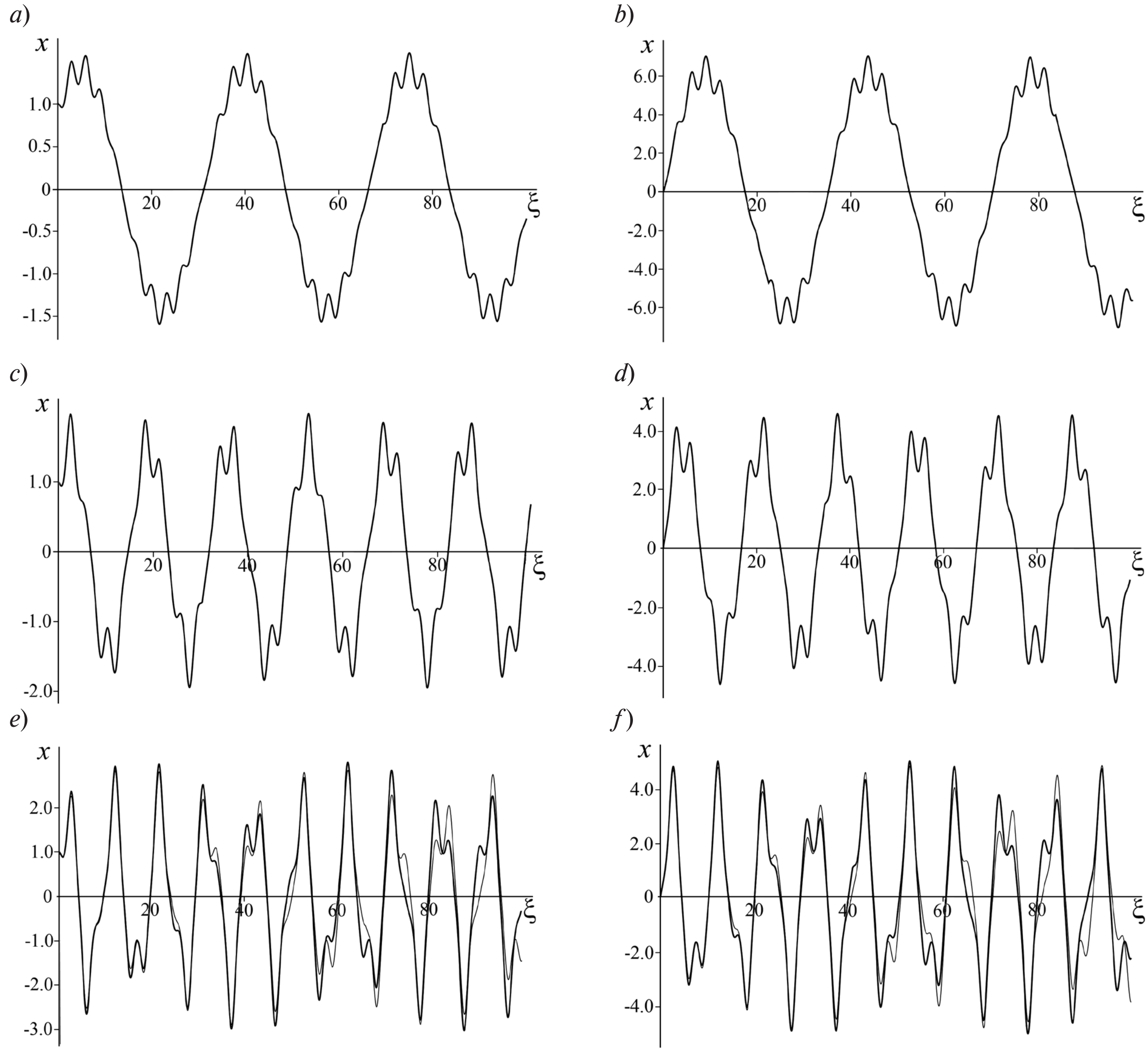


Рис. 2. Сравнение численно полученных траекторий уравнения (2) (тонкие линии) с приближенными траекториями, вычисленными с помощью псевдопотенциального разложения (17) − (22) с точностью до членов вида $1/\Omega^{14}$ (жирные линии).
Использованные значения параметров приведены в таблице. На рис. *a* − *d* тонкие и жирные линии налагаются друг на друга, поэтому они визуально не различимы (в отличие от графиков на рис. 1)

Для перехода от системы уравнений (16) к безразмерному уравнению используется подстановка

$$\widehat{U} = a,\ \widehat{V} = 2q,\ \Omega = 2.$$

На рис. 2 сравниваются приближенные решения, которые конструируются с помощью соотношений (17), (18), (20) и учитывают члены разложения вплоть до $1/\Omega^{14}$ с точными (численными) решениями системы уравнений (16). Как и следовало ожидать, при увеличении параметра q (т. е. при приближении к дальней границе зоны устойчивости) точность стремительно ухудшается, так что полученные выше выражения пригодны лишь для умеренно больших q (точнее, лишь для умеренно больших секулярных частот $\beta \le 0,62$). Расходимость при приближении к дальней границе зоны устойчивости, соответствующей секулярной частоте $\beta = 1$, вполне естественна, так как базовые предположения, на которых основано использование представления решений в форме (17), и вывод окончательных выражений не выполняются при условиях параметрического резонанса между собственными секулярными колебаниями ионов и вынужденными радиочастотными колебаниями. Последние обусловлены внешним воздействием со стороны радиочастотного электрического поля. Однако для диапазона секулярных частот $0 \le \beta \le 0,62$ вычисления траекторий ионов с помощью полученных приближенных формул оказываются достаточно точными.

Уравнение (19) дает улучшенный вариант приближенной формулы

$$\tilde{\beta}^2 \approx a + q^2/2$$

для частоты секулярных колебаний ионов, которая получается из классической теории псевдопотенциала:

$$\hat{\beta}^2(a,q) \approx a + \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{2}aq^2 + \left(\frac{1}{2}a^2q^2 + \frac{25}{128}q^4\right) + \left(\frac{1}{2}a^3q^2 + \frac{273}{512}aq^4\right) + \left(\frac{1}{2}a^4q^2 + \frac{2049}{2048}a^2q^4 + \frac{1169}{9216}q^6\right) + \dots \quad (23)$$

Неравенство $0 \le \hat{\beta}^2 \le 1$, а точнее пара неравенств

$$\beta_x^2 = \beta^2(a,q) \le 1, \quad \beta_y^2 = \beta^2(-a,-q) \ge 0,$$

при $a \ge 0$, $q \ge 0$, может использоваться для приближенного вычисления границ первой зоны устойчивости. При этом если неравенство $\beta_y^2 = \beta^2(-a,-q) \ge 0$ описывает ближнюю границу первой зоны устойчивости достаточно точно, то неравенство $\beta_x^2 = \beta^2(a,q) \le 1$ описывает дальнюю границу первой зоны устойчивости в лучшем случае качественно.

Как следует из данных рис. 3, вблизи дальней границы первой зоны устойчивости ряд (23) расходится, поэтому по мере приближения к дальней границе первой зоны устойчивости получение разумной точности возможно лишь при использовании неимоверно большого числа членов ряда.

Заключение

В результате проведенного исследования показано, что для квадрупольных радиочастотных полей понятие псевдопотенциальной функции можно обобщить вполне конструктивным образом. Цель такого обобщения состоит в уменьшении рассогласования между точными и аналитическими решениями, получаемыми при анализе упрощенных моделей рассматриваемого объекта. При этом точные решения невозможно получить в аналитическом виде. Полученное алгебраическое выраже-

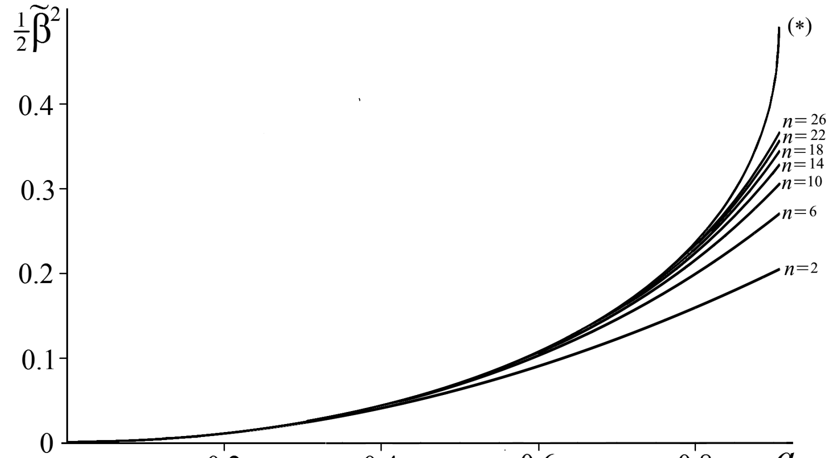


Рис. 3. Зависимость от q квадратичного коэффициента псевдопотенциальной (ПП) функции (23), вычисленного с помощью ПП-разложений (17) – (22) с разными порядками точности $1/\Omega^n$ для n = 2 – 26 в диапазоне $0 \le q \le 0,9080$ (a = 0). Кривая (*) соответствует функции для аналитически точного значения частоты секулярных колебаний (вычислена в соответствии с [21, 22, 31])

ние в виде усеченного псевдопотенциального ряда позволяет значительно расширить диапазон параметров радиочастотного поля. В таком диапазоне возможно не только качественное, но и количественное описание движения заряженных частиц в рамках традиционной псевдопотенциальной идеологии, для которой характерны идейная простота и физическая наглядность. Отметим, что такими преимуществами не обладают работы [21, 22].

К сожалению, расширенное таким образом понятие псевдопотенциала не слишком пригодно для описания движения заряженных частиц при приближении к области параметрического резонанса $(\beta \approx 1)$, где движение заряженных частиц в квадрупольных радиочастотных полях теряет устойчивость. В этом случае предпочтительными оказываются точные, хотя и несколько громоздкие псевдопотенциальные модели [21, 22]. Для умеренно больших значений секулярных частот, лежащих в диапазоне $0 \le \beta \le 0,62$, результаты оказываются вполне приемлемыми, тогда как для классической теории псевдопотенциала диапазон допустимых значений параметра β, обеспечивающих приемлемую точность вычислений, гораздо более скромный $(0 \le \beta \le 0,2)$.

В случае больших значений секулярных частот рекомендуется пользоваться точной теорией квадратичного псевдопотенциала для квадрупольных радиочастотных полей [21, 22] вместо приближенных псевдопотенциальных разложений.

Благодарности

Авторы благодарны создателям, сотрудникам и спонсорам цифровой библиотеки Numdam [37] за возможность открытого доступа к раритетной публикации [23].

Данная работа выполнена в рамках государственного задания № 007-00229-18-00 для Института аналитического приборостроения РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Курс теоретической физики. Т. 1. Механика. М.: Физматгиз, 1958. 208 с.

2. **Гапонов В.А., Миллер М.А.** О потенциальных ямах для заряженных частиц в высокочастотном поле // Журнал экспериментальной и технической физики. 1958. Т. 34. № 2. С. 242–243.

3. **Миллер М.А.** Движение заряженных частиц в высокочастотных электромагнитных полях // Известия вузов. Серия радиофизика. 1958. Т. 1. № 3. С. 110–123.

4. **Литвак А.Г., Миллер М.А., Шолохов Н.В.** Уточнение усредненного уравнения движения заряженных частиц в поле стоячей электромагнитной волны // Известия вузов. Серия радиофизика. 1962. Т. 5. № 6. С. 1160–1174.

5. **Сивухин Д.В.** Дрейфовая теория движения заряженной частицы в электромагнитных полях // В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып.1. М.: Госатомиздат, 1963. С. 7– 97.

6. **Морозов А.И., Соловьев Л.С.** Движение заряженной частицы в электромагнитных полях // В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып.2. М.: Госатомиздат, 1963. С. 177–261.

7. **Гейко В.И., Фрайман Г.М.** О точности усредненного описания движения заряженных частиц в высокочастотных полях // Журнал экспериментальной и технической физики. 2008. Т. 134. № 6. С. 1125–1129.

8. **Капица П.Л.** Электроника больших мощностей // Успехи физических наук. 1962. Т. 78. № 2. С. 181–265.

9. **Чирков А.Г.** Асимптотическая теория взаимодействия заряженных частиц и квантовых систем с внешними электромагнитными полями. Санкт-Петербург, Изд-во Санкт-Петербургского государственного технического университета, 2001. 257 с.

10. **Заславский Г.М., Сагдеев Р.З.** Введение в нелинейную физику. От от маятника до турбулентности и хаоса. М.: Наука, 1988. 368 с.

11. **Gerlich D.** Inhomogeneous RF fields: a versatile tool for the study of processes with slow ions. // C.-Y. Ng, M. Baer (Eds.), State-selected and state-to-state ion-molecule reaction dynamics. Part 1: Experiment, advances in chemical physics series. Vol. LXXXII. New York: John Wiley & Sons Inc., 1992. Pp. 1–176.

12. **Yavor M.I.** Optics of charged particle analyzers. Amsterdam: Academic Press, 2009. 373 p.

13. **Слободенюк Г.И.** Квадрупольные масс-спектрометры. М.: Атомиздат, 1974. 272 с.

14. **Dawson P.H.** Quadrupole mass spectrometry and its applications. Woodbury: American Institute of Physics, 1995. 372 p.

15. **March R.E., Todd J.F.** Quadrupole ion trap mass spectrometry. Ser. “Chemical Analysis”. Vol. 165. 2nd edition. Hoboken, New Jersey: John Wiley and Sons, 2005. 346 p.

16. **Major F.G., Gheorghe V.N., Werth G.** Charged particle traps. Physics and techniques of charged particle field confinement. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 2005. 297 p.

17. **Werth G., Gheorghe V.N., Major F.G.** Charged particle traps II. Applications. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. 256 p.

18. **Судаков М.Ю., Апацкая М.В.** Концепция эффективного потенциала для описания движения ионов в квадрупольном фильтре масс // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2012. Т. 142. Вып. 2 (8). С. 222–229.

19. **Судаков М.Ю., Мамонтов Е.В.** Исследование квадрупольного фильтра масс с квадрупольным возбуждением методом уравнения огибающей // Журнал технической физики. 2016. Т. 86. Вып. 11. С. 112–120.

20. **Sudakov M.** Nonlinear equations of the ion vibration envelope in quadrupole mass filters with cylindrical rods // International Journal of Mass Spectrometry. 2017. Vol. 422. Pp. 62–73.

21. **Douglas D.J., Berdnikov A.S., Konenkov N.V.** The effective potential for ion motion in a radio frequency quadrupole field revisited // International Journal of Mass Spectrometry. 2015. Vol. 377. Pp. 345–354.

22. **Berdnikov A.S., Douglas D.J., Konenkov N.V.** The pseudopotential for quadrupole fields up to q = 0.9080 // International Journal of Mass Spectrometry. 2017. Vol. 421. Pp. 204–223.

23. **Floquet G.** Sur les equations différentielles linéaires à coefficients périodiques // Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure. 2e serié. 1883. T. 12. Pp. 47–88.

24. **Бондаренко Г.В.** Уравнение Хилла и его применение в области технических колебаний. М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1936. 51 с.

25. **Мак-Лахлан Н.В.** Теория и приложения функций Матьё. М.: Изд-во иностранной литературы, 1953. 476 с.

26. **Еругин Н.П.** Метод Лаппо-Данилевского в теории линейных дифференциальных уравнений. Ленинград: Изд-во ЛГУ, 1956. 106 с.

27. **Еругин Н.П.** Линейные системы обыкновенных дифференциальных уравнений с периодическими и квазипериодическими коэффициентами. Минск: Изд-во АН БССР, 1963. 270 с.

28. **Гантмахер Ф.Р.** Теория матриц. Изд. 2-е, доп. М.: Наука, 1966. 576 с.

29. **Демидович Б.П.** Лекции по математической теории устойчивости. М.: Наука, 1967. 472 с.

30. **Якубович В.А., Старжинский В.М.** Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. М.: Наука, 1972. 718 с.

31. **Konenkov N.V., Sudakov M., Douglas D.J.** Matrix methods to calculate stability diagrams in quadrupole mass spectrometry // Journal of American Society for Mass Spectrometry. 2002. Vol. 13. No. 6. Pp. 597–613.

32. **Berdnikov A.S.** A pseudopotential description of the motion of charged particles in RF fields // Microscopy and Microanalysis. 2015. Vol. 21. No. S4. Pp. 78–83.

33. **Буляница А.Л., Курочкин В.Е.** Исследование процессов упорядочивания в открытых системах // Научное приборостроение. 2000. Т. 10. № 2. С. 43–49.

34. **Буляница А.Л., Курочкин В.Е., Бурылов Д.А.** Реализация процедуры оценивания постоянного сигнала на основе метода стохастической аппроксимации в модификации Я.З. Цыпкина // Радиотехника и электроника. 2002. Т. 47. № 3. С. 343–346.

35. **Евстрапов А.А., Буляница А.Л., Рудницкая Г.Е., Беленький Б.Г., Петряков А.О., Курочкин В.Е.** Особенности применения алгоритмов цифровой фильтрации // Научное приборостроение. 2003. Т. 13. № 2. С. 57–63.

36. **Буляница А.Л.** Математическое моделирование в микрофлюидике: основные положения // Научное приборостроение. 2005. Т. 15. № 2. С. 51–66.

37. Numdam, the French digital mathematics library. URL: http://www.numdam.org/.

Статья поступила в редакцию 18.07.2018, принята к публикации 26.07.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕРДНИКОВ Александр Сергеевич – *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ФГБУ науки «Институт аналитического приборостроения Российской академии наук», Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190103, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ИАП РАН, Рижский пр., 26
asberd@yandex.ru

ГАЛЛЬ Лидия Николаевна – *доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник ФГБУ науки «Институт аналитического приборостроения Российской академии наук», Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190103, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ИАП РАН, Рижский пр., 26
lngall@yandex.ru

ГАЛЛЬ Николай Ростиславович – *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ФГБУ науки «Институт аналитического приборостроения Российской академии наук», Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190103, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ИАП РАН, Рижский пр., 26

gall@ms.ioffe.ru

СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович – *кандидат физико-математических наук, доцент Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций, Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

k-solovyev@mail.ru

REFERENCES

[1] **L.D. Landau, E.M. Lifshitz,** Mechanics, 2nd ed., Course of theoretical physics, Vol. 1, Pergamon Press, 1969.

[2] **V.A. Gaponov, M.A. Miller,** Potential wells for charged particles in a high frequency electromagnetic field, Journal of Experimental and Theoretical Physics. 7(2) (1958) 242–243.

[3] **M.A. Miller,** Dvizheniye zaryazhennykh chastits v vysokochastotnykh elektromagnitnykh polyakh [The motion of charged particles in the high-frequency electromagnetic fields], Radiophysics and Quantum Electronics. 1 (3) (1958) 110–123.

[4] **A.G. Litvak, M.A. Miller, N.V. Sholokhov,** Utochneniye usrednennogo uravneniya dvizheniya zaryazhennykh chastits v pole stoyachey elektromagnitnoy volny [The refinement of the averaged equation of the motion of charged particles in the field of a standing electromagnetic wave], Radiophysics and Quantum Electronics. 5 (6) (1962) 1160–1174.

[5] **D.V. Sivukhin,** Dreyfovaya teoriya dvizheniya zaryazhennoy chastitsy v elektromagnitnykh polyakh, V kn.: Voprosy teorii plazmy [Drift theory of charged particle motion in the electromagnetic fields, In a book “Plazma theory problems”], Iss. 1, Gosatomizdat, Moscow, 1963, Pp. 7–97.

[6] **A.I. Morozov, L.S. Solovyev,** Dvizheniye zaryazhennoy chastitsy v elektromagnitnykh polyakh, V kn.: Voprosy teorii plazmy, [Charged particle motion in the electromagnetic fields, In a book “Plazma theory problems”], Iss. 2, Gosatomizdat, Moscow, 1963, Pp. 177–261.

[7] **V.I. Geyko, G.M. Fraiman,** Accuracy of the averaged particles in high-frequency fields, Journal of Experimental and Theoretical Physics. 107 (6) (2008) 960–964.

[8] **P.L. Kapitza,** High power electronics, Soviet Physics Uspekhi. 5 (5) (1963) 777–826.

[9] **A.G. Chirkov,** Asimptoticheskaya teoriya vzaimodeystviya zaryazhennykh chastits i kvantovykh sistem s vneshnimi elektromagnitnymi polyami [Asymptotic theory of interaction of charged particles and quantum systems with external electromagnetic fields], St. Petersburg State Polytechnic University, St. Petersburg, 2001.

[10] **R.Z. Sagdeev, D.A. Usikov, G.M. Zaslavsky,** Nonlinear physics: from the pendulum to turbulence and chaos (Ser. “Contemporary Concepts in Physics”, Vol. 4), Harwood Academic Publishers, Chur, London, Paris, New York, Melbourne, 1988.

[11] **D. Gerlich,** Inhomogeneous RF fields: a versatile tool for the study of processes with slow ions, In: State-selected and state-to-state ion-molecule reaction dynamics. Part 1: Experiment, advances in chemical physics series, C.-Y. Ng, M. Baer (Eds.), Vol. LXXXII, John Wiley & Sons Inc., New York, 1992, Pp. 1–176.

[12] **M.I. Yavor,** Optics of charged particle analyzers, Academic Press, Amsterdam, 2009.

[13] **G.I. Slobodenyuk,** Kvadrupolnyye mass spektrometry [Quadrupole mass spectrometers], Atomizdat, Moscow, 1974.

[14] **P.H. Dawson,** Quadrupole mass spectrometry and its applications, American Institute of Physics, Woodbury, 1995.

[15] **R.E. March, J.F. Todd,** Quadrupole ion trap mass spectrometry, Ser. “Chemical Analysis”, Vol. 165, 2nd Ed., John Wiley and Sons, Hoboken, New Jersey, 2005.

[16] **F.G. Major, V.N. Gheorghe, G. Werth,** Charged particle traps. Physics and techniques of charged particle field confinement, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2005.

[17] **G. Werth, V.N. Gheorghe, F.G. Major,** Charged particle traps II, Applications, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2009.

[18] **M.Yu. Sudakov, M.V. Apatskaya,** Concept of the effective potential in describing the motion of ions in a quadrupole mass filter, Journal of Experimental and Theoretical Physics. 115 (2) (2012) 194–200.

[19] **M.Y. Sudakov, E.V. Mamontov,** Analysis of the quadrupole mass filter with quadrupole excitation by the envelope equation method, Technical Physics. 2016. 61 (11) (2016) 1715–1723.

[20] **M. Sudakov**, Nonlinear equations of the ion vibration envelope in quadrupole mass filters with cylindrical rods, International Journal of Mass

Spectrometry. 422 (2017) 62–73.

[21] **D.J. Douglas., A.S. Berdnikov, N.V. Konenkov,** The effective potential for ion motion in a radio frequency quadrupole field revisited, International Journal of Mass Spectrometry. 377 (2015) 345–354.

[22] **A.S. Berdnikov, D.J. Douglas, N.V. Konenkov,** The pseudopotential for quadrupole fields up to q = 0.9080, International Journal of Mass Spectrometry. 421 (2017) 204–223.

[23] **G. Floquet,** Sur les equations différentielles linéaires à coefficients périodiques, Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure, 2e serié. 12 (1883) 47–88.

[24] **G.V. Bondarenko,** Uravneniye Khilla i yego primeneniye v oblasti tekhnicheskikh kolebaniy [The Hill equation and its application in the technical oscillation region], SA USSR, Moscow, Leningrad, 1936.

[25] **N.W. McLachlan,** Theory and application of Mathieu functions, Oxford Univ. Press, Oxford, 1947.

[26] **N.P. Erugin,** Lappo-Danilevskiy metod in the theory of differential equations, Leningrad University Press, Leningrad, 1956.

[27] **N.P. Erugin,** Linear systems of ordinary differential equations with periodic and quasi-periodic coefficients, Academic Press, New York, 1966.

[28] **F.R. Gantmacher,** The theory of matrices, Chelsea Pub. Co., USA, 1960.

[29] **B.P. Demidovich,** Lektsii po matematicheskoy teorii ustoychivosti [The course of lectures on the mathematical theory of stability], Moscow, Nauka, 1967.

[30] **V.A. Jakubovich, V.H. Starzhinskij,** Linear differential equations with periodic coefficients, Wiley, New York, 1975.

[31] **N.V. Konenkov, M. Sudakov, D.J. Douglas,** Matrix methods to calculate stability diagrams in quadrupole mass spectrometry, Journal of American Society for Mass Spectrometry. 13 (6) (2002) 597–613.

[32] **A.S. Berdnikov,** A pseudopotential description of the motion of charged particles in RF fields, Microscopy and Microanalysis. 21 (S4) (2015) 78–83.

[33] **A.L. Bulyanitsa, V.E. Kurochkin,** Studying ordering processes in open systems (on the example of pattern evolution in colonies of imperfect mycelial fungi), Nauchnoye priborostroyeniye. 10 (2) (2000) 43–49.

[34] **A.L. Bulyanitsa, V.E. Kurochkin, D.A. Burylov,** Implementation of the constant signal estimation procedure based on Tsypkin's modification of the stochastic approximation method, Journal of Communications Technology and Electronics. 47 (3) (2002) 307–309.

[35] **A.A. Evstrapov, A.L. Bulyanitsa, G.E. Rudnitskaya, et al.,** Characteristic features of digital signal filtering algorithms as applied to electrophoresis on a microchip, Nauchnoye priborostroyeniye. 13 (2) (2003) 57–63.

[36] **A.L. Bulyanitsa,** Mathematical modeling in microfluidics: basic concepts, Nauchnoye priborostroyeniye. 15 (2) (2005) 51–66.

[37] Numdam, the French digital mathematics library, URL: http://www.numdam.org/.

Received 18.07.2018, accepted 26.07.2018.

THE AUTHORS

BERDNIKOV Alexander S.
Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences
26 Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russian Federation
asberd@yandex.ru

GALL Lidiya N.
Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences
26 Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russian Federation
lngall@yandex.ru

GALL Nikolay R.
Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences
26 Rizhsky Ave., St. Petersburg, 190103, Russian Federation
gall@ms.ioffe.ru

SOLOVYEV Konstantin V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
k-solovyev@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.11306
УДК 539.126.3

РОЖДЕНИЕ КУМУЛЯТИВНЫХ ПРОТОНОВ ПРИ ФРАГМЕТАЦИИ ЯДЕР УГЛЕРОДА НА БЕРИЛЛИЕВОЙ МИШЕНИ

Д.М. Ларионова, М.М. Ларионова, Ю.М. Митранков, В.С. Борисов, В.Н. Соловьёв, А.Я. Бердников

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

На основе модели льежского внутриядерного каскада проведено моделирование столкновения ядер углерода с ядрами бериллия при начальных кинетических энергиях ядер углерода 0,60, 0,95 и 2,00 ГэВ/нуклон. Получены инвариантные сечения рождения протонов при столкновении ядер под углом 3,5°. Показано, что зависимость экспериментальных инвариантных сечений рождения протонов от кумулятивной переменной x в диапазоне $0{,}9 < x < 2{,}4$ можно трактовать на основе учета Ферми-движения нуклонов в ядре, процессов многократного рассеяния и образования дельта-резонанса. Проведено сравнение результатов модельных расчетов с экспериментальными данными и результатами исследования, в котором данные эксперимента проанализированы в рамках модели кварковых кластеров.

Ключевые слова: кумулятивная частица, дельта-резонанс, модель льежского внутриядерного каскада, бериллиевая мишень

Ссылка при цитировании: Ларионова Д.М., Ларионова М.М., Митранков Ю.М., Борисов В.С., Соловьёв В.Н., Бердников А.Я. Рождение кумулятивных протонов при фрагментации ядер углерода на бериллиевой мишени // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 65–73. DOI: 10.18721/JPM.11306

CUMULATIVE PROTONS PRODUCTION DURING THE CARBON NUCLEUS FRAGMENTATION ON THE BERYLLIUM TARGET

D.M. Larionova, M.M. Larionova, Yu. M. Mitrankov, V.S. Borisov, V.N. Solovev, A.Ya. Berdnikov

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

The collision of carbon nuclei with beryllium targets has been simulated in the framework of the Liège Intranuclear Cascade model at the carbon nuclei initial kinetic energies of 0.60, 0.95, 2.00 GeV / nucleon. Proton production invariant cross-sections at the nuclei collision angle of 3.5 degrees were obtained. It was shown that the dependence of experimental invariant cross-sections on the cumulative variable x in the range $0.9 < x < 2.4$ could be interpret on the basis of taking into account the Fermi motion of nucleons in nuclei, multiple scattering processes, and the formation of delta resonance. The calculation results were compared with experimental data and findings of investigation where data was analyzed in the context of the quark cluster model.

Key words: cumulative particle, delta resonance, Liège Intranuclear Cascade model, beryllium target.

Citation: D.M. Larionova, M.M. Larionova, Yu.M. Mitrankov, V.S. Borisov, V.N. Solovev, A.Ya. Berdnikov, Cumulative protons production during the carbon nucleus fragmentation on the beryllium target, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 65–73. DOI: 10.18721/JPM.11306

Введение

Под кумулятивным рождением частиц в ядро-ядерных соударениях подразумевается их рождение в кинематической области, запрещенной для свободных нуклон-нуклонных столкновений [1, 2].

Для характеристики кумулятивных частиц вводится безразмерная величина x – порядок кумулятивности (кумулятивная переменная) [3].

Существуют различные способы определения этой величины [1, 2]; в данной работе кумулятивная переменная x используется в виде отношения импульса p регистрируемого протона к импульсу p_0 нуклона в ядре углерода [4], в лабораторной системе координат (система покоя ядра мишени ^{9}Be):

$$x = p / p_0.$$

В настоящее время известны две принципиально разные точки зрения на образование кумулятивных частиц.

Первая – это учет Ферми-движения, многократного рассеяния внутри ядра, когда адронный снаряд или продукты его фрагментации испытывают несколько последовательных перерассеяний [1], и процессов, связанных с образованием резонансов. В результате в последнем внутриядерном столкновении становится возможным рождение частицы в области, кинематически недоступной при рассеянии на одиночном свободном нуклоне.

Вторая точка зрения берет за основу процессы, протекающие на расстояниях, много меньших характерных ядерных расстояний [5]. К наиболее распространенным моделям, описывающим такие процессы, относятся флуктонные [5] и модель нуклонных корреляций на коротких расстояниях [6, 7].

При этом флуктонные модели разделяют на два подкласса: «холодные» и «горячие». Первые предполагают, что флуктоны всегда существуют в начальном ядре [1, 5, 8, 9]; согласно же вторым, они формируются в процессе столкновения [10].

В эксперименте «фрагм» (название происходит от термина «фрагментация») на ускорительно-накопительном комплексе тяжелых ионов ТВН-ИТЭФ [11] (создан в Институте теоретической и экспериментальной физики (ИТЭФ) имени А.И. Алиханова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва) измерены выходы протонов под углом 3,5° при фрагментации ионов углерода с энергиями 0,60, 0,95 и 2,00 ГэВ/нуклон на бериллиевой мишени. Полученные данные представлены в виде зависимостей инвариантного сечения выхода протонов от кумулятивной переменной x в диапазоне $0{,}9 < x < 2{,}4$.

В работе [4] экспериментальные данные [11] были проанализированы на основе модели кварковых кластеров [8]. Согласно этой модели, в ядре существуют кластеры, состоящие из $3k$ (k = 1, 2, 3) валентных кварков. Обычным нуклонам ядра соответствует значение $k = 1$.

Однако в работе [4] не учитывали вклада процессов, не связанных с образованием кварковых кластеров, а именно – Ферми-движения нуклонов в ядре, многократного рассеяния, а также образования резонансов.

Целью данной работы является расчет сечений рождения кумулятивных протонов в инклюзивной реакции

$$^{12}\mathrm{C} + {}^{9}\mathrm{Be} = {}^{1}p + X, \qquad (1)$$

где ^1p – протон, X – все остальные продукты реакции.

В качестве исходных данных принималось, что начальные кинетические энергии ионов углерода составляют 0,60, 0,95 и 2,00 ГэВ/нуклон. Расчетная модель учитывала фермиевское движение нуклонов, многократное перерассеяние и образование резонансов. Гипотеза же о кварковых кластерах при этом привлекаться не должна.

Методика моделирования

Для оценки вклада процессов движения Ферми, многократного рассеяния и образования дельта-резонансов в сечение рождения протонов в реакции (1) использовалась расширенная модель льежского внутриядерного каскада [12] (Extension of the Liège Intranuclear Cascade Model).

Согласно модели внутриядерного каскада, столкновение двух нуклонов приводит либо к упругому, либо к неупругому рассеянию.

Полные сечения нуклон-нуклонного рассеяния $\sigma_{tot,pp}$ в миллибарнах (мб) были вычислены с использованием следующих формул [13, 14]:

$$\sigma^{\mathrm{I}}_{tot,pp} = 34\left(\frac{p_{lab}}{0,4}\right)^{-2,104} \quad \text{при} \quad p_{lab} < 0,44;$$

$$\sigma^{\mathrm{II}}_{tot,pp} = 23,5 + 1000(p_{lab} - 0,7)^4$$

$$\text{при} \quad 0,44 < p_{lab} < 0,80; \qquad (3)$$

$$\sigma^{\mathrm{III}}_{tot,pp} = 23,5 + \frac{24,6}{1 + \exp\left(-\dfrac{p_{lab} - 1,2}{0,1}\right)}$$

$$\text{при} \quad 0,8 < p_{lab} < 1,5; \qquad (4)$$

$$\sigma^{\mathrm{IV}}_{tot,pp} = 41 + 60(p_{lab} - 0,9)\exp(-1,2p_{lab})$$

$$\text{при} \quad 1,5 < p_{lab} < 3,0; \qquad (5)$$

$$\sigma^{\mathrm{V}}_{tot,pp} = 45,6 - 219p_{lab}^{-4,23} + $$
$$+ 0,41\log^2(p_{lab}) - 3,41\log(p_{lab})$$

$$\text{при } p_{lab} > 3,0; \qquad (6)$$

$$\sigma^{\mathrm{I}}_{tot,np} = 6,3555\exp[-3,2481\log(p_{lab}) -$$
$$- 0,377\log^2(p_{lab})]$$

$$\text{при} \quad p_{lab} < 0,446; \qquad (7)$$

$$\sigma^{\mathrm{II}}_{tot,np} = 33 + 196\left|p_{lab} - 0,95\right|^{2,5}$$

$$\text{при} \quad 0,446 < p_{lab} < 1,000; \qquad (8)$$

$$\sigma^{\mathrm{III}}_{tot,np} = 24,2 + 8,9p_{lab}$$

$$\text{при} \quad 1 < p_{lab} < 1,924; \qquad (9)$$

$$\sigma^{\mathrm{IV}}_{tot,np} = 48,9 - 33,7p_{lab}^{-3,08} + $$
$$+ 0,619\log^2(p_{lab}) - 5,12\log(p_{lab})$$

$$\text{при} \quad 1,924 < p_{lab}, \qquad (10)$$

где p_{lab}, ГэВ/c, — импульс в лабораторной системе координат.

Сечения нуклон-нуклонного упругого рассеяния $\sigma_{el,pp}$ в расширенной модели вычисляются с использованием следующих формул:

$$\sigma^{\mathrm{I}}_{el,pp} = \sigma_{tot,pp} \quad \text{при} \quad p_{lab} < 0,8; \qquad (11)$$

$$\sigma^{\mathrm{II}}_{el,pp} = \frac{1250}{p_{lab} + 50} - 4(p_{lab} - 1,3)^2$$

$$\text{при} \quad 0,8 < p_{lab} < 2,0; \qquad (12)$$

$$\sigma^{\mathrm{III}}_{el,pp} = \frac{77}{p_{lab} + 1,5}$$

$$\text{при} \quad 2,000 < p_{lab} < 3,096; \qquad (13)$$

$$\sigma^{\mathrm{IV}}_{el,pp} = 11,2 - 22,5p_{lab}^{-1,12} + $$
$$+ 0,151\log^2(p_{lab}) - 1,62\log(p_{lab})$$

$$\text{при} \quad 2,096 < p_{lab}; \qquad (14)$$

$$\sigma^{\mathrm{I}}_{el,np} = \sigma_{tot,np} \quad \text{при} \quad p_{lab} < 0,85; \qquad (15)$$

$$\sigma^{\mathrm{II}}_{el,np} = \frac{31}{\sqrt{p_{lab}}} \quad \text{при} \quad 0,85 < p_{lab} < 2,00; \quad (16)$$

$$\sigma^{\mathrm{III}}_{el,np} = \frac{77}{p_{lab} + 1,5} \quad \text{при} \quad 2,00 < p_{lab}. \qquad (17)$$

Сечения образования неупругих процессов можно вычислять как разности между полным сечением нуклон-нуклонного рассеяния и сечением упругого рассеяния.

Расчетное исследование

Результаты моделирования внутриядерного каскада представлены на рис. 1 в виде зависимости инвариантного сечения рождения протонов в исследуемой реакции (σ_{inv}) от кумулятивной переменной x. Инвариантное сечение рождения протонов вычислялось по формуле

$$\sigma_{inv} = \frac{E}{p_0}\frac{d^2\sigma}{dxd(p_t)^2},$$

где σ – полное сечение реакции; p_0 – импульс, приходящийся на нуклон налетающего ядра; E, p_t – полная энергия и поперечный импульс протона в лабораторной системе координат [4].

На рис. 1 – 3 представлены результаты моделирования без учета (то есть исключительно за счет Ферми-движения и многократного рассеяния) и с учетом образования дельта-резонансов $\Delta(1232)$. Также на

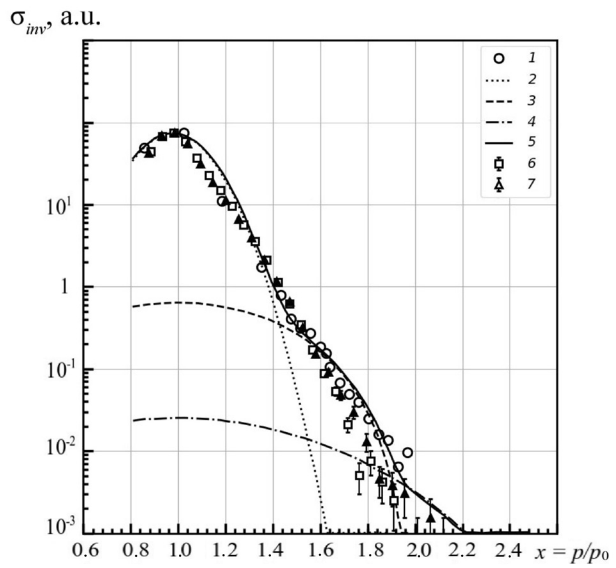


Рис. 1. Экспериментальные (символы *1*) [11] и модельные (*2* – *7*) зависимости сечения рождения протонов в реакции (1) (угол 3,5°) от кумулятивной переменной, при начальной энергии 0,60 ГэВ/нуклон.
При обработке данных использована расширенная модель льежского внутриядерного каскада [12] без учета (*6*) и с учетом (*7*) образования дельта-резонанса, а также модель кварковых кластеров (*2* – *5*); в рамках последней рассмотрены вклады одно- (*2*), двух- (*3*), трех- (*4*) нуклонных и суммарный вклад (*5*) кварковых кластеров

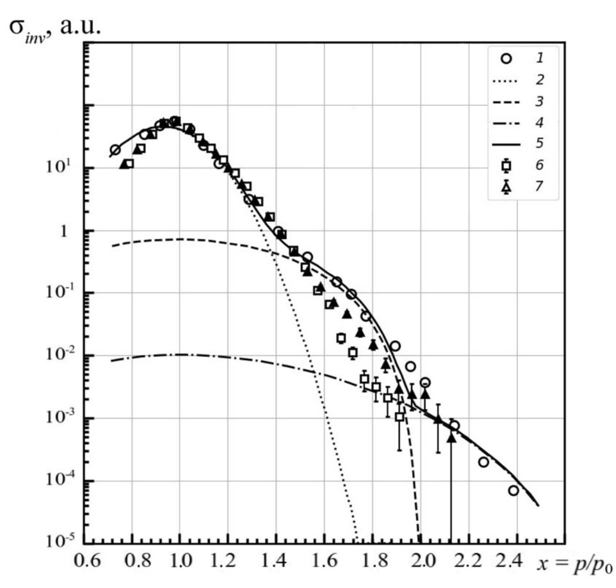


Рис. 2. Представленные данные аналогичны таковым на рис. 1, но получены при начальной энергии 0,95 ГэВ/нуклон

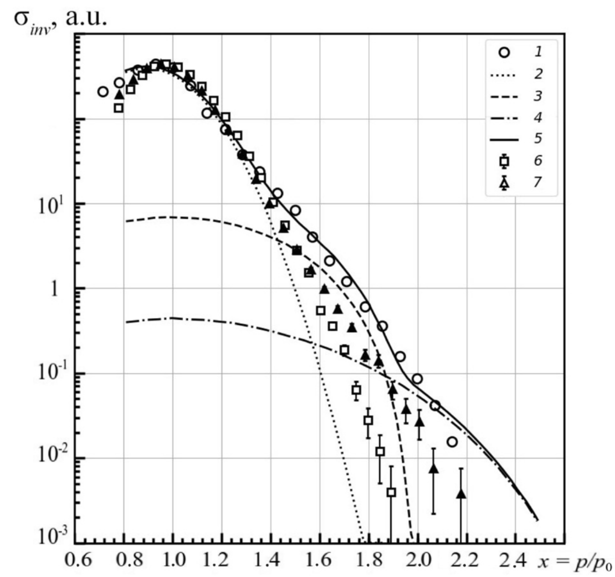


Рис. 3. Представленные данные аналогичны таковым на рис. 1 и 2, но получены при начальной энергии 2,00 ГэВ/нуклон

рис. 1 – 3 приведено сравнение данных моделирования внутриядерного каскада с экспериментальными данными и результатами, полученными в рамках модели кварковых кластеров.

Обсуждение результатов

Как следует из данных, представленных на рис. 1 – 3, одновременный учет Ферми-движения, процессов многократного рассеяния и образования дельта-резонансов приводит к образованию кумулятивных частиц в диапазоне $x > 1$.

На рис. 4 приведены примеры процессов, приводящих к образованию кумулятивных частиц.

Пример 1 (рис. 4, *a*). Рассмотрим способ образования кумулятивной частицы за счет процессов Ферми-движения нуклонов в налетающем ядре и многократного рассеяния. В этом конкретном примере события был зарегистрирован кумулятивный протон со значением $x = 1{,}58$.

Импульс нуклонов налетающего ядра может превышать значение p_0 в результате Ферми-движения в данном ядре. Согласно модели льежского внутриядерного каскада, импульсы нуклонов в ядре подчиняются распределению Гаусса, для которого среднеквадратичное значение (Root Mean Square) величины выражается как

$$\mathrm{RMS} = \sqrt{\frac{3}{5}} p_\mathrm{F},$$

где $p_\mathrm{F} = 270$ МэВ/c – импульс Ферми [15].

На первой стадии (*1*) рассматриваемого события протон с индексом 0 и импульсом 1603 МэВ/c упруго сталкивается с нейтроном 1, в результате чего импульс протона 0 уменьшается до значения 1337 МэВ/c (протон теряет энергию в результате упругого столкновения). Второй стадией (*2*) является упругое столкновение протона 3, импульс которого 1421 МэВ/c, с протоном 0, импульс которого 1337 МэВ/c. Вследствие такого столкновения, импульс протона 0 увеличивается до значения 1925 МэВ/c. Этот протон и регистрируется в данном событии как кумулятивный, причем импульсу 1925 МэВ/c соответствует значение кумулятивной переменной $x = 1{,}58$.

Пример 2 (рис. 4, *b*). Рассмотрим событие с образованием дельта-резонанса. На первой стадии (*1*) такого события протон с индексом 1 и импульсом 1346 МэВ/c сталкивается с протоном 0, в результате чего рождается дельта-резонанс 0 с импульсом 1098 МэВ/c. Второй стадией (*2*) является столкновение протона 2, чей импульс 1108 МэВ/c, с дельта-резонансом. После

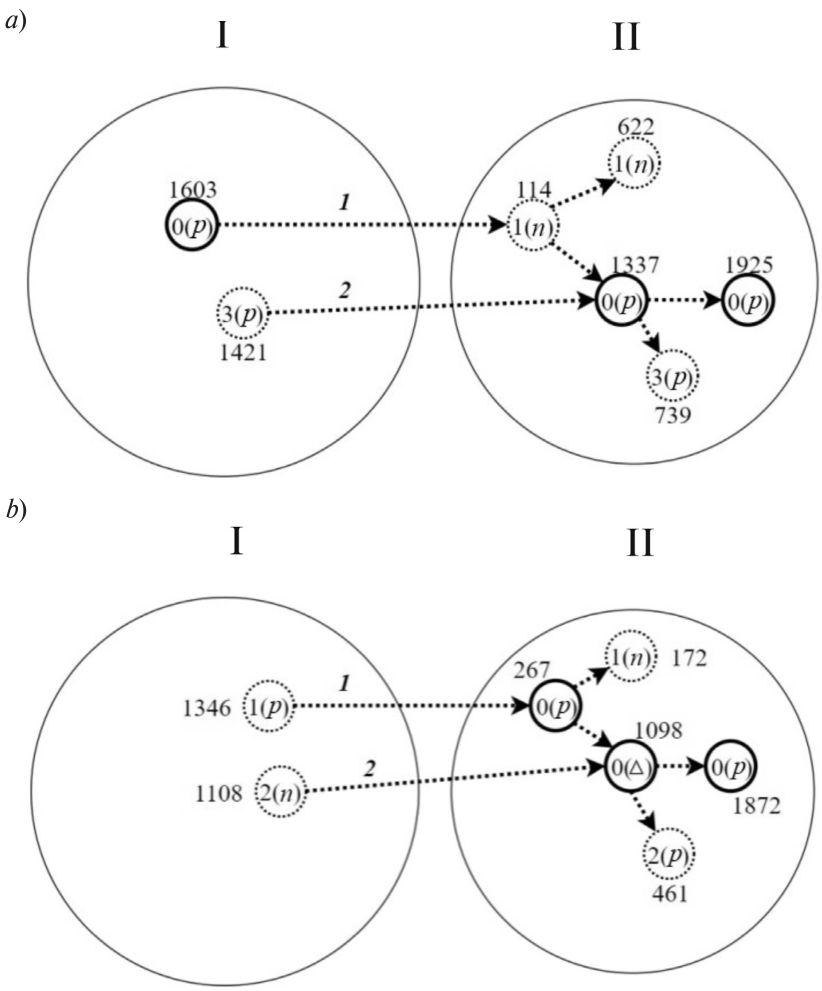


Рис. 4. Примеры событий, возникающих при столкновении ядер C (I) и Be (II), без образования (*a*) и с образованием (*b*) дельта-резонанса 0(Δ); *1*, *2* – стадии процессов. Внутриядерные нуклоны показаны малыми окружностями, рядом с которыми приведены их импульсы в единицах МэВ/*c*; (*n*), (*p*) – нейтрон и протон; 0, 1, 2, 3 – их индексы. Образованные в процессах кумулятивные частицы показаны малыми сплошными окружностями

этого образуется протон 0 с импульсом 1872 МэВ/c, который и регистрируется в данном событии как кумулятивный. Причем импульсу 1872 МэВ/c соответствует значение кумулятивной переменной $x = 1,53$.

Из выражений (4) и (5) следует, что при импульсах на нуклон ядра углерода, меньших 0,8 ГэВ/($c \cdot$ нуклон), сечение неупругих процессов, в том числе и образования дельта-резонансов, равно нулю.

Таким образом, полученные в результате моделирования сечения, как учитывающие образование дельта-резонансов, так и не учитывающие их образование, совпадают в области $x < 0,8/0,6 \approx 1,3$.

Благодаря учету процессов образования дельта-резонансов в области $x > 1,6$, инвариантное сечение увеличивается и становится ближе к экспериментальным значениям.

Проведем сравнение результатов моделирования, выполненного в настоящей работе, с предсказаниями гипотезы, основанной на существовании кварковых кластеров в ядрах (см. рис. 1 – 3).

Видно, что процессы многократного рассеяния и образования дельта-резонансов в области $x < 1,4$ так же хорошо описывают экспериментальные данные, как и подход кварковых кластеров, однако в области

$x > 1{,}4$ дают более низкие значения инвариантных сечений. При увеличении начальной кинетической энергии ионов углерода отклонение полученных результатов от экспериментальных данных становится все значительнее.

Заключение

Получены распределения инвариантных сечений по кумулятивной переменной с учетом процессов многократного рассеяния и образования резонансов, без привлечения гипотезы о кварковых кластерах в инклюзивной реакции (1)

$$^{12}C + {}^{9}Be = {}^{1}p + X$$

при начальных кинетических энергиях ионов углерода 0,60, 0,95, 2,00 ГэВ/нуклон.

Показано, что процессы многократного рассеяния и образования дельта-резонансов приводят к образованию кумулятивных частиц и дают существенный вклад в сечение рождения кумулятивных частиц. При начальной кинетической энергии ионов углерода 0,60 ГэВ/нуклон полученные результаты согласуются с экспериментальными данными. С увеличением энергии в области $x > 1{,}4$ полученные значения оказываются ниже, чем экспериментальные, что говорит о возможном появлении новых механизмов рождения кумулятивных частиц, например таких, как учет других нуклонных резонансов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, государственное задание 3.1498.2017 / 4.6.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ефремов А.В.** Кварк-партонная картина кумулятивного рождения // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1982. Т. 13. № 3. С. 613–634.

2. **Ставинский В.С.** Предельная фрагментация ядер – кумулятивный эффект // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 1979. Т. 10. № 5. С. 949–995.

3. **Ставинский В.С.** Единый алгоритм вычисления инклюзивных сечений рождения частиц с большими поперечными импульсами и адронов кумулятивного типа // Краткие сообщения ОИЯИ. 1986. Т. 18. № 86. С. 5–17.

4. **Абрамов Б.М., Алексеев П.Н., Бородин Ю.А. и др.** Проявление кварковых кластеров в образовании кумулятивных протонов в эксперименте по фрагментации ионов углерода // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2013. Т. 97. № 8. С. 509–513.

5. **Блохинцев Д.И.** О флуктуациях ядерного вещества // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1958. Т. 33. Вып. 5. С. 1295–1299.

6. **Tang A., Watson J.W. , Aclander J., et al.** $n-p$ Short-range correlations from (p, $2p + n$) measurements // Physical Review Letters. 2003. Vol. 90. No. 4. P. 042301.

7. **Tang A., Alster J., Asryan G., et al**. $n-p$ Short-range correlations from (p, $2p + n$) measurements // AIP Conf. Proc. 2000. Vol. 549. No. 1. Pp. 451–454.

8. **Ефремов А.В., Кайдалов А.Б., Ким В.Т., Лыкасов Г.И., Славин Н.В.** Образование кумулятивных адронов в кварковых моделях фрагментации флуктонов // Ядерная физика. 1988. Т. 47. Вып. 5. С .1364–1374.

9. **Braun M.A., Vechernin V.V.** Cumulative phenomena in the QCD approach // Nuclear Physics. B. Proc. Suppl. 2001. Vol. 92. No. 1–3. Pp. 156–161.

10. **Motornenko A., Gorenstein M.I.** Cumulative production of pions by heavy baryonic resonances in proton-nucleus collisions // arXiv:1604.04308v1 [hep-ph] 14 Apr. 2016. Pp. 1–21.

11. **Абрамов Б.М., Бородин Ю.А., Булычев С.А. и др.** Кумулятивные протоны в реакции ^{9}Be (^{12}C, p) при 0,2–3,2 ГэВ/нуклон // Известия РАН. Сер. физическая. 2011. Т. 75. № 4. С. 536–540.

12. **Pedoux S.** Extension of the Liège intranuclear-cascade model to the 2–15 GeV incident energy range. PhD thesis. Liège: University of Liège, 2011–2012.

13. **Aoust Th.** Amelioration du modèle de cascade intranucleaire de Liège en vue de l'ètude de cibles de spallation pour les systèmes hybrids. PhD thesis. Liège: University of Liège, 2006–2007.

14. **Baldini A., Flaminio V., Moorhead W.G., Morrison D.R.O.** Numerical data and functional relationships in science and technology. New series. Group 1. No. 12. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1988.

15. **Mancusi D., Boudard A., Cugnon J., et al.** Extension of the Liège intranuclear-cascade model to reactions induced by light nuclei // Phys. Rev. C. 2014. Vol. 90. No. 5. P. 054602.

Статья поступила в редакцию 05.06.2018, принята к публикации 07.06.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛАРИОНОВА Дарья Максимовна – *лаборант-исследователь Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
dlar@bk.ru

ЛАРИОНОВА Мария Максимовна – *лаборант-исследователь Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
mlario@bk.ru

МИТРАНКОВ Юрий Михайлович – *лаборант-исследователь Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
mitrankovy@gmail.com

БОРИСОВ Владислав Сергеевич – *лаборант-исследователь Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

СОЛОВЬЁВ Владимир Николаевич – *лаборант-исследователь Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
hydraca39@gmail.com

БЕРДНИКОВ Александр Ярославич – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

REFERENCES

[1] **A.V. Efremov,** Quark-parton picture of the cumulative production, Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei. 13(3) (1982) 613–634.

[2] **V.S. Stavinsky,** Limiting fragmentation of nuclei – the cumulative effect, Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei. 10(5) (1979) 949–995.

[3] **V.S. Stavinskij,** Unique algorithm for calculation of inclusive cross sections of particle production with big transverse momenta and of cumulative Type Hadrons, JINR Rapid Communications. 5 (18) (1986) 5–17.

[4] **B.M. Abramov, P.N. Alekseev, Yu.A. Borodin, et al.,** Manifestation of quark clusters in the emission of cumulative protons in the experiment of the fragmentation of carbon ions, JETP Letters. 97(8) (2013) 439 –443.

[5] **D.I. Blokhintsev,** On the fluctuations of nuclear matter, JETP.6(5) (1958) 995–999.

[6] **A. Tang, J.W. Watson, J. Aclander, et al.,** *n–p* Short-range correlations from (*p*, 2*p* + *n*) measurements, Physical Review Letters. 90 (4) (2003) 042301.

[7] **A. Tang, J. Alster, G. Asryan, et al**., *n–p* Short-range correlations from (*p*, 2*p* + *n*) measurements, AIP Conf. Proc. 549 (1) (2000) 451–454.

[8] **A.V. Efremov, A.B. Kaidalov, V.T. Kim, et al.,** Cumulative hadron production in quark models of flucton fragmentation, Sov. J. Nucl. Phys. 47 (5) (1988) 1364–1374.

[9] **M.A. Braun, V.V. Vechernin,** Cumulative phenomena in the QCD approach, Nuclear Physics,

B, Proc. Suppl. 92 (1–3) (2001) 156–161.

[10] **A. Motornenko, M.I. Gorenstein,** Cumulative production of pions by heavy baryonic resonances in proton-nucleus collisions, arXiv:1604.04308v1[hep-ph] 14 Apr. 2016. Pp. 1–21.

[11] **B.M. Abramov, Yu.A. Borodin, S.A. Bulychev, et al.,** Cumulative protons in the ^{9}Be (^{12}C, *p*) reaction at 0.2 – 3.2 Gev/nucleon, Bull. Russ. Acad. Sci.: Physics. 75 (4) (2011) 500–504.

[12] **S. Pedoux,** Extension of the Liège intranuclear cascade model to the 2 –15 GeV incident energy range, PhD thesis, University of Liège, Liège (2011–2012).

[13] **Th. Aoust,** Amelioration du modèle de cascade intranucleaire de Liège en vue de l'ètude de cibles de spallation pour les systèmes hybrids, PhD thesis, University of Liège, Liège (2006–2007).

[14] **A. Baldini, V. Flaminio, W.G. Moorhead, D.R.O. Morrison,** Numerical data and functional relationships in science and technology, New series Group 1, No. 12, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1988.

[15] **D. Mancusi, A. Boudard, J. Cugnon, et al.,** Extension of the Liège intranuclear-cascade model to reactions induced by light nuclei, Phys. Rev. C. 90 (5) (2014) 054602.

Received 05.06.2018, accepted 07.06.2018.

THE AUTHORS

LARIONOVA Dariya M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
dlar@bk.ru

LARIONOVA Mariya M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
mlario@bk.ru

MITRANKOV Yuriy M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
mitrankovy@gmail.com

BORISOV Vladislav S.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vl-borisof@yandex.ru

SOLOVEV Vladimir N.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
hydraca39@gmail.com

BERDNIKOV Aleksandr Ya.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
alexber@phmf.spbstu.ru

DOI: 10.18721/JPM.11307
УДК 519.24

ЗАМЕЧАНИЯ К ИСПОЛЬЗОВАНИЮ ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Ю.А. Пичугин

Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

В статье рассматриваются вопросы, связанные с использованием метода главных компонент (ГК) в математическом моделировании: априорная оценка дисперсии погрешности регрессии на ГК для случаев большой и малой выборки; оценки минимального риска; оценка структурного подобия; проблема пропущенных данных и прогноз нестационарных временных рядов. Во всех случаях автор предлагает свои решения рассматриваемых вопросов или исправляет ранее допущенные неточности.

Ключевые слова: главная компонента, априорная оценка, дисперсия погрешности регрессии, малый объем выборки

Ссылка при цитировании: Пичугин Ю.А. Замечания к использованию главных компонент в математическом моделировании // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 74–89. DOI: 10.18721/JPM.11307

NOTES ON USING THE PRINCIPAL COMPONENTS IN THE MATHEMATICAL SIMULATION

Yu.A. Pichugin

Saint-Petersburg State University of Aerospace Instrumentation,
St. Petersburg, Russian Federation

The paper discusses the issues related to the use of principal components analysis (PCA) in mathematical simulation. The paper significantly expands the range of the solved problems using PCA. In particular, the solutions of the following three tasks are given: (*i*) structural similarity and homogeneity estimation for random Gaussian vectors; (*ii*) recovery of missing data; (*iii*) the forecast of non-stationary time series based on the caterpillar method, which is a generalization of PCA for non-stationary time series. To solve the problems, to restore missing data and to predict the data, the author offers an unbiased estimation of the variance of the error of the regression on the PCs base for the cases of large and small samples. All the main statements are formulated in the form of theorems proved by the author.

Key words: principal component, variance of the regression error, small sample volume

Citation: Yu.A. Pichugin, Notes on using the principal components in the mathematical simulation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 74–89. DOI: 10.18721/JPM.11307

Введение

Анализ, или метод главных компонент (далее сокращения для главных компонент – PCs, а для метода – PCA (Principal Component Analysis)) представляет собой хорошо известный аппарат математической статистики. Этот метод был предложен К. Пирсоном в 1901 году [1], и суть PCA состоит в следующем.

Если должным образом повернуть (посредством ортогонального преобразования) систему координат *n*-мерного пространства так, чтобы оси координат совпадали с главными осями эллипсоида рассеяния, то компоненты нормально распределенного *n*-мерного центрированного вектора будут некоррелированными и, в силу нормального закона распределения, независимыми.

В алгебраическом смысле это есть не что иное, как приведение ковариационной матрицы к диагональному виду путем ортогонального преобразования, а квадратичной формы в экспоненте функции плотности многомерного нормального распределения – к каноническому виду. Хорошо известное преобразование Карунена – Лоева [2, 3] есть, по сути, именно это преобразование координат. Переход же к независимым переменным PCs позволяет, как правило, существенно сократить размерность исследуемой задачи с минимальной потерей информации.

В связи с этим в литературе PCs нередко выводятся как решение оптимизационной задачи, хотя все их оптимальные свойства достаточно хорошо видны из самого спектра ковариационной матрицы (спектр показывает, какова доля отбрасываемой дисперсии, см. далее).

В анализе временных рядов PCA известен как анализ сингулярного спектра (SSA – Singular Spectrum Analysis), где посредством данного метода решается проблема избыточности классического спектрального анализа [4 – 6]. Особенность SSA состоит в том, что размерность вектора в этом случае равна N, а размерность матрицы взаимных ковариаций равна $N \times N$ (N – длина исследуемого временного ряда). При этом элементы ковариационной матрицы вычисляются особым способом, когда делитель, независимо от величины сдвига, а соответственно и от числа слагаемых, равен N. Такие оценки, очевидно, относятся к классу смещенных оценок, но именно они не приводят в спектральном анализе к искажению (в сторону завышения, как отмечают Г. Дженкинс и Д. Ваттс [7]) длины волны. Проблема большой размерности ковариационной матрицы в реализации SSA, как показано в работе [8], легко решается применением итераций фон Мизеса, так как все строки ковариационной матрицы временного ряда могут быть получены из первой строки посредством сдвига, дублирования и перестановки элементов. Собственные значения и собственные векторы ковариационной матрицы получаются последовательностью простых итераций без вращения матрицы размерности $N \times N$.

Альтернативой SSA является «метод гусеницы» [9], а также метод, предлагаемый нами далее в настоящей работе (см. разделы «Проблема относительно малой выборки» и «Прогноз нестационарных временных рядов»), где схема прогноза строится на основе метода гусеницы.

Следует отметить, что существует множество методов, близких к PCA, например, в методе независимых компонент (ICA) последние могут подчиняться не только распределению Гаусса, но распределениям Стьюдента, Коши, Дирихле. Отметим, что метод независимых компонент известен также как анализ указанных компонент (ICA – Independent Component Analysis).

Обобщением PCA является метод главных кривых и многообразий. В последнее время PCA широко используется для визуализации и графического представления многомерных данных (рассматривается проекция выборки на плоскость первых двух главных осей [10, 11]). При этом требование нормального распределения исходных данных не возникает.

Здесь мы имеем большое разнообразие достаточно близких по сути методов, таких как многомерное шкалирование, нелинейный маппинг, поиск наилучшей проекции, а также методы нейросетевых задач, такие как метод «узкого горла», самоорганизующиеся карты Кохонена и т. п. Следует также отметить, что графическое представление многомерных данных проекцией на плоскость первых двух главных осей PCs позволяет получить достаточно хорошее начальное приближение разделения выборки в решении задачи классификации в работе [12].

Цель настоящей работы – расширение спектра задач, решаемых на основе метода главных компонет.

В связи с указанной целью в статье рассматриваются задачи анализа структурного подобия, восстановления пропущенных данных, а также прогностическая задача нестационарных рядов. При этом уточняются детали метода главных компонет, непосредственно связанные с задачами восстановления пропусков и прогноза. Вопросы же снижения размерности и визуализации многомерных данных относятся в данном исследовании к второстепенным.

Краткое описание математического аппарата PCA

Предполагается, что вектор $\mathbf{y}$ имеет размерность m ($\dim\mathbf{y} = m$) и подчиняется многомерному нормальному распределению, т. е. $\mathbf{y} \sim N(\boldsymbol{\theta}_y, \mathbf{V}_y)$.

Пусть $\mathbf{P}$ – ортогональная матрица, такая, что

$$\mathbf{P}^T\mathbf{V}_y\mathbf{P} = \boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m)$$

$$\text{и } \lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \ldots \ge \lambda_m,$$

где T – символ (оператор) транспонирования.

Напомним, что столбцы матрицы $\mathbf{P}$ есть собственные векторы матрицы $\mathbf{V}_y$, а совокупность собственных чисел $\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m\}$ называется спектром этой матрицы. В математической статистике столбцы матрицы $\mathbf{P}$ называются базисом главных компонент, а главными компонентами называются компоненты вектора $\mathbf{P}^T(\mathbf{y} - \boldsymbol{\theta}_y)$. В приложениях параметры распределения $N(\boldsymbol{\theta}_y, \mathbf{V}_y)$, как правило, неизвестны. При наличии выборки $\{\mathbf{y}_j,\ j = 1, 2, \ldots, n\}$ мы можем вычислить несмещенные оценки неизвестных параметров:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_y = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\mathbf{y}_j,$$
$$\hat{\mathbf{V}}_y = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(\mathbf{y}_j - \hat{\boldsymbol{\theta}}_y)(\mathbf{y}_j - \hat{\boldsymbol{\theta}}_y)^T. \quad (1)$$

В этом случае в качестве $\mathbf{P}$ берем ортогональную матрицу $\hat{\mathbf{P}}$, которая приводит к диагональному виду оценку $\hat{\mathbf{V}}_y$, т. е.

$$\hat{\mathbf{P}}^T\hat{\mathbf{V}}_y\hat{\mathbf{P}} = \hat{\boldsymbol{\Lambda}} = \mathrm{diag}(\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \ldots, \hat{\lambda}_m)$$
$$\text{и } \hat{\lambda}_1 \ge \hat{\lambda}_2 \ge \ldots \ge \hat{\lambda}_m. \quad (2)$$

Очевидно, что матрицы $\mathbf{V}_y$ и $\hat{\mathbf{V}}_y$ в принципе не равны, следовательно, не равны и матрицы $\mathbf{P}$ и $\hat{\mathbf{P}}$.

Задача снижения размерности, как и другие задачи, рассмотренные в данной работе, непосредственно связана с проверкой следующей гипотезы:

$$\mathrm{H}\colon \lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \ldots \ge \lambda_k \ge \lambda_{k+1} = \lambda_{k+2} = \ldots = \lambda_m. \quad (3)$$

Принятие этой гипотезы позволяет рассматривать вектор меньшей размерности

$$\hat{\mathbf{P}}_{(k)}^T(\mathbf{y} - \hat{\boldsymbol{\theta}}_y),$$

где матрица $\hat{\mathbf{P}}_{(k)}$ содержит только первые k столбцов матрицы $\hat{\mathbf{P}}$.

Первым известным тестом для проверки гипотезы H (см. формулу (3)) был тест Бартлетта [13, 14] (см., например, монографию [15] или справочник [16]). Однако, если первое цитирование теста Бартлетта [15] предполагать безупречным, то во втором обнаруживаются сразу две неточности (знак и множитель).

Действительно, в работе [15] χ^2-статистика для проверки гипотезы H выражается как

$$\gamma_\eta = n'\left\{(m-k)\ln\left(\frac{1}{m-k}\sum_{i=k+1}^{m}\hat{\lambda}_i\right) - \right.$$
$$\left. - \ln\left(\prod_{i=k+1}^{m}\hat{\lambda}_i\right)\right\},$$

где

$$n' = n - k - \frac{1}{6}\left[2(m-k) + 1 + \frac{2}{(m-k)}\right],$$

тогда как в справочном издании [16] эта статистика следует выражению

$$\gamma_\eta = (n-1)\left\{(m-k)\ln\left(\frac{1}{m-k}\sum_{i=k+1}^{m}\widehat{\lambda}_i\right) + \ln\left(\prod_{i=k+1}^{m}\widehat{\lambda}_i\right)\right\}.$$

Оба издания указывают одинаковое число степеней свободы η.

В работе [15]:

$$\eta = \frac{1}{2}(m-k+2)(m-k-1);$$

В работе [16]:

$$\eta = \frac{1}{2}(m-k+1)(m-k) \ -1.$$

В настоящее время широкую известность приобрел тест, называемый правилом «сломанной трости» (англ. Broken stick model, см, например, статью [17]). Согласно этому тесту, следует выбрать максимальное значение k, при котором выполняется неравенство

$$\frac{\widehat{\lambda}_k}{\mathrm{tr}\widehat{\mathbf{V}}_y} > \frac{1/k + 1/(k+1) + ... + 1/m}{m},$$

где tr – след матрицы.

Наиболее простым средством определения k является визуальный анализ графического представления спектра ковариационной матрицы в порядке убывания. В этом случае в качестве k берется значение, которое предшествует смене относительно быстрого убывания собственных значений на относительно медленное (плавное), что, в сущности, повторяет метод сломанной трости (на интуитивном, неформализованном уровне). Во многих справочных и учебных изданиях предлагается определять k из соотношения

$$\left(\sum_{i=1}^{k}\widehat{\lambda}_i \,/\, \sum_{i=1}^{m}\widehat{\lambda}_i\right)100\% \approx K\%,$$

где K – заранее установленный процент общей дисперсии.

Выбор метода определения k, в конечном итоге, зависит от характера решаемой задачи. Приступим к изложению результатов.

Очевидно, что при снижении размерности возникает ошибка, дисперсия которой должна быть как-то связана с отбрасываемой частью выборочного спектра. Решению этой задачи посвящены два следующих раздела статьи.

Априорная оценка дисперсии погрешности регрессии на PCs

Регрессией вектора **y** на PCs (на компоненты вектора **z**) называется связь, выраженная уравнением вида

$$\mathbf{y} = \boldsymbol{\theta}_y + \mathbf{P}_{(k)}\mathbf{z} + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (4)$$

Согласно общим принципам классического регрессионного анализа, предполагается, что

$$\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I}), \quad (5)$$

где $\mathbf{0}$ – нулевой вектор, а $\mathbf{I}$ – единичная матрица соответствующей размерности.

Предположение (5) означает, что

$$\mathrm{E}(\varepsilon_i) = 0, \ \ \mathrm{var}(\varepsilon_i) = \sigma^2 \ \ (i = 1, 2, \ldots, m)$$

$$\text{и } \ \mathrm{cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0 \, (i \neq j),$$

где E, var и cov – операторы математического ожидания, дисперсии и ковариации, соответственно.

Пусть в описанных выше условиях рассматривается некоторая реализация вектора **y**. Это может быть одна из тех реализаций, которые использовались при вычислении оценок параметров $(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_y, \widehat{\mathbf{V}}_y)$, т. е. $\mathbf{y}_j$, $(j = 1, 2, \ldots, n)$, или одна из последующих $\mathbf{y}_{n+l}$, $(l \geq 1)$, что не принципиально. Поэтому нижний индекс пока опускаем. В практических задачах моделирования вместо уравнения (4) мы имеем регрессионную модель вида

$$\mathbf{y} = \widehat{\boldsymbol{\theta}}_y + \widehat{\mathbf{P}}_{(k)}\mathbf{z} + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (6)$$

Прежде всего, заметим, что, согласно классическому регрессионному анализу, уравнение (6) следовало бы называть регрессией на базис PCs, так как сами PCs (компоненты вектора **z**) на этапе применения построенной модели (6) являются определяемыми параметрами. Регрессия именно на PCs фигурирует в доказательстве следующей теоремы.

Теорема 1. *В условиях модели (6), где элементы модели вычислены по формулам*

(1), (2), при верной (принятой) гипотезе H *(см. выражение (3)) и предположении (5), априорная несмещенная оценка* σ^2 *выражается как*

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{n-1}{(m-k)(n-k-1)} \sum_{i=k+1}^{m} \hat{\lambda}_i. \qquad (7)$$

Доказательство. В регрессионной модели (4), которая связывает три нормально распределенных центрированных вектора $(\mathbf{y} - \boldsymbol{\theta}_y$, $\mathbf{z}$ и $\boldsymbol{\varepsilon})$, перейдем к ковариациям. Тогда имеем следующее равенство:

$$\mathbf{V}_y = \mathbf{P}_{(k)} \mathbf{V}_z \mathbf{P}_{(k)}^T + \mathbf{V}_\varepsilon, \qquad (8)$$

где

$$\mathbf{V}_\varepsilon = \sigma^2 \mathbf{I}, \;\; \mathbf{V}_z = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \ldots, \sigma_k^2),$$

$$\sigma_i^2 = \mathrm{var}(z_i), \; (i = 1, 2, \ldots, k).$$

Умножим равенство (8) слева на $\mathbf{P}^T$, а справа – на $\mathbf{P}$. В результате имеем:

$$\begin{aligned} &\mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_k, \lambda_{k+1}, \ldots, \lambda_m) = \\ &= \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \ldots, \sigma_k^2, 0, \ldots, 0) + \\ &\quad + \mathrm{diag}(\sigma^2, \sigma^2, \ldots, \sigma^2), \end{aligned} \qquad (9)$$

т. е.

$$\lambda_i = \sigma_i^2 + \sigma^2 \; (i = 1, 2, \ldots, k),$$

$$\lambda_i = \sigma^2 \; (i = k+1, k+2, \ldots, m).$$

Здесь следует особо отметить, что не только равенство (9) справедливо лишь при верной гипотезе H (см. (3)), но и предположение (5) в случае большой выборки также возможно лишь при верной гипотезе H. Это непосредственно видно из равенства (9), где $\lambda_i = \sigma^2$. Однако эта логика нарушается в случае малой выборки (см. далее).

Из равенства (9) также следует, что

$$\sigma^2 = \frac{1}{(m-k)} \sum_{i=k+1}^{m} \lambda_i. \qquad (10)$$

Рассмотрим классическую модель регрессии [18]:

$$\begin{aligned} x_j &= \beta_0 + \beta_1 z_{j,1} + \beta_2 z_{j,2} + \ldots \\ &\ldots + \beta_{p-1} z_{j,p-1} + \varepsilon_j \; (j = 1, 2, \ldots, n). \end{aligned} \qquad (11)$$

Для произвольно выбранного значения i $(i = 1, 2, \ldots, m)$ подставим в совокупность уравнений (11) вместо x_j исходные значения $y_{i,j}$, а в качестве $z_{j,l}$ $(l = 1, 2, \ldots, k;\; k = p-1)$ подставим значения выборочных PCs, вычисленные по формуле

$$(\hat{z}_{j,1}, \hat{z}_{j,2}, \ldots, \hat{z}_{j,k}) = (\mathbf{y}_j - \hat{\boldsymbol{\theta}}_\mathbf{y})^T \hat{\mathbf{P}}_{(k)},$$

где $\mathbf{y}_j$ – j-я реализация $\mathbf{y}$ в исходной выборке.

В последнем случае мы оставляем прежние обозначения. Это PCs исходной выборки, но индексы (номера) компоненты и реализации (l и j) меняем местами, приводя в соответствие стандартам регрессионного анализа, т. е. модели (11). В данном контексте эти значения PCs

$$\{\hat{z}_{j,1}, \hat{z}_{j,2}, \ldots, \hat{z}_{j,k}\}$$

считаем известными и модель (11) здесь действительно есть регрессия на PCs. Тогда уравнение (11) будет соответствовать i-й строке матричного равенства (6).

Из условия

$$\bar{z}_l = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} z_{j,l} = 0 \;\; (l = 1, 2, \ldots, k)$$

следует, что

$$\hat{\beta}_0 = \bar{x},$$

где $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} x_j$, т. е. $\hat{\beta}_0 = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} y_{i,j}$ (см. выше).

PCA обеспечивает минимальность остаточной суммы квадратов, как и метод наименьших квадратов (OLS – Ordinary Least Squares), следовательно, вектор-строка OLS-оценок

$$(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \ldots, \hat{\beta}_{p-1})$$

совпадает с i-й строкой матрицы $\hat{\mathbf{P}}_{(k)}$, т. е.

$$(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \ldots, \hat{\beta}_{p-1}) = [\hat{\mathbf{P}}_{(k)}]_i,$$

где $[\hat{\mathbf{P}}_{(k)}]_i$ – i-я строка матрицы $\hat{\mathbf{P}}_{(k)}$.

Это утверждение нетрудно проверить непосредственным вычислением. Определим следующие матрицы исходных данных:

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1 - \hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{y}_2 - \hat{\boldsymbol{\theta}}, \ldots, \mathbf{y}_n - \hat{\boldsymbol{\theta}}),$$

$$\mathbf{Z} = \hat{\mathbf{P}}_{(k)}^T \mathbf{Y}.$$

Тогда аналог модели (6) для этих матриц можно записать в виде

$$\mathbf{Y} = \hat{\mathbf{P}}_{(k)} \mathbf{Z} + \mathbf{E},$$

где $\mathbf{E}$ – $(m \times n)$-матрица всех остатков регрессии.

Соответственно, аналог (11) запишется в виде

$$\mathbf{Y}^T = \mathbf{Z}^T \widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T + \mathbf{E}^T.$$

Далее нам нужно проверить равенство

$$\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T = (\mathbf{Z}\mathbf{Z}^T)^{-1}\mathbf{Z}\mathbf{Y}^T,$$

которое и означает, что матрица $\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}$, а, соответственно, и все ее строки – суть OLS-оценки.

Подставляя выражение для матрицы $\mathbf{Z}$ (см. выше), умножая справа на $\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T$ и расставляя дополнительные скобки, имеем очевидное тождество:

$$(\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T\widehat{\mathbf{P}}_{(k)})\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T =$$
$$= (\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T\widehat{\mathbf{P}}_{(k)})^{-1}(\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T\widehat{\mathbf{P}}_{(k)})\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T,$$

так как $\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T\widehat{\mathbf{P}}_{(k)} = \mathbf{I}$.

Корректность умножения на $\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T$ основана на том, что ранг матриц при этом не снижается:

$$\operatorname{rank}(\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T) = \operatorname{rank}\widehat{\mathbf{P}}_{(k)} = k.$$

Из принятых предположений и равенства (10) следует, что остаточная сумма квадратов S^2 регрессионной модели (11) выражается как

$$S^2 = \frac{n-1}{(m-k)}\sum_{i=k+1}^{m}\widehat{\lambda}_i.$$

В соответствии с теорией линейной регрессии [18], оценка

$$\widehat{\sigma}^2 = \frac{S^2}{n-p} = \frac{n-1}{(m-k)(n-k-1)}\sum_{i=k+1}^{m}\widehat{\lambda}_i$$

является несмещенной (напомним, что $p = k + 1$).

Теорема 1 доказана.

Отметим, что оценка (7) и краткий набросок доказательства теоремы 1, содержащий основную идею (см. формулу (9)), были предложены ранее автором настоящей статьи в работе [19]. В ряде задач, касающихся оценки информативности (см. [20]), требуется именно смещенная оценка σ^2. В этом случае необходимо брать оценку

$$\widetilde{\sigma}^2 = \frac{n-1}{(m-k)n}\sum_{i=k+1}^{m}\widehat{\lambda}_i,$$

которая непосредственно следует из формулы (10). К вопросу об использовании априорной оценки мы вернемся далее (см. раздел «Восстановление пропущенных данных»).

Проблема относительно малой выборки

Во многих задачах нередко возникает ситуация, когда объем выборки n меньше размерности вектора m $(n < m)$. В этом случае

$$\widehat{\lambda}_{n+1} = \widehat{\lambda}_{n+2} = \ldots = \widehat{\lambda}_m = 0,$$

что никак не соответствует равенству (9), а, следовательно, и (10). Это обстоятельство, однако, не исключает возможности проверки гипотезы

$$\begin{aligned} \mathrm{H}_1\colon \lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \ldots \ge \lambda_k \ge \lambda_{k+1} = \\ = \lambda_{k+2} = \ldots = \lambda_n \end{aligned} \tag{12}$$

для дальнейшего рассмотрения модели (6).

Если считать вектор $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_y$ и матрицу $\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}$ известными, то для какой-либо из последующих реализаций вектора $\mathbf{y}$, например $(n + l)$-й $(l \ge 1)$, несмещенная апостериорная оценка σ^2 в регрессионной модели (6) следует выражению

$$\widehat{\sigma}^2 = \frac{1}{m-k}\sum_{i=1}^{m}(y_{i,n+l} - \overline{y}_i - [\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}]_i\widehat{\mathbf{z}}_{n+l})^2, \tag{13}$$

где $\overline{y}_i$ – i-я компонента априорной оценки вектора $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_y$ $(i = 1, 2, \ldots, m)$, а число оцениваемых параметров равно k.

Если же считать известной лишь матрицу $\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}$, то эта оценка будет следующей:

$$\begin{aligned} \widehat{\sigma}^2 = \frac{1}{m-k-1}\sum_{i=1}^{m}(y_{i,n+l} - \overline{y}_{n+l} - \\ - [\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}]_i\widehat{\mathbf{z}}_{n+l})^2, \end{aligned} \tag{14}$$

где $\overline{y}_{n+l} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_{i,n+l}$; $y_{i,n+l}$ – i-я компонента вектора $\mathbf{y}_{n+l}$.

В обоих случаях, отвечающих формулам (13) и (14), в этих формулах, как и выше, $[\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}]_i$ – i-я строка матрицы $\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}$, а

$$\widehat{\mathbf{z}}_{n+l} = \widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T(\mathbf{y}_{n+l} - \widehat{\boldsymbol{\theta}}_y).$$

Однако в выражении (13) вектор $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_y$ вычислен по формуле (1) с использованием всех реализаций исходной выборки, а в (14) мы заменяем все компоненты $\widehat{\boldsymbol{\theta}}_y$

средним значением по компонентам новой реализации $\mathbf{y}_{n+l}$ ($\theta_1 = \theta_2 = ... = \theta_m = \bar{y}_{n+l}$, см выше). Однако вектор $\hat{\boldsymbol{\theta}}_y$ используется при вычислении $\hat{\mathbf{V}}_y$ и $\hat{\mathbf{P}}$, что необходимо учесть в априорной оценке σ^2. В связи с этим рассмотрим иной метод вычисления элементов модели (6).

Определим иначе матрицу $\mathbf{Y}$. Пусть

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{y}_1 - \hat{\boldsymbol{\theta}}_1, \mathbf{y}_2 - \hat{\boldsymbol{\theta}}_2, \dots, \mathbf{y}_n - \hat{\boldsymbol{\theta}}_n),$$

где компоненты каждого вектора $\hat{\boldsymbol{\theta}}_j$ равны между собой и равны среднему по компонентам реализации $\mathbf{y}_j$ т. е.

$$\theta_{1j} = \theta_{2j} = \dots = \theta_{mj} = \bar{y}_j = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} y_{i,j}$$
$$(j = 1, 2, \dots, n).$$

Вычислим оценку $\mathbf{V}_y$ по формуле

$$\hat{\mathbf{V}}_y = (n-1)^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T. \tag{15}$$

Далее произведем все перечисленные выше действия: вычислим $\hat{\mathbf{P}}$ и $\{\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \dots, \hat{\lambda}_n\}$; проверим гипотезу H_1 (см. (12), $n < m$) и определим матрицу $\hat{\mathbf{P}}_{(k)}$. При этом могут несколько измениться не только $\hat{\mathbf{V}}_y$ и $\hat{\mathbf{P}}$, но и значение k.

Теорема 2. *В условиях модели (6), где элементы модели вычислены по схеме (15), при верной (принятой) гипотезе* H_1 *(см. (12)) и предположении (5), априорная оценка* σ^2, *равная*

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{n-1}{(m-k-1)n}\sum_{i=k+1}^{n}\hat{\lambda}_i, \tag{16}$$

является несмещенной.

Доказательство. В силу линейности оператора математического ожидания, среднее значение несмещенной оценки (14), вычисленное по исходной выборке $(j = 1, 2, \dots, n)$ и есть несмещенная априорная оценка, равная

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\frac{1}{m-k-1}(\mathbf{y}_j - \hat{\boldsymbol{\theta}}_j)^T \times$$
$$\times (\mathbf{I} - \hat{\mathbf{P}}_{(k)}\hat{\mathbf{P}}_{(k)}^T)(\mathbf{y}_j - \hat{\boldsymbol{\theta}}_j) =$$
$$= \frac{1}{(m-k-1)n}\text{tr}(\mathbf{Y}^T(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{P}}_{(k)}\hat{\mathbf{P}}_{(k)}^T)\mathbf{Y}) =$$
$$= \frac{1}{(m-k-1)n}(\text{tr}\mathbf{Y}^T\mathbf{Y} - \text{tr}\mathbf{Z}^T\mathbf{Z}) =$$
$$= \frac{n-1}{(m-k-1)n}\sum_{i=k+1}^{n}\hat{\lambda}_i$$

(здесь, как и прежде, $\mathbf{Z} = \hat{\mathbf{P}}_{(k)}^T\mathbf{Y}$).

Теорема 2 доказана.

Заметим, что оценка (16) не требует совпадения математических ожиданий оценок средних ($\hat{\boldsymbol{\theta}}_j$), а требует лишь совпадения математических ожиданий оценок (14). Это означает, что выражение (16) подходит для случая временных рядов, содержащих тренды. В свою очередь, это может быть иным основанием (не только относительная малость объема выборки) к применению формул (15) и (16). Сравнивая (7) и (16), замечаем также, что в случае малой выборки ($n < m$) некорректное использование (7) будет давать завышенное значение оценки σ^2. Смещенным вариантом оценки (16) будет оценка

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{n-1}{mn}\sum_{i=k+1}^{n}\hat{\lambda}_i.$$

Если принять во внимание тот факт, что индекс j в математическом моделировании нередко соответствует некоторому временному отсчету, то при достаточной стационарности и несущественном различии средних значений компонент вектора $\mathbf{y}$, вычисленных первым способом (см. оценки (1)), можно применять оценку (16), не прибегая к описанной выше коррекции модели (6). Возникающие при этом ошибки и неточности будут несущественны. И, наоборот, в нестационарном случае следует использовать выше изложенный метод оценивания $\hat{\mathbf{V}}_y$. При этом подразумевается пересчет $\hat{\boldsymbol{\theta}}_y$ (см. выше) по реализации $\mathbf{y}$, непосредственно фигурирующей в модели (6).

Рассмотренный в этом разделе метод оценивания элементов модели (6) наиболее эффективен, когда метод гусеницы применяется к прогнозу нестационарных временных рядов с явно выраженным трендом (см. раздел «Прогноз нестационарных временных рядов»).

Важное замечание. Прежде чем перейти к рассмотрению следующих вопросов, необходимо отметить один очень важный для общего понимания момент. В случае невырожденного распределения и большого объема выборки мы можем смотреть на главные компоненты как на регрессоры, а на элементы матрицы $\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}$, представляющей собой базис главных компонент, как на оцениваемые параметры, что мы видим в доказательстве теоремы 1. Случай же малой выборки (преобладание размерности над объемом), наоборот, приводит нас к необходимости рассматривать элементы матрицы $\widehat{\mathbf{P}}_{(k)}$ как регрессоры, а главные компоненты – как оцениваемые параметры (теорема 2). При этом следует осуществлять центрирование вычитанием не среднего значения по реализациям для каждой компоненты, а вычитанием среднего по компонентам для каждой реализации (см. выше). Суть проблемы состоит в том, что при малой выборке равенство (9) не имеет выборочного аналога, так как выборочный спектр не полон и логика теоремы 1 рушится. Поэтому приходится менять точку зрения (обзора ситуации).

И, наконец, отметим, что случай принципиально вырожденного распределения, когда выборочный спектр неполон и большой объем выборки, приводит нас к вычислительной схеме данного раздела и оценке (16).

Оценки минимального риска

При выборе модели (6) для использования в каких-либо прикладных задачах обычно применяется формула:

$$\widehat{\mathbf{y}} = \widehat{\boldsymbol{\theta}}_y + \widehat{\mathbf{P}}_{(k)}\widehat{\mathbf{z}},$$

где $\widehat{\mathbf{z}} = \widehat{\mathbf{P}}_{(k)}^T(\mathbf{y} - \widehat{\boldsymbol{\theta}}_y)$.

В справочном издании [21] предлагается применять формулу

$$\tilde{\mathbf{y}} = \widehat{\boldsymbol{\theta}}_y + \widehat{\mathbf{P}}_{(k)}\mathbf{G}\widehat{\mathbf{z}}, \qquad (17)$$

где $\mathbf{G} = \mathrm{diag}(g_1, g_2, \ldots, g_k)$.

При этом значения g_i определяются из условия минимума квадратичного риска

$$R^2 = \mathrm{E}(z_i - g_i\widehat{z}_i)^2 \quad (i = 1, 2, \ldots, k).$$

В этой ситуации компоненты вектора $\mathbf{G}\widehat{\mathbf{z}}$ называются оценками минимального риска. С учетом того, что

$$z_i - g_i\widehat{z}_i = z_i(1 - g_i) - g_i(\widehat{z}_i - z_i),$$

имеем равенство

$$R^2 = z_i^2(g_i - 1)^2 + g_i^2\sigma_{\widehat{z}i}^2, \qquad (18)$$

где $\mathrm{E}(\widehat{z}_i - z_i)^2 = \sigma_{\widehat{z}i}^2$.

Приравнивая к нулю производную R^2 по g_i, получаем равенство

$$g_i(z_i^2 + \sigma_{\widehat{z}i}^2) = z_i^2, \qquad (19)$$

или $g_i = \dfrac{1}{1 + \sigma_{\widehat{z}i}^2 / z_i^2}$.

Подставляя вместо z_i оценку минимального риска $g_i\widehat{z}_i$, получаем простое квадратное уравнение вида

$$g_i^2 - g_i + \delta_i^2 = 0, \quad \delta_i^2 = \sigma_{\widehat{z}i}^2 / \widehat{z}_i^2$$

со следующей окончательной формулой для g_i:

$$g_i = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \delta_i^2}.$$

В справочном издании [21] авторами предлагается следующий алгоритм вычисления величины g_i:

$$\begin{cases} g_i = \dfrac{1}{2} + \sqrt{\dfrac{1}{4} - \delta_i^2}, \text{если } \delta_i^2 \le \dfrac{1}{4}; \\[2ex] g_i = 0, \text{если } \delta_i^2 > \dfrac{1}{4}. \end{cases} \qquad (20)$$

Автором настоящей статьи в работе [22] предложен альтернативный алгоритм:

$$\begin{cases} g_i = \dfrac{1}{2} + \sqrt{\dfrac{1}{4} - \delta_i^2}, \text{если } \delta_i^2 \le \dfrac{1}{4}; \\[2ex] g_i = \dfrac{1}{2}, \text{ если } \dfrac{1}{4} < \delta_i^2 \le 1; \\[2ex] g_i = \dfrac{1}{1 + \delta_i^2}, \text{если } \delta_i^2 > 1. \end{cases} \qquad (21)$$

Теорема 3. *В предположении, что различие между величинами $\sigma_{\widehat{z}i}^2 / \widehat{z}_i^2$ и $\sigma_{\widehat{z}i}^2 / z_i^2$ пренебрежимо мало, предлагаемый алгоритм (21) обеспечивает меньшее значение квадратичного риска R^2, по сравнению с алгоритмом (20), для случая $\delta_i^2 > \dfrac{1}{4}$.*

Доказательство. При условии $\delta_i^2 > \dfrac{1}{4}$ алгоритм (20) дает величину $R^2 = z_i^2$. Если $\dfrac{1}{4} < \delta_i^2 \le 1$, подставляем в (18) значение $g_i = \dfrac{1}{2}$. Учитывая, что $\sigma_{\widehat{z}i}^2 < z_i^2$, получаем, что

$$R^2 = \frac{1}{4}(z_i^2 + \sigma_{\tilde{z}i}^2) < \frac{z_i^2}{2} < z_i^2.$$

Если же $\delta_i^2 > 1$, то, согласно алгоритму (21), значение g_i таково, что выполняется равенство (19). Подставляя (19) в (18), получаем, что

$$R^2 = g_i^2(z_i^2 + \sigma_{\tilde{z}i}^2) - 2g_i z_i^2 + z_i^2 =$$
$$= g_i z_i^2 - 2g_i z_i^2 + z_i^2 = z_i^2(1 - g_i) < z_i^2.$$

Теорема 3 доказана.

Полученный в данном разделе результат можно отнести к уточнению деталей. При исследовании различных многомерных процессов и явлений, в особенности природных, не всегда использование PCs подчинено задаче снижения размерности, а может быть направлено на исследование внутренней структуры явления, что показано в следующем разделе данной работы.

Структурное подобие и однородность

Предположим, что кроме вектора **y** исследуется и вектор **x** такой же размерности:

$$\dim \mathbf{x} = \dim \mathbf{y} = m.$$

Предположим, что имеется выборка реализаций этого вектора. Объемы выборок реализаций векторов **x** и **y** могут быть различны. Используя формулы (1) для вектора **x**, вычислим оценки параметров распределения $\hat{\boldsymbol{\theta}}_x$ и $\hat{\mathbf{V}}_x$. Пусть ортогональная матрица $\hat{\mathbf{Q}}$ такова, что выполняется равенство

$$\hat{\mathbf{Q}}^T \hat{\mathbf{V}}_x \hat{\mathbf{Q}} = \mathrm{diag}(\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2, \ldots, \hat{\mu}_m), \qquad (22)$$

$$\hat{\mu}_1 \geq \hat{\mu}_2 \geq \ldots \geq \hat{\mu}_m. \qquad (23)$$

В этой ситуации мы имеем два множества статистических характеристик PCs обоих векторов:

$$\{\hat{\lambda}_i, \hat{\mathbf{p}}_i\}_{i=1}^m \text{ и } \{\hat{\mu}_i, \hat{\mathbf{q}}_i\}_{i=1}^m,$$

причем $\hat{\mathbf{q}}_i$, $\hat{\mathbf{p}}_i$ есть i-е столбцы матриц $\hat{\mathbf{Q}}$ и $\hat{\mathbf{P}}$, соответственно, т. е.

$$\hat{\mathbf{Q}} = (\hat{\mathbf{q}}_1, \hat{\mathbf{q}}_2, \ldots, \hat{\mathbf{q}}_m),$$

$$\hat{\mathbf{P}} = (\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \ldots, \hat{\mathbf{p}}_m).$$

Оценкой коэффициента структурного подобия векторов **x** и **y** назовем величину

$$\hat{s}_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^m \sqrt{\hat{\mu}_i \hat{\lambda}_i}\, \left|\hat{\mathbf{q}}_i^T \hat{\mathbf{p}}_i\right|}{\sqrt{\mathrm{tr}\hat{\mathbf{V}}_x \mathrm{tr}\hat{\mathbf{V}}_y}}. \qquad (24)$$

Этот коэффициент показывает, насколько структуры колебаний исследуемых векторов согласуются в относительных долях дисперсии. В некоторых случаях $\hat{s}_{xy}$ целесообразно вычислять по формуле

$$\hat{s}_{xy} = \max_{\varphi(i)} \frac{\sum_{i=1}^m \sqrt{\hat{\mu}_{\varphi(i)} \hat{\lambda}_i}\, \left|\hat{\mathbf{q}}_{\varphi(i)}^T \hat{\mathbf{p}}_i\right|}{\sqrt{\mathrm{tr}\hat{\mathbf{V}}_x \mathrm{tr}\hat{\mathbf{V}}_y}}, \qquad (25)$$

где $\varphi(i)$ есть перестановка индексов, т. е. варьируется порядок статистических характеристик PCs одного из векторов (здесь это **x**).

Необходимость применения формулы (25) может возникнуть в случае обнаружения близких собственных значений хотя бы в спектре одного из векторов. Если верна (тестирована) гипотеза

$$\mathrm{H}_x\colon \mu_1 \geq \mu_2 \geq \ldots \geq \mu_l \geq \mu_{l+1} = \mu_{l+2} = \ldots = \mu_m,$$

то можно рассматривать отфильтрованный коэффициент структурного подобия в виде

$$\hat{s}_{xy}^f = \frac{\sum_{i=1}^p \sqrt{\hat{\mu}_i \hat{\lambda}_i}\, \left|\hat{\mathbf{q}}_i^T \hat{\mathbf{p}}_i\right|}{\sqrt{\sum_{i=1}^p \hat{\mu}_i \sum_{i=1}^p \hat{\lambda}_i}},$$

где $p = \min(k, l)$,

или относительный коэффициент структурного подобия вида

$$\hat{s}_{xy}^r = \frac{\sum_{i=1}^p \sqrt{\hat{\mu}_i \hat{\lambda}_i}\, \left|\hat{\mathbf{q}}_i^T \hat{\mathbf{p}}_i\right|}{\sqrt{\mathrm{tr}\hat{\mathbf{V}}_x \mathrm{tr}\hat{\mathbf{V}}_y}}.$$

Оценки коэффициентов $\hat{s}_{xy}^f$ и $\hat{s}_{xy}^r$ в случаях, когда соседние собственные значения мало различимы, целесообразно находить по формулам, аналогичным формуле (25).

В различных исследованиях коэффициент структурного подобия может использоваться для сравнения метеорологических, климатических и океанографических полей, а также для анализа полей экологического и медицинского мониторинга областей и районов. В микроэлектронном производстве, когда в каждой ячейке кристаллической пластины производится несколько типов микроэлектронных приборов (см., например, работу [23]), коэффициент структурного подобия удобен для оценки, насколько погрешности изготовления различных приборов связаны между собой и зависит ли эта погрешность от положения ячейки на кристаллической пластине. Такие вопросы могут возникать и в процессе настройки оборудования. В анализе временных рядов базой для применения коэффициента структурного подобия является упомянутый во введении анализ сингулярного спектра (SSA). Первые попытки построения коэффициента структурного подобия были предприняты автором данной работы именно при анализе временных рядов [24].

Если в качестве выборки вектора $\mathbf{x}$ используется выборка значений того же вектора $\mathbf{y}$, а второй набор характеристик PCs $\{\hat{\mu}_i, \hat{\mathbf{q}}_i\}_{i=1}^m$ вычисляется по оценке корреляционной матрицы $\hat{\mathbf{R}}_y$, т. е.

$$\hat{\mathbf{Q}}^T \hat{\mathbf{R}}_y \hat{\mathbf{Q}} = \mathrm{diag}(\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2, \ldots, \hat{\mu}_m),$$

то тогда коэффициент структурного подобия, во всех его вариантах, становится коэффициентом однородности вектора $\mathbf{y}$. В анализе временных рядов его применение возможно только в сочетании с методом гусеницы (см. выше), где нормирование может оказать влияние на формы собственных векторов, так как формы собственных векторов автоковариационной и автокорреляционной матриц, в принципе, различны.

Возникает естественный вопрос о возможности проверки гипотезы о равенстве коэффициента структурного подобия нулю, т. е. $\mathrm{H}_s\colon s_{xy} = 0$. Прежде всего, отметим, что на практике мы всегда имеем лишь оценку $\hat{s}_{xy}$, а истинное значение s_{xy} мы имели бы лишь в случае использования в наших вычислениях матриц $\mathbf{V}_y$, $\mathbf{V}_x$, $\mathbf{P}$ и $\mathbf{Q}$, что возможно лишь гипотетически.

Рассмотрим два составных вектора:

$$\mathbf{Y}_s = (\sqrt{\hat{\lambda}_1}\hat{\mathbf{p}}_1^T, \sqrt{\hat{\lambda}_2}\hat{\mathbf{p}}_2^T, \ldots, \sqrt{\hat{\lambda}_m}\hat{\mathbf{p}}_m^T)^T = \\ = (Y_1, Y_2, \ldots, Y_M)^T;$$

$$\mathbf{X}_s = (\sqrt{\hat{\mu}_1}\hat{\mathbf{q}}_1^T, \sqrt{\hat{\mu}_2}\hat{\mathbf{q}}_2^T, \ldots, \sqrt{\hat{\mu}_m}\hat{\mathbf{q}}_m^T)^T = \\ = (X_1, X_2, \ldots, X_M)^T,$$

где $M = m \times m$.

Нумерацию подвекторов (субвекторов)

$$\sqrt{\hat{\mu}_i}\hat{\mathbf{q}}_i \ (i = 1, 2, \ldots, m)$$

составного вектора $\mathbf{X}_s$, при необходимости, можно установить в соответствии с формулой (25). Это может нарушить лишь условие (23), что не имеет для нас значения. Знаки некоторых столбцов матрицы

$$\hat{\mathbf{Q}} = (\hat{\mathbf{q}}_1, \hat{\mathbf{q}}_2, \ldots, \hat{\mathbf{q}}_m)$$

нужно поменять на противоположные так, чтобы все произведения $\hat{\mathbf{q}}_i^T \hat{\mathbf{p}}_i$ или $\hat{\mathbf{q}}_{\varphi(i)}^T \hat{\mathbf{p}}_i$ были положительными. Эта смена знаков не нарушит равенства (22). Тогда, если все эти условия выполнены, из ортогональности матриц $\hat{\mathbf{P}}$ и $\hat{\mathbf{Q}}$ следует, что

$$\hat{s}_{xy} = \frac{\mathbf{X}_s^T \mathbf{Y}_s}{\sqrt{\mathbf{X}_s^T \mathbf{X}_s \mathbf{Y}_s^T \mathbf{Y}_s}} = \frac{\sum_{i=1}^{M} X_i Y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^{M} X_i^2 \sum_{i=1}^{M} Y_i^2}}. \quad (26)$$

Рассмотрим два регрессионных уравнения, связывающие компоненты составных векторов $\mathbf{Y}_s$ и $\mathbf{X}_s$:

$$Y_i = \beta X_i + \varepsilon_i; \\ Y_i = b_0 + b_1 X_i + e_i \ (i = 1, 2, \ldots, M), \quad (27)$$

где предполагается, что остатки (погрешности) кождой из регрессий подчиняются нормальному закону распределения, взаимно независимы и имеют одинаковую дисперсию.

Теорема 4. *Если принята (не отвергнута) гипотеза* $\mathrm{H}_\varepsilon\colon \mathrm{E}(\varepsilon) = 0$ *(или эквивалентная гипотеза* $\mathrm{H}_0\colon b_0 = 0$*), то, при верной гипотезе* $\mathrm{H}_s\colon s_{xy} = 0$, *величина*

$$\frac{\hat{s}_{xy}\sqrt{M-1}}{\sqrt{1-\hat{s}_{xy}^2}} \sim t_{M-1}, \quad (28)$$

т. е. подчиняется распределению Стьюдента с числом степеней свободы $M - 1$.

Способы проверки гипотез $\mathrm{H}_0\colon b_0 = 0$ и $\mathrm{H}_\varepsilon\colon \mathrm{E}(\varepsilon) = 0$ хорошо известны. Поэтому рассмотрим простое доказательство, которое мало чем отличается от хорошо известного для обычного коэффициента корреляции.

Доказательство. Из общей теории метода наименьших квадратов, предположения $E(\varepsilon) = 0$ (см. гипотезу H_ε) и формулы (26) следует, что OLS-оценка параметра регрессии (27) имеет вид

$$\hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^{M} X_i Y_i}{\sum_{i=1}^{M} X_i^2} = \hat{s}_{xy} \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{M} Y_i^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{M} X_i^2}}, \tag{29}$$

$$\operatorname{var}(\hat{\beta}) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^{M} X_i^2},$$

где $\sigma^2 = \operatorname{var}(\varepsilon_i)$, а

$$\sum_{i=1}^{M} X_i \varepsilon_i = 0. \tag{30}$$

Из равенства (30) следует, что несмещенная оценка σ^2 выражается как

$$\begin{gathered}\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{M-1} \sum_{i=1}^{M} (Y_i - \hat{\beta} X_i)^2 = \\ = \frac{1}{M-1} \left(\sum_{i=1}^{M} Y_i^2 - \hat{\beta}^2 \sum_{i=1}^{M} X_i^2 \right).\end{gathered} \tag{31}$$

Очевидно, что равенство $s_{xy} = 0$ эквивалентно $\beta = 0$ (см. (29)). Следовательно, принимая во внимание выражение (31), имеем:

$$t_{M-1} \sim \frac{\hat{\beta} \sqrt{\sum_{i=1}^{M} X_i^2}}{\hat{\sigma}} = \frac{\hat{s}_{xy} \sqrt{\sum_{i=1}^{M} Y_i^2} \sqrt{M-1}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{M} Y_i^2 - \hat{\beta}^2 \sum_{i=1}^{M} X_i^2}} = \\ = \frac{\hat{s}_{xy} \sqrt{M-1}}{\sqrt{1 - \hat{s}_{xy}^2}}.$$

Теорема 4 доказана.

Как было отмечено выше, смена всех знаков матрицы $\hat{\mathbf{Q}}$ не нарушает формулы (22), но меняет знак $\hat{s}_{xy}$ и знак (28) на противоположный. Это вполне соответствует симметрии распределения Стьюдента. Нетрудно заметить, что гипотеза H_s может быть проверена и для отфильтрованного коэффициента структурного подобия s_{xy}^f. Различие сводится лишь к тому, что в этом случае $M = m \times p$, а из $s_{xy}^f = 0$ следует и $s_{xy}^r = 0$. Невозможность проверить гипотезу H_s (гипотеза H_ε отвергнута) не является принципиальным препятствием для вычисления $\hat{s}_{xy}$. В большинстве приложений мы скорее заинтересованы в том, чтобы отвергнуть гипотезу H_s, т. е. установить структурное подобие. Исключение составляет случай, когда мы собираемся установить неоднородность некоторого поля или временного ряда вышеуказанным способом.

Перейдем к рассмотрению задач практического характера, где непосредственно используются результаты разделов «Априорная оценка дисперсии погрешности регрессии на PCs», «Проблема относительно малой выборки» и «Оценки минимального риска».

Восстановление пропущенных данных

Рассмотрим ситуацию, когда распределение невырожденное и объем выборки достаточно превышает размерность. Для уменьшения количества индексов и прочих знаков перепишем уравнение (6) в виде

$$\mathbf{y} = \bar{\mathbf{y}} + \mathbf{F}\mathbf{z} + \boldsymbol{\varepsilon}, \tag{32}$$

где $\bar{\mathbf{y}} = \hat{\boldsymbol{\theta}}_y$, $\mathbf{F} = \hat{\mathbf{P}}_{(k)}$.

Пусть $\mathbf{y}_{n+l}$ $(l \geq 1)$ – какая-либо очередная реализация вектора $\mathbf{y}$, которая имеет u измерений и v пропусков $(m = u + v)$.

Тогда, при соответствующей нумерации, имеем следующие разбиения на блоки:

$$\mathbf{y}_{n+l} = (\mathbf{y}_1^T, \mathbf{y}_2^T)^T, \ \bar{\mathbf{y}} = (\bar{\mathbf{y}}_1^T, \bar{\mathbf{y}}_2^T)^T,$$

$$\mathbf{F} = (\mathbf{F}_1^T, \mathbf{F}_2^T)^T,$$

где блоки $\mathbf{y}_1$, $\bar{\mathbf{y}}_1$ и $\mathbf{F}_1$ соответствуют измеренным компонентам $\mathbf{y}_{n+l}$, а блоки $\mathbf{y}_2$, $\bar{\mathbf{y}}_2$ и $\mathbf{F}_2$ – пропущенным данным.

Вычислим оценку $\mathbf{y}_2$ по формуле

$$\hat{\mathbf{y}}_2 = \bar{\mathbf{y}}_2 + \mathbf{F}_2 \mathbf{G} (\mathbf{F}_1^T \mathbf{F}_1)^{-1} \mathbf{F}_1^T (\mathbf{y}_1 - \bar{\mathbf{y}}_1), \tag{33}$$

где матрица $\mathbf{G}$ (см. формулу (17)) имеет размерность $k \times k$, а ее компоненты вычисляются по алгоритму (21).

При этом в алгоритме (21)

$$\sigma_{\hat{z}i}^2 = \hat{\sigma}^2 [(\mathbf{F}_1^T \mathbf{F}_1)^{-1}]_{i,i},$$

где $[...]_{i,j}$ – оператор взятия элемента матрицы с указанными номерами строки (i) и столбца (j); $\hat{z}_i$ – i-я компонента вектора $\hat{\mathbf{z}}$

OLS-оценок:

$$\hat{\mathbf{z}} = (\mathbf{F}_1^T\mathbf{F}_1)^{-1}\mathbf{F}_1^T(\mathbf{y}_1 - \bar{\mathbf{y}}_1) \quad (i = 1, 2, \dots, k).$$

Из-за отсутствующих строк столбцы матрицы $\mathbf{F}_1$ не ортогональны, матрица $\mathbf{F}_1^T\mathbf{F}_1$ не диагональна, а компоненты вектора $\hat{\mathbf{z}}$ зависимы между собой:

$$\mathbf{V}_{\hat{z}} = \sigma^2(\mathbf{F}_1^T\mathbf{F}_1)^{-1}.$$

Апостериорная оценка σ^2 в этом случае имеет вид (см. выражение (13)):

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{u-k}(\mathbf{y}_1 - \bar{\mathbf{y}}_1)^T \times$$
$$\times (\mathbf{I} - \mathbf{F}_1(\mathbf{F}_1^T\mathbf{F}_1)^{-1}\ \mathbf{F}_1^T)(\mathbf{y}_1 - \bar{\mathbf{y}}_1).$$

Однако именно в этой ситуации естественно воспользоваться более надежной априорной оценкой (7) как вычисленной по выборке существенно большего объема. Эта оценка используется во всех следующих формулах данного раздела.

Здесь следует отметить, что $\hat{\mathbf{y}}_2$ есть, в сущности, центр условного распределения $\mathbf{y}_2$. Действительно, безусловное или априорное распределение $\mathbf{y}_2$ в некотором приближении (при достаточно большом n) есть $N(\bar{\mathbf{y}}_2, \hat{\mathbf{V}}_2)$, где $\hat{\mathbf{V}}_2$ получается из $\hat{\mathbf{V}}_y$ удалением строк и столбцов, которые не имеют отношения к $\mathbf{y}_2$. Условное или апостериорное распределение $\mathbf{y}_2$, также лишь в некотором приближении, есть $N(\hat{\mathbf{y}}_2, \hat{\sigma}^2\mathbf{I})$, что непосредственно следует из соотношения (5) и уравнений (32) и (33).

Для пропущенных в количестве v компонент вектора $\mathbf{y}$ можно указать относительно точное распределение Стьюдента:

$$\frac{y_i - \hat{y}_i}{\hat{\sigma}\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \mathbf{f}_i\mathbf{G}(\mathbf{F}_1^T\mathbf{F}_1)^{-1}\mathbf{G}\mathbf{f}_i^T}} \sim t_\eta, \qquad (34)$$

где число степеней свободы $\eta = n - k - 1$, если используется оценка (7) и $\eta = m - k - 1$, если по какой-либо причине используется оценка (16); $\mathbf{f}_i$ — i-я строка $\mathbf{F}$ $(i = u+1, u+2, \dots, m;$ т. е. строка $\mathbf{f}_i$ относится к блоку $\mathbf{F}_2)$.

По формуле (34) и выбранному уровню доверия $1-\alpha$ (α — уровень значимости) для этих значений получаем границы $(1-\alpha)\%$-х стьюдентовских доверительных интервалов:

$$\hat{y}_i \pm t_\eta^{\alpha/2}\hat{\sigma}\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \mathbf{f}_i\mathbf{G}(\mathbf{F}_1^T\mathbf{F}_1)^{-1}\mathbf{G}\mathbf{f}_i^T}, \qquad (35)$$

где $t_\eta^{\alpha/2}$ — квантиль распределения Стьюдента с учетом двустороннего характера критерия (берется $\alpha/2$ в силу симметрии распределения Стьюдента), $(i = u+1, u+2, \dots, m)$.

Целесообразность применения модели (32) и формулы (33) тем выше, чем существеннее неравенство

$$t_\eta\hat{\sigma}\sqrt{1 + \frac{1}{n} + \mathbf{f}_i\mathbf{G}(\mathbf{F}_1^T\mathbf{F}_1)^{-1}\mathbf{G}\mathbf{f}_i^T} <$$
$$< t_{n-1}\sqrt{\left(1 + \frac{1}{n}\right)[\hat{\mathbf{V}}_y]_{i,i}}, \qquad (36)$$

т. е. чем меньше ширина доверительного интервала, построенного по формуле (35), по сравнению с соответствующей шириной, где доверительный интервал построен по выборочным оценкам параметров распределения $(\hat{\mathbf{V}}_y)$, т. е. меньше неопределенность относительно восстанавливаемых данных.

Прогноз нестационарных временных рядов

Модель (32) и формула (33) могут использоваться для прогноза нестационарных временных рядов [25, 26]. Здесь модель (32) строится методом гусеницы, когда $\mathbf{y}$ есть скользящий отрезок (гусеница) временного ряда $\{y_i\}_{i=1}^N$, а $\dim\mathbf{y} = m$ есть длина гусеницы.

При вычислении оценки ковариационной матрицы выборка строится пошаговым сдвигом, т. е.

$$\mathbf{y}_1 = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T,$$
$$\mathbf{y}_2 = (y_2, y_3, \dots, y_{m+1})^T,$$
$$\dots\dots\dots\dots\dots ,$$
$$\mathbf{y}_n = (y_{N-m+1}, y_{N-m+2}, \dots, y_N)^T,$$

где $n = N - m + 1$, N — общая длина временного ряда.

Оценку ковариационной матрицы следует вычислять по алгоритму вычисления оценки (15). При определении длины гусеницы окончательное значение (здесь предварительные расчеты будут весьма полезны) m следует брать не меньше, чем период волны, несущей наибольшую долю дисперсии, т. е. соответствующей $\hat{\lambda}_1$. Стремление удовлетворить указанному требованию может приводить к ситуации малого объема выборки ($n < m$). В разделе «Проблема относительно малой выборки» было отмечено, что применение оценок (15) и (16) может быть обусловлено двумя причинами: малый объем выборки или нестационарность.

Авторы метода гусеницы [9] придерживаются классической схемы вычислений оценки ковариационной матрицы (см. разделы «Краткое описание математического аппарата PCA» и «Проблема относительно малой выборки») и ошибочно определяют число степеней свободы по минимальному размеру выборочной матрицы исходных данных (выбор $\eta = n - k - 1$ или $\eta = m - k - 1$ (см. выше) определяется через $\min(m, n)$). В методе гусеницы строки и столбцы матрицы исходных данных имеют одну и ту же природу, в связи с чем двойственность, которая изложена в конце раздела «Проблема относительно малой выборки», становится очевиднее. Однако в работе [9] метод гусеницы использовался преимущественно для фильтрации временных рядов, и данный вопрос о числе степеней свободы не стоял столь принципиально, как в случае прогноза по рассматриваемой здесь схеме.

При прогнозировании (в формуле (33)) $\mathbf{y}_1$ есть вектор последних u значений временного ряда:

$$\mathbf{y}_1 = (y_{N-u+1}, y_{N-u+2}, \ldots, y_N)^T,$$

($u < m$, , так как $m = u + v$, см. «Восстановление пропущенных данных»), а $\mathbf{y}_2$ – вектор прогнозируемых значений:

$$\mathbf{y}_2 = (y_{N+1}, y_{N+2}, \ldots, y_{N+v})^T.$$

Из вышеизложенного (см. раздел «Проблема относительно малой выборки») следует, что в качестве априорной оценки σ^2 необходимо использовать оценку (16). Подлинный смысл прогнозирования заключается не столько в вычислении значений $\hat{\mathbf{y}}_2$, сколько в построении достаточно узкой доверительной полосы (см. выше) для компонент $\mathbf{y}_2$. При этом в формулах (35) и (36) $\eta = m - k - 1$, а вместо $1/n$ будет стоять значение $1/m$, если равные между собой компоненты (см. раздел «Проблема относительно малой выборки») вектора $\bar{\mathbf{y}}$ вычислять как среднее по последним m значениям временного ряда, или $1/u$, если вычислять среднее по последним u значениям (по компонентам), что вполне допустимо. В любом случае окончательный выбор параметров схемы прогноза определяется неравенством (36).

Заключение

В результате проведенного анализа существующих методов решения задач на основе главных компонет и предлагаемой модификации методов, можно сформулировать следующие основные итоги.

1. Получены оценки дисперсии погрешности регрессии на главные компоненты для случаев большой и малой (относительно размерности задачи) выборки и доказана несмещенность этих оценок. Полученные оценки являются важной деталью в схемах восстановления пропущенных данных и прогноза нестационарных рядов, предложенных автором настоящей работы. При этом несмещенность оценок служит непременным условием в построении доверительных интервалов для восстановленных или прогнозируемых значений (см. далее).

2. Теоретически обоснованно уточнены ранее известные оценки минимального риска, которые также использованы в перечисленных выше практических задачах.

3. Введен в рассмотрение коэффициент структурного подобия и теоретически обоснована статистика для проверки гипотезы о равенстве этого коэффициента нулю.

4. Предложены схемы восстановления пропущенных данных и прогноза нестационарных рядов. Указаны критерии применимости и доверительные интервалы для восстанавливаемых или прогнозируемых значений.

В заключение отметим, что в построении статистических моделей нам приходится выбирать, какие элементы модели наделить свойством статистической устойчивости и включить в модель, а какие нет. От адекватности этого выбора во многом зависит успех применения построенных моделей на практике, возможно даже в большей степени, чем от точности применяемых формул. В настоящей работе предполагается, что базис главных компонент как раз и является наиболее статистически устойчивой частью модели.

Автор настоящей работы надеется, что полученные здесь оценки и представленные решения задач найдут практическое применение в исследованиях широкого спектра предметных областей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Pearson K.** On lines and planes of closest fit to systems of points in space // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. 1901. Ser. 6. Vol. 2. No. 11. Pp. 559–572.

2. **Karhunen K.** Über lineare Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung //Ann. Acad. Sci. Fennicae. Ser. A. I. Math.-Phys. 1947. Vol. 1947. No. 37. Pp. 1–79.

3. **Лоев М.** Теория вероятностей. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1962. 719 с.

4. **Broomhead D.S., King G.P.** Extracting qualitative dynamics from experimental data // Physica. D: Nonlinear Phenomena. 1986. Vol. 20. No. 2–3. Pp. 217–236.

5. **Broomhead D.S., King G.P.** On the qualitative analysis of experimental dynamical systems // Nonlinear Phenomena and Chaos (Malvern physics series). 1st edition. Sarkar S. (Ed.). Bristol: CRC Press, 1986. Pp. 113–144.

6. **Ghil M., Vautard R.** Interdecadal oscillations and the warming trend in global temperature time series // Nature. 1991. Vol. 350. No. 6316. Pp. 324–327.

7. **Дженкинс Г., Ваттс Д.** Спектральный анализ и его приложения. Вып.2. М.: Мир, 1972. 287 с.

8. **Пичугин Ю.А.** Итерационный анализ сингулярного спектра в оценке естественных цикличностей метеорологических наблюдений // Метеорология и гидрология. 2001. № 10. С. 34–39.

9. Главные компоненты временных рядов: метод «Гусеница». Под ред. Д.Л. Данилова и А.А. Жиглявского. СПб.: Пресском, 1997. 308 с.

10. The transform and data compression handbook. Eds. K. Rao, P. Yip. Boca Raton (USA): CRC Press, 2001.

11. **Muresan D.D., Parks T.W.** Adaptive principal components and image denoising // Proceedings of IEEE International Conference on Image Processing (ICIP). 14–17 Sept. 2003. Vol. 1. Pp. I-101– I-104.

12. **Пичугин Ю.А.** О классификации летних режимов погоды в Санкт-Петербурге // Метеорология и гидрология. 2000. № 5. С. 31–39.

13. **Bartlett M.S.** The effect of standardization on a χ^2 approximation in factor analysis // Biometrika. 1951. Vol. 38. No. 3–4. Pp. 337–344.

14. **Bartlett M.S.** A note on the multiplying factor for various 2 approximations // J. Roy. Statist. Soc. 1954. Vol. B16. Pp. 296–298.

15. **Лоули Д., Максвелл А.** Факторный анализ как статистический метод. М.: Мир, 1967. 144 с.

16. **Айвазян С.А., Бухштабер В.М., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д.** Прикладная статистика. Классификация и снижение размерности. М.: Финансы и статистика, 1989. 607 с.

17. **Jackson D.** Stopping rules in principal components analysis: A comparison of heuristical and statistical approaches // Ecology. 1993. Vol. 74. No. 8. Pp. 2204–2214.

18. **Себер Дж.** Линейный регрессионный анализ. М.: Мир, 1980. 456 с.

19. **Пичугин Ю.А.** К проблеме статистического контроля данных наблюдений за приземной температурой на отдаленных станциях // Метеорология и гидрология. 2000. № 10. С. 18–24.

20. **Пичугин Ю.А.** Экологический мониторинг и методы многомерной математической статистики // Астраханский вестник экологического образования. 2012. № 2. С. 101–105.

21. **Айвазян С.А., Бухштабер В.М., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д.** Прикладная статистика. Исследование зависимостей. М.: Финансы и статистика, 1985. 487 с.

22. **Пичугин Ю.А.** Учет сезонных эффектов в задачах прогноза и контроля данных о приземной температуре воздуха // Метеорология и гидрология, 1996. № 4. С. 52–64.

23. **Михальчук А.С., Пичугин Ю.А.** Дисперсионный анализ погрешностей технологических процессов микроэлектроники // Моделирование и ситуационное управление качеством сложных систем. Сб. докл. СПб.: ГУАП, 2017. С. 35–38.

24. **Пичугин Ю.А.** Естественные составляющие годового хода приземной температуры воздуха // Метеорология и гидрология. 1994. № 12. С. 34–43.

25. **Пичугин Ю.А., Малафеев О.А.** Оптимизация и прогноз в динамической модели управления портфелем ценных бумаг // Матер. секц. заседаний симп. «Нобелевские лауреаты по экономике и российские экономические школы».

СПб., 2003 г. СПб.: СПбГУ, 2003. С. 183 –185.

26. **Пичугин Ю.А.** Главные компоненты многомерных временных рядов: анализ и прогноз // Сб. докл. XIII Междунар. научн. конф. по мягким вычислениям. СПб., 2010 г. Т. 1. СПб.: СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2010. С. 160–163.

Статья поступила в редакцию 26.03.2018, принята к публикации 21.06.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ПИЧУГИН Юрий Александрович – *доктор физико-математических наук, профессор Института инноватики и базовой магистерской подготовки Санкт-Петербургского государственного университета аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190000, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Большая Морская ул., 61.

yury-pichugin@mail.ru

REFERENCES

[1] **K. Pearson,** On lines and planes of closest fit to systems of points in space, The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, Ser. 6. 2 (11) (1901) 559–572.

[2] **K. Karhunen,** Über lineare Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung, Ann. Acad. Sci. Fennicae, Ser. A, I. Math.-Phys. 1947 (37) (1947) 1–79.

[3] **M. Loève,** Probability theory, Vol. II, 4th ed., Graduate texts in mathematics, Springer-Verlag. 46 (1978).

[4] **D.S. Broomhead, G.P. King,** Extracting qualitative dynamics from experimental data, Physica. D: Nonlinear Phenomena. 20 (2–3) (1986) 217–236.

[5] **D.S. Broomhead, G.P. King,** On the qualitative analysis of experimental dynamical systems, Nonlinear Phenomena and Chaos, S. Sarkar. (Ed.), CRC Press, Bristol (1986) 113–144.

[6] **M. Ghil, R. Vautard,** Interdecadal oscillations and the warming trend in global temperature time series, Nature. 350 (6316) (1991) 324–327.

[7] **G.M. Jenrins, D.G. Watts,** Spectral analysis and its aplications, Holden-Day, San Fracisco – Cambridge – London – Amsterdam, 1969.

[8] **Yu.A. Pichugin,** Iterative singular-spectrum analysis in estimating natural cyclicities in meteorological observation data, Meteorology and Hydrology. 10 (2001) 34–39.

[9] Glavnyye komponenty vremennykh ryadov: metod "Gusenitsa" [Principal components of time series: Caterpillar method], D.L. Danilov, A.A. Zhiglyavskiy (Eds.), SPbSU, St. Petersburg, 1997.

[10] The transform and data compression handbook, K. Rao, P. Yip (Eds.), CRC Press LLC, Boca Raton, USA, 2001.

[11] **D.D. Muresan, T.W. Parks,** Adaptive principal components and image denoising, Proceedings of IEEE International Conference on Image Processing (ICIP), 14–17 Sept. 1 (2003) I-101– I-104.

[12] **Yu.A. Pichugin,** Classification of summer weather regions in St. Petersburg, Meteorology and Hydrology. 5 (2000) 31–39.

[13] **M.S. Bartlett,** The effect of standardization on a χ^2 approximation in factor analysis, Biometrika. 38 (3–4) (1951) 337–344.

[14] **M.S. Bartlett,** A note on the multiplying factor for various 2 approximations, J. Roy. Statist. Soc. B16 (1954) 296–298.

[15] **D.N. Lawley, A.E. Maxwell,** Factor analysis as a statistical method, Butterworths, London, 1963.

[16] **S.A. Ayvazyan, V.M. Bukhshtaber, I.S. Enyukov, L.D. Meshalkin,** Prikladnaya statistika. Klassifikatsiya i snizheniye razmernosti [Applied Statistics. Classification and dimension reduction], Finansy i statistika, Moscow, 1989.

[17] **D. Jackson,** Stopping rules in principal components analysis: A comparison of heuristical and statistical approaches, Ecology. 74 (8) (1993) 2204–2214.

[18] **G.A.F. Seber,** Linear regression analysis, John Wiley & Sons, New York, London, Sydney, Toronto (1977).

[19] **Yu.A. Pichugin**, The problem of statistical control of observation data on surface temperature at distant stations, Meteorology and Hydrology. 10 (2000) 18–24.

[20] **Yu.A. Pichugin,** Ekologicheskiy monitoring i metody mnogomernoy matematicheskoy statistiki [Environmental quality monitoring and multivariate mathematical statistics], Astrakhanskiy vestnik ekologicheskogo obrazovaniya. (2) (2012) 101–105.

[21] **S.A. Ayvazyan, V.M. Bukhshtaber, I.S. Yenyukov, L.D. Meshalkin,** Prikladnaya statistika. Issledovaniye zavisimostey [Applied Statistics. Relation studies]. Finansy i statistika, Moscow, 1985.

[22] **Yu.A. Pichugin,** Consideration of seasonal effects in problem of SAT forecasting and data control, Meteorology and Hydrology. 4 (1996) 52–64.

[23] **A.S. Mikhalchuk, Yu.A. Pichugin,** Dispersionnyy analiz pogreshnostey tekhnologicheskikh

protsessov mikroelektroniki [The variance analysis of errors in the microelectronics technological processes], In collection of papers: Modelirovaniye i situatsionnoye upravleniye kachestvom slozhnykh sistem: sbornik dokladov [Simulation and quality control of complicated systems], SUAI, St. Petersburg (2017) 35–38.

[24] **Yu.A. Pichugin,** Empirical components of annual march of surface temperature, Meteorology and Hydrology. 12 (1994) 34–43.

[25] **Yu.A. Pichugin, O.A. Malafeyev,** Optimizatsiya i prognoz v dinamicheskoy modeli upravleniya portfelem tsennykh bumag [Optimization and prediction in the dynamic model of investment portfolio governance], In: Materialy sektsionnykh zasedaniy simpoziuma «Nobelevskiye laureaty po ekonomike i rossiyskiye ekonomicheskiye shkoly» [In: Proceedings of symp. "Nobel Prize winners in economics and Russian economic schools of sciences"] , SPbSU, St. Petersburg (2003) 183–185.

[28] **Yu.A. Pichugin,** Glavnyye komponenty mnogomernykh vremennykh ryadov: analiz i prognoz [Principal components of multivariate time series: Analysis and prediction], In: Collection of papers of "The 13th International Youth Scientific Conf. on Soft Computing", Vol. 1, The 1st Electrotechnical University «LETI», St. Petersburg (2010) 160–163.

Received 26.03.2018, accepted 21.06.2018.

THE AUTHOR

PICHUGIN Yury A.
Saint-Petersburg State University of Aerospace Instrumentation
61 Bolshaya Morskaya St., St. Petersburg, 190000, Russian Federation
yury-pichugin@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.11308
УДК 519.8/616-006

ПОГРЕШНОСТЬ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ МОДЕЛИ РОСТА КЛЕТОК

В.И. Антонов[1], Е.А. Благовещенская[2], О.А. Богомолов[3], В.В. Гарбарук[2], Ю.Г. Яковлева[3]

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

[2] Петербургский государственный университет путей сообщения Императора Александра I, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

[3]Российский научный центр радиологии и хирургических технологий имени академика А.М. Гранова, Санкт-Петербург, Российская Федерация

Математическое моделирование патологических изменений в организме является средством получения информации для принятия решений о выборе метода лечения. Принято считать, что рост количества клеток опухоли описывает экспоненциальная модель, а время удвоения простат-специфического антигена определяет агрессию роста раковых клеток. В настоящей работе исследованы погрешности в определении времени удвоения антигена в зависимости от ошибок измерений. Показано, что решение о способе лечения может меняться при учете ошибок прогноза состояния пациента. Для стратификации пациентов по группам рисков предложены пороговые значения, соответствующие уровню антигена. Результаты представлены в виде таблицы и графиков.

Ключевые слова: математическое моделирование, патологические изменения, антиген, погрешность модели

Ссылка при цитировании: Антонов В.И., Благовещенская Е.А., Богомолов О.А., Гарбарук В.В., Яковлева Ю.Г. Погрешность экспоненциальной модели роста клеток // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 90–98. DOI: 10.18721/JPM.11308

THE EXPONENTIAL MODEL OF THE CELL GROWTH: A SIMULATION ERROR

V.I. Antonov[1], E.A. Blagoveshchenskaya[2], O.A. Bogomolov[3], V.V. Garbaruk[2], J.G. Yakovleva[3]

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

[2]Emperor Alexander I St. Petersburg State Transport University, St. Petersburg, Russian Federation;

[3]Russian Research Center for Radiology and Surgical Technologies, St. Petersburg, Russian Federation

Mathematical modeling of pathological changes in the body is the means of obtaining information for making decisions about the method of treatment. Numerous studies have shown that the exponential model describes the tumor cells growth, and the time of antigen doubling determines the aggression of cancer cells growth. The present work investigates inaccuracies in determining the antigen doubling time as a function of measurement errors. The study showed that the decision on the method of treatment could be changed by taking into account errors in the prognosis of patient's condition. For patient's stratification in groups of high, medium and low risks, various threshold values corresponding to the antigen level are proposed. The results are presented in the form of a table and graphs.

Key words: mathematical modeling, pathological changes, antigen, simulation error

Citation: V.I. Antonov, E.A. Blagoveshchenskaya, O.A. Bogomolov, V.V. Garbaruk, J.G. Yakovleva, The exponential model of the cell growth: A simulation error, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 90–98. DOI: 10.18721/JPM.11308

Введение

Одной из наиболее распространенных причин болезни человека с летальным исходом является раковая опухоль. Количество заболеваний населения раком непрерывно растет. Ежегодно в мире регистрируется около шести миллионов новых случаев появления злокачественных опухолей. Смертность от онкологических заболеваний занимает третье место в мире вслед за заболеваниями сердечно-сосудистой и дыхательной систем.

Математическое моделирование процессов развития патологических изменений в состоянии организма служит важным инструментом получения информации для принятия эффективных решений о выборе времени и метода лечения. В качестве базовых моделей обычно выбирают детерминированные и стохастические либо модели, основанные на методах нелинейной динамики [1 – 11]. Большинство моделей использует экспериментальные данные, что приводит к необходимости учитывать ошибки в задании параметров задачи. Такой подход есть следствие большого количества факторов, влияющих на ход течения различных заболеваний.

Рак предстательной железы считается наиболее диагностируемым онкологическим заболеванием у мужчин и второй (согласно статистическим данным) причиной смерти от рака [12]. Уровень простат-специфического антигена p (ПСА) в сыворотке крови, который измеряется в нг/мл, является одним из самых изученных и широко применяемых маркеров ранней диагностики этого рака. Кинетика значения маркера может отражать фактическую скорость роста опухоли.

Цель настоящего исследования – проанализировать влияние погрешности измерений антигена p (ПСА) в сыворотке крови на результат определения времени удвоения его значения.

Экспоненциальная модель

Принято считать, что рост количества клеток опухоли описывается экспоненциальной моделью, а уровень p во многих случаях линейно зависит от числа этих клеток [12]. Время t_d удвоения величины p (оно в этой модели измеряется в месяцах) определяет агрессию роста раковых клеток. Этот параметр позволяет контролировать скорость течения опухолевого процесса, выбирать оптимальный метод терапии и оценивать эффективность проводимого лечения. Однако для принятия решения по прогнозу, полученному расчетами по неустойчивой модели, необходима оценка погрешности, поскольку эмпирические данные по своей природе всегда содержат ошибку [13].

К экспоненциальной модели приводит пропорциональность исследуемого элемента p и его приращения Δp. В этом случае должно выполняться равенство

$$dp = kpdt, \quad (1)$$

и значит

$$p = \tilde{C}e^{kt}. \quad (2)$$

Закон экспоненциального роста справедлив на определенной стадии для популяций клеток в ткани, в том числе и опухолевых [1]. При использовании экспоненциальной модели надо понимать, что решение дифференциального уравнения (2) при $k > 0$ неустойчиво по Ляпунову [14], т. е. малым изменениям начальных условий соответствуют значительные ошибки в конечных расчетах. Экспоненциальная модель широко распространена и допустима при возможности корректировки ее параметров по результатам наблюдения или при качественном изучении поведения системы.

При известных значениях p, например

p_1 и p_2, замеренных в разные моменты времени t_1 и t_2, коэффициенты решения дифференциального уравнения (1), записанного в виде

$$\ln p = C + kt,$$

имеют вид

$$C = \frac{t_2 \ln p_1 - t_1 \ln p_2}{t_2 - t_1};$$
$$k = \frac{\ln p_2 - \ln p_1}{t_2 - t_1}. \quad (3)$$

Следует отметить, что коэффициент C является безразмерной величиной, тогда как коэффициент k измеряется в (мес)$^{-1}$.

Время t_d, которое прошло после момента t_2 и за которое величина p_2 удваивается, прогнозируется решением уравнения

$$2p_2 = p_2 e^{k \cdot t_d};$$

отсюда следует, что должно выполняться равенство

$$t_d = \ln 2 \cdot \frac{t_2 - t_1}{\ln p_2 - \ln p_1}. \quad (4)$$

Будем далее предполагать, что в значении величины p может быть допущена абсолютная погрешность измерения Δp_i (i = 1, 2), причем $|\Delta p_i| \le \varepsilon \cdot p_i$. Тогда значение p оценивается величиной

$$p_i \pm \Delta p_i = p_i (1 \pm \varepsilon_i) = q_i \cdot p_i.$$

Здесь $q_i \cdot 100\%$ – относительная погрешность измерения величины p_i в процентах.

В случае определения уровней p_1 и p_2 с погрешностями соответственно q_1 и q_2, время t_d^{er} удвоения величины p с учетом ошибок и относительная погрешность δt_d прогноза времени удвоения рассчитываются по формулам

$$t_d^{er} = \ln 2 \cdot \frac{t_2 - t_1}{\ln \frac{q_2 p_2}{q_1 p_1}}, \quad (5)$$

$$\delta t_d = \left| \frac{t_d^{er} - t_d}{t_d^{er}} \right| = \left| \frac{\ln q_2 - \ln q_1}{\ln p_2 - \ln p_1} \right|. \quad (6)$$

Известно, что относительная погрешность измерения p меняется, как правило, от 2 до 20 % [15]. Погрешности замеров p приводят к большим ошибкам при определении t_d. Следует отметить, что даже при больших, но одинаковых относительных погрешностях определения уровней p, прогноз времени удвоения вычисляется без ошибки, т. е. желательно измерять уровень p в той же лаборатории на том же оборудовании.

При малом промежутке времени ($t_2 - t_1$) между замерами p знаменатель в формулах (4), (5) будет близок к нулю, что приведет к существенному увеличению ошибки в определении прогноза t_d. Чтобы обеспечить заданную относительную погрешность Q вычисления времени удвоения, промежуток времени между двумя замерами p должен удовлетворять неравенству

$$t_2 - t_1 \ge \frac{\left| \ln \frac{q_2}{q_1} \right|}{Q \cdot \ln 2}.$$

При 5%-ой (например) погрешности определения уровня p отношение q_2/q_1 может меняться от (100 – 5) / (100 + 5) до (100 + 5)/(100 – 5), т. е. примерно от 0,9 до 1,1, а при 10%-ой – от 0,82 до 1,22.

Результаты расчетов и их обсуждение

Из данных таблицы можно оценить, например, границы возможной ошибки прогноза t_d^{er} при значениях p_2/p_1 = 1,51 и разности $(t_2 - t_1) = 12$ мес. Вместо значения t_d = 20 мес диапазон значений величины t_d^{er} составляет 17 – 27 мес, т. е. включает значения, лежащие ниже угрожающего. Следовательно, при учете погрешности модели более интенсивное лечение надо начинать при t_d^{er} = 27 мес.

Из формул (4), (5) и таблицы следует, что при меньших значениях отношения p_2/p_1 абсолютная и относительная погрешности определения t_d увеличиваются. Малым значениям t_d^{er} соответствует большее отношение p_2/p_1, и ошибка определения времени удвоения уменьшается.

Для стратификации пациентов в соответствии с уровнями ПСА t_d по группам высокого, среднего и низкого рисков [12] предложены различные пороговые значения p. Для дальнейших расчетов обозначим эти значения, разделяющие указанные ри-

Таблица

Прогнозируемые величины t_d^{er} – времени удвоения значения ракового маркера p в зависимости от погрешностей q его измерения при разных параметрах

q_2/q_1	t_d^{er}, мес		
	p_2 = 1,51 нг/мл, t_d = 20 мес	p_2 = 1,46 нг/мл, t_d = 22 мес	p_2 = 1,56 нг/мл, t_d = 19 мес
0,90	27	30	25
0,92	25	28	23
0,94	24	26	22
0,96	22	25	21
0,98	21	23	**20**
1,00	**20**	22	19
1,02	19	21	18
1,04	18	**20**	17
1,06	18	19	17
1,08	17	18	16
1,10	17	18	15

Обозначения: q_1, q_2, %, – погрешности измеренных значений маркера p_1 и p_2, полученных в моменты времени t_1 и t_2; t_d – прогнозируемая величина времени удвоения без учета погрешностей измерения.

Примечания. 1. Расчеты t_d^{er} выполнены по формуле (5), в предположении, что начальное значение маркера p_1 одинаково и составляет 1 нг/мл; разность $t_2 - t_1$ = 12 мес.
2. Значения t_d^{er} = 20 мес выделены жирным шрифтом как предельные, ниже которых темп роста раковых клеток признается угрожающим.

ски, p_{top} и p_{low}. При $p < p_{low}$ ведется профилактическое наблюдение за пациентом. При $p > p_{top}$ применяются чрезвычайные методы лечения. Промежуток [p_{low}; p_{top}] принято называть серой зоной [15], так как в пределах этих значений могут приниматься различные решения о дальнейшем лечении. Прогноз вхождения величины p в серую или опасную зоны дает возможность вычислить рекомендуемое время для следующего измерения p. Если модель изменения p соответствует экспоненциальной с параметрами (3), то значение p, равное p_b, будет достигнуто в момент времени t_b, для которого выполняется равенство

$$t_b = \frac{\ln\left(p_b^{(t_2-t_1)} \cdot \frac{p_2^{t_1}}{p_1^{t_2}}\right)}{\ln\left(\frac{p_2}{p_1}\right)},$$

или

$$t_b - t_2 = (t_2 - t_1) \cdot \frac{\ln \frac{p_b}{p_2}}{\ln \frac{p_2}{p_1}} = \frac{\ln \frac{p_b}{p_2}}{\ln 2} \cdot t_d. \qquad (7)$$

Для вычисления прогноза t_b с учетом погрешности определения p, надо в формулу (7) вместо p_1 и p_2 подставить q_1p_1 и q_2p_2:

$$(t_b^{er} - t_2) = (t_2 - t_1) \cdot \frac{\ln(p_b / q_2p_2)}{\ln(q_2p_2 / q_2p_1)}.$$

На рис. 1, *а* показано, сколь быстро при большом темпе роста ПСА (при p_2 = 3 нг/мл, t_d = 6 мес, p_{low} = 4 нг/мл, p_{top} = 10 нг/мл и ($t_2 - t_1$) = 6 мес) достигается значение p в серой зоне и осуществляется переход в опасную область. В этом случае

$$t_b - t_2 = 6 \cdot \frac{\ln(10/3)}{\ln 2} \approx 10,4 \text{ (мес)}.$$

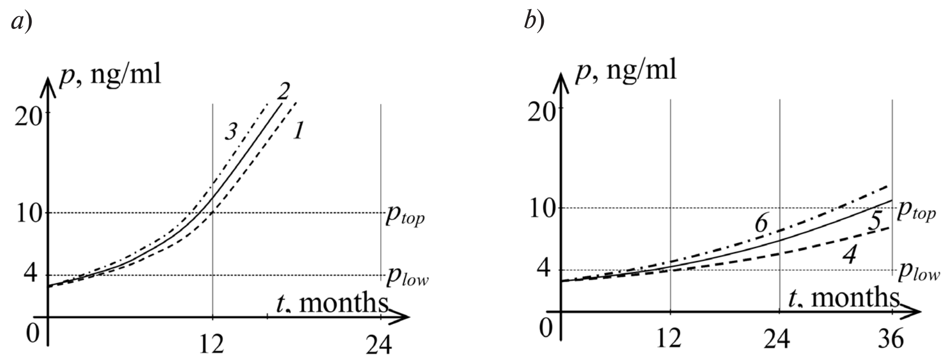


Рис. 1. Кинетика роста значений ракового маркера p при разных значениях параметра t_d, мес: 5,61 (*1*), 6,00 (*2*), 6,49 (*3*) (*a*) и 17 (*4*), 20 (*5*) и 27 (*6*) (*b*); p_{top}, p_{low} – границы серой зоны; опасная зона – область $p > p_{top}$; $p_2 = 3$ нг/мл; $t_2 - t_1 = 6$ мес

Это означает, что следующее измерение p следует назначить примерно через 10 мес, так как при измерении через 12 мес уровень p будет находиться в опасной зоне. Учет погрешности определения p может изменить этот интервал на месяц. При назначении даты измерения p надо учесть, что через 2,5 мес, возможно, значение p окажется в серой зоне.

Рис. 1, *b* иллюстрирует прохождение серой зоны при том же значении p_2 и величине $t_d = 20$ мес. В этом случае необходимо учесть возможность достижения нижней границы серой зоны, и следующее измерение p следует назначить через 8 мес. При учете погрешности p этот интервал можно менять от 7 до 11 мес.

Появление третьего измерения p_3, проведенного в момент t_3, дает возможность уточнить значения коэффициентов (3) в случае соответствия экспоненциальной модели полученным экспериментальным данным. Адекватность модели можно проверить несколькими способами.

Если

$$\frac{p_3 - p_2}{t_3 - t_2} \approx \frac{p_2 - p_1}{t_2 - t_1}$$

(или $p_3 + p_1 \approx 2p_2$, при условии, что измерения проводились через равные промежутки времени), то p растет линейно и от экспоненциальной модели следует отказаться. Это означает, что рост p вызван не увеличением размера опухоли, а другими причинами. Дата анализа p подбиралась по условию достижения граничного значения p_b. Если полученное значение p_3 мало отличается от прогнозируемого, то экспоненциальная модель подобрана правильно. Тогда при неизменных параметрах модели и отсутствии ошибок в замерах p время удвоения постоянно и результаты расчетов t_d должны быть одинаковы при выборе любых двух замеров, проведенных в разное время. Экспоненциальная модель адекватна при условии примерного равенства величины

$$t_d = \ln 2 \cdot \frac{t_2 - t_1}{\ln p_2 - \ln p_1}$$

и величин

$$t_{d32} = \ln 2 \cdot \frac{t_3 - t_2}{\ln p_3 - \ln p_2},$$

$$t_{d31} = \ln 2 \cdot \frac{t_3 - t_1}{\ln p_3 - \ln p_1},$$

т. е. при

$$\frac{\ln p_3 - \ln p_2}{t_3 - t_2} \approx \frac{\ln p_2 - \ln p_1}{t_2 - t_1}$$

(или $p_3 \cdot p_1 \approx p_2^2$, если измерения проводились через равные промежутки времени).

Далее можно подобрать коэффициенты экспоненты, наименее отклоняющейся от заданных трех точек $(t_1; p_1)$, $(t_2; p_2)$, $(t_3; p_3)$ и оценить величины невязок с экспериментальными точками.

В этом случае имеем несовместную систему из трех уравнений с двумя неизвестными:

$$\begin{cases} C + kt_1 = \ln p_1; \\ C + kt_2 = \ln p_2; \\ C + kt_3 = \ln p_3. \end{cases} \qquad (8)$$

Коэффициенты C и k, примерно удовлетворяющие всем уравнениям системы, можно найти методом наименьших квадратов:

$$a = \sum_{i=1}^{3} t_i^2, \quad b = \sum_{i=1}^{3} t_i,$$

$$u = \sum_{i=1}^{3} \ln p_i, \quad v = \sum_{i=1}^{3} t_i \ln p_i,$$

$$\begin{cases} C = \dfrac{a \cdot u - b \cdot v}{3a - b^2}; \\ k = \dfrac{3 \cdot v - b \cdot u}{3a - b^2}. \end{cases} \qquad (9)$$

Если принята экспоненциальная модель с коэффициентами (9), то уточненное время удвоения p вычисляется по формуле

$$t_d = \frac{(\ln 4)(\tau_{12}\tau_{13} + \tau_{21}\tau_{23} + \tau_{32}\tau_{31})}{\ln\left(\left(\dfrac{p_2}{p_1}\right)^{\tau_{21}} \cdot \left(\dfrac{p_3}{p_2}\right)^{\tau_{32}} \cdot \left(\dfrac{p_3}{p_1}\right)^{\tau_{31}}\right)}, \qquad (10)$$

$$\tau_{ij} = t_i - t_j.$$

Погрешность вычисления t_d при этом определяется по формуле

$$\delta t_d = \left| \frac{\ln\left(\left(\dfrac{q_2}{q_1}\right)^{\tau_{21}} \left(\dfrac{q_3}{q_2}\right)^{\tau_{32}} \left(\dfrac{q_3}{q_1}\right)^{\tau_{31}}\right)}{\ln\left(\left(\dfrac{p_2}{p_1}\right)^{\tau_{21}} \left(\dfrac{p_3}{p_2}\right)^{\tau_{32}} \left(\dfrac{p_3}{p_1}\right)^{\tau_{31}}\right)} \right|. \qquad (11)$$

Формулы (10) и (11) совпадают с формулами (4) и (5), если обследования проводились через равные промежутки времени, т. е. при $(t_3 - t_2) = (t_2 - t_1)$:

$$t_{d31} = \ln 2 \frac{t_3 - t_1}{\ln \dfrac{p_3}{p_1}};$$

$$\delta t_{d31} = \left| \frac{\ln \dfrac{q_3}{q_1}}{\ln \dfrac{p_3}{p_1}} \right|.$$

В этом случае погрешность не зависит от погрешности среднего замера.

Заключение

Ряд важных решений об эффекте метода лечения пациента принимается после анализа кинетики роста раковых клеток [16, 17], установленной на основании экспоненциальной модели. При прогнозе будущего состояния больного должны быть учтены суммарные ошибки модели, которые, как показано в работе, больше погрешности измерений характеристик его состояния.

Получены формулы для расчета относительной погрешности модели и указаны возможности снижения влияния этой погрешности на возможности прогнозирования по экспоненциальной модели.

Показано, что решение о способе лечения больного может меняться при учете возможных ошибок прогноза его состояния.

Предложен метод расчета временного интервала между оценками состояния пациента, необходимыми для уточнения параметров модели, характеризующих его болезнь.

Наличие дополнительной информации о состоянии объекта позволяет оценить адекватность модели несколькими предложенными способами.

Полученные в настоящем исследовании результаты могут быть полезны не только в медицине, так как применение экспоненциальной модели эффективно и на некоторых этапах анализа роста потребления, капитала, населения и т. п. [18].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Резниченко Г.Ю., Рубин А.Б.** Математические модели биологических продукционных процессов. М.: Изд-во. МГУ, 1993. 302 с.

2. **Antonov V., Zagainov A., Kovalenko A.** Fractal analysis of biological signals in a real time mode // Global and Stochastic Analysis. 2016. Vol. 3. No. 2. Pp. 75–84.

3. **Antonov V., Zagainov A.** Software package for calculating the fractal and cross spectral parameters of cerebral hemodynamic in a real time mode // New Trends in Stochastic Modeling and Data Analysis. Ch. 7. Demography and Related Applications.

ISAST, 2015. Pp. 339–345.
4. **Марчук Г.И.** Математические модели в иммунологии. М.: Наука, 1985. 240 с.
5. **Ашметов И.В., Буничева А.Я., Мухин С.И., Соколова Т.В., Соснин Н.В., Фаворский А.П.** Математическое моделирование гемодинамики в мозге и в большом круге кровообращения // Компьютер и мозг. Новые технологии. М.: Наука, 2005. 321 с.
6. **Астанин С.А., Колобов А.В., Лобанов А.И.** Влияние пространственной гетерогенной среды на рост и инвазию опухоли. Анализ методами математического моделирования // Медицина в зеркале информатики. М.: Наука, 2006. С. 163–194.
7. **Molina-Pena R., Alvarez M.M.** A simple mathematical model based on the cancer stem cell hypothesis suggests kinetic commonalities in solid tumor growth // PLOS. One. 7(2): e26233, DOI: 10.1371/journal.pone.0026233. (2012).
8. **Kolobov A.V., Polezhaev A.A., Solyanik G.I.** The role of cell motility in metastatic cell dominance phenomenon: analysis by a mathematical model // Journal of Theoretical Medicine. 2001. Vol. 3. No. 1. Pp. 63–77.
9. **Williams M.J., Werner B., Barnes C.P., Graham T.A., Sottoriva A.** Identification of neutral tumor evolution across cancer types // Nature Genetics. 2016. № 48(3). Pp. 238–244.
10. **Бабушкина Н.А., Островская Л.А., Рыкова В.А., Фомина М.М., Блюхтерова Н.В., Бурлакова Е.Б., Кулешова А.В.** Моделирование эффективности действия противоопухолевых препаратов в сверхмалых дозах для оптимизации режимов их введения // Проблемы управления. 2005. № 4. С. 47 – 54.
11. **Benzekry S., Lamont C., Beheshti A., Tracz A., Ebos J.M., Hlatky L., Hahnfeldt P.** Classical mathematical models for description and prediction of experimental tumor growth // PLOS Comput. Biol. 2014. Vol. 10. No. 8. e1003800. doi: 10.1371/journal.pcbi.1003800.
12. **Жаринов Г.М., Богомолов О.А.** Исходное время удвоения простат-специфического антигена: клиническое и прогностическое значения у больных раком предстательной железы // Онкоурология. 2014. № 1. С. 44–48.
13. **Тейлор Дж.** Введение в теорию ошибок. М.: Мир, 1985. 272 с.
14. **Галанова З.С., Гарбарук В.В.** Исследование устойчивости автономных систем. СПб.: Изд-во ПГУПС, 2005. 52 с.
15. **Курзанов А.Н., Стрыгина Е.А., Медведев В.Л.** Диагностические и прогностические маркеры рака предстательной железы // Современные проблемы науки и образования. 2016. № 2.; URL: http://www.science-education.ru/ru/article/view?id=24439 (дата обращения: 20.05.2018).
16. **Ramirez M.L., Nelson E.C., deVere White R.W., Lara P.N., Evans C.P.** Current applications for prostate-specific antigen doubling time // European Urology. 2008. Vol. 54. No. 2. Pp. 291–300.
17. **Grosh M., Dagher A., El-Karar F.** Prostate-specific antigen doubling time and response to cabazitaxel in a hormone-resistant metastatic prostate cancer patient // Journal of Biomedical Research. 2015. Vol. 29. No. 5. Pp. 420–422.
18. **Медоуз Д., Рандерс Й., Медоуз Д.** Пределы роста. 30 лет спустя. М.: Академкнига, 2007. 342 с.

Статья поступила в редакцию 06.06.2018, принята к публикации 05.09.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АНТОНОВ Валерий Иванович – *доктор технических наук, заведующий кафедрой высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

БЛАГОВЕЩЕНСКАЯ Екатерина Анатольевна – *доктор физико-математических наук, заведующая кафедрой высшей математики Петербургского государственного университета путей сообщения Императора Александра I, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190031, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 9
kblag2002@yahoo.com

БОГОМОЛОВ Олег Алексеевич – *кандидат медицинских наук, научный сотрудник отделения оперативной онкоурологии Российского научного центра радиологии и хирургических технологий имени академика А.М. Гранова, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

197758, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, пос. Песочный, Ленинградская ул., 70
urologbogomolov@gmail.com

ГАРБАРУК Виктор Владимирович – *кандидат технических наук, профессор кафедры высшей математики Петербургского государственного университета путей сообщения Императора Александра I, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

190031, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Московский пр., 9

vigarb@mail.ru

ЯКОВЛЕВА Юлия Георгиевна – *аспирантка отделения оперативной онкоурологии Российского научного центра радиологии и хирургических технологий имени академика А.М. Гранова, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

197758, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, пос. Песочный, Ленинградская ул., 70

yuliya_yakovleva95@mail.ru

REFERENCES

[1] **G.Yu. Reznichenko, A.B. Rubin,** Matematicheskoye modelirovaniye biologicheskikh produktsionnykh protsessov [Simulation of the biological production processes], MSU, Moscow, 1993.

[2] **V. Antonov, A. Zagainov, A. Kovalenko,** Fractal analysis of biological signals in a real time mode, Global and Stochastic Analysis. 3 (2) (2016) 75–84.

[3] **V. Antonov, A. Zagaynov,** Software package for calculating the fractal and cross spectral parameters of cerebral hemodynamic in a real time mode, New Trends in Stochastic Modeling and Data Analysis, Ch. 7. Demography and Related Applications, ISAST (440) (2015) 339–345.

[4] **G.I. Marchuk,** Matematicheskiye modeli v immunologii [Mathematical models in immunology], Nauka, Moscow, 1985.

[5] **I.V. Ashmetov, A.Ya. Bunicheva, S.I. Mukhin S.I., et al.,** Matematicheskoye modelirovaniye gemodinamiki v mozge i v bolshom kruge krovoobrashcheniya [Simulation of hemodynamics in the brain and greater circulation], In: Computer and Brain. New technologies, Nauka, Moscow, 2005.

[6] **S.A. Astanin, A.V. Kolobov, A.I. Lobanov,** Vliyaniye prostranstvennoy geterogennoy sredy na rost i invaziyu opukholi. Analiz metodami matematicheskogo modelirovaniya [The influence of the spatial heterogeneous medium on the tumor growth and invasion, An analysis by mathematical modeling], In: Health Care in the Mirror of Informatics, Nauka, Moscow (2006) 163–194.

[7] **R. Molina-Pena, M.M. Alvarez,** A simple mathematical model based on the cancer stem cell hypothesis suggests kinetic commonalities in solid tumor growth, PLOS. One. 7(2): e26233, doi: 10.1371/journal.pone.0026233 (2012).

[8] **A.V. Kolobov, A.A. Polezhaev, G.I. Solyanik,** The role of cell motility in metastatic cell dominance phenomenon: analysis by a mathematical model, Journal of Theoretical Medicine. 3 (1) (2001) 63–77.

[9] **M.J. Williams, B. Werner, C.P. Barnes, et al.,** Identification of neutral tumor evolution across cancer types, Nature Genetics (48) (2016) 238–244. doi:10.1038/ng.3489.

[10] **N.A. Babushkina, L.A. Ostrovskaya, V.A. Rykova, et al.,** Modelirovaniye effektivnosti deystviya protivoopukholevykh preparatov v sverkhmalykh dozakh dlya optimizatsii rezhimov ikh vvedeniya [Simulation of the curative efficacy of the anticancer drug at a very-low-dose for dose-schedule optimization], Control Problems. (4) (2005) 47–54.

[11] **S. Benzekry, C. Lamont, A. Beheshti, et al.,** Classical mathematical models for description and prediction of experimental tumor growth, PLOS Comput. Biol. 10(8) 2014; e1003800. doi: 10.1371/journal.pcbi.1003800.

[12] **G.M. Zharinov, O.A. Bogomolov,** The pretreatment prostate-specific antigen-doubling time: clinical and prognostic values in patients with prostate cancer, Cancer Urology. (1) (2014) 44–48.

[13] **J.R. Taylor.** Introduction to the theory of errors. Moscow: Mir, 1985. 272 p.

[14] **Z.S. Galanova, V.V. Garbaruk,** Issledovaniye ustoychivosti avtonomnykh system [Studies in stability of independent systems], Petersburg State Transport University, St. Petersburg, 2005.

[15] **A.N. Kurzanov, E.A. Strygina, V.L. Medvedev,** Diagnostic and prognostic markers in prostate cancer, Modern Problems of Science and Education. (2) (2016) URL: http://www.science-education.ru/ru/article/view?id=24439

[16] **M.L. Ramirez, E.C. Nelson, R.W. deVere White, et al.,** Current applications for prostate-specific antigen doubling time, European Urology. 54 (2) (2008) 291–300.

[17] **M. Grosh, A. Dagher, F. El-Karar,** Prostate-specific antigen doubling time and response to cabazitaxel in a hormone-resistant metastatic prostate cancer patient, Journal of Biomedical Research. 29 (5) (2015) 420–422.

[18] **D. Meadows, J. Randers, D. Meadows,** The limits to growth. The 30-year update, Chelsea Green Publishing Company, Vermont, 1972.

Received 06.06.2018, accepted 05.09.2018.

THE AUTHORS

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

BLAGOVESHCHENSKAYA Ekaterina A.
Emperor Alexander I St. Petersburg State Transport University
9 Moskovsky Ave., St. Petersburg, 190031, Russian Federation
kblag2002@yahoo.com

BOGOMOLOV Oleg A.
Russian Research Center for Radiology and Surgical Technologies
70 Leningradskaya St., St. Petersburg, Pesochniy Settl., 197758, Russian Federation
urologbogomolov@gmail.com

GARBARUK Victor V.
Emperor Alexander I St. Petersburg State Transport University
9 Moskovsky Ave., St. Petersburg, 190031, Russian Federation
vigarb@mail.ru

YAKOVLEVA Julia G.
Russian Research Center for Radiology and Surgical Technologies
70 Leningradskaya St., St. Petersburg, Pesochniy Settl., 197758, Russian Federation
vmkaf@pgups.ru

DOI: 10.18721/JPM.11309
УДК 539.3

КРИТЕРИИ РАЗРУШЕНИЯ ОСТРОГО ВЫРЕЗА В УСЛОВИЯХ АНТИПЛОСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

В.В. Тихомиров

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

Рассмотрены критерии хрупкого разрушения острого выреза при его антиплоском нагружении сосредоточенными силами: *а*) максимального среднего напряжения, *б*) средней плотности энергии деформации, *в*) подход, основанный на совместном использовании силового и энергетического критериев. Найдены оценки разрушающих нагрузок на основе точных решений и с использованием асимптотик напряжений вблизи вершины выреза. Проведен сравнительный анализ разрушающих нагрузок, найденных с помощью указанных критериев. Для несимметричного нагружения определен начальный угол распространения трещины из вершины выреза. Показано, что при вычислении этого угла применение асимптотик напряжений приводит к значительным погрешностям и требует учета регулярных слагаемых в представлениях напряжений.

Ключевые слова: антиплоская деформация, острый вырез, критерий разрушения, среднее напряжение, энергия деформации

Ссылка при цитировании: Тихомиров В.В. Критерии разрушения острого выреза в условиях антиплоской деформации // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 99–107. DOI: 10.18721/JPM.11309

SHARP V-NOTCH FRACTURE CRITERIA UNDER ANTIPLANE DEFORMATION

V.V. Tikhomirov

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

The criteria for brittle fracture of a sharp V-notch when it is loaded with antiplane concentrated forces have been considered: a criterion for the maximum average stress, a criterion for the average energy density of deformation, and an approach based on the joint use of the force and energy criteria. Failure loads estimates on the basis of the exact solutions and using asymptotics of stresses near the V-notch tip were found. A comparative analysis of the failure loads obtained through those criteria was carried out. For the asymmetric loading, the initial angle of the crack propagation from the V-notch tip was determined. In the calculation of this angle, the application of the stress asymptotics was shown to result in significant errors and to require the consideration of regular terms in the stress representations.

Key words: antiplane deformation, sharp V-notch, fracture criterion, average stress, deformation energy

Citation: V.V. Tikhomirov, Sharp V-notch fracture criteria under antiplane deformation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 99–107. DOI: 10.18721/JPM.11309

Введение

Вершины острых вырезов в упругих телах являются точками сингулярности полей напряжений. При определенных условиях из этих особых точек могут развиваться трещины, приводящие к разрушению упругих структур. Это обстоятельство пробуждает интерес к изучению напряженно-деформированного состояния тел с вырезами, а также к разработке критериев разрушения и экспериментального их подтверждения.

Хотя плоские трещины, для которых известны критерии разрушения, восходящие к А.А. Гриффитсу и Дж. Ирвину, относятся к частным случаям вырезов, для последних эти критерии непосредственно не применимы. В связи с этим за последние десятилетия предложено несколько других критериев разрушения структурных элементов с острыми вырезами:

силовой [1 – 5];

энергетический [6 – 10];

сформулированный в рамках так называемой финитной механики разрушения и основанный на совместном применении силового и энергетического условий [11, 12].

В подавляющем числе работ применение этих критериев проводилось в рамках плоской задачи для структур, имеющих конечные или полубесконечные вырезы. При этом использование указанных критериев базировалось на асимптотических представлениях напряжений вблизи концентраторов напряжений. Было показано, что критические значения параметров разрушения, например предельных нагрузок, можно выразить через макроскопические характеристики материалов, такие как предел прочности на растяжение и вязкость разрушения.

В последние годы появились работы, в которых оценивается, как влияет учет несингулярных членов в разложениях напряжений в окрестности вершины выреза на такие параметры, как обобщенный коэффициент интенсивности [13] и на угол инициализации трещины [14]. Результаты этих работ показывают, что учет первого несингулярного члена в разложении Вильямса существенно влияет на отмеченные параметры разрушения.

Что касается антиплоских задач, относящихся к рассматриваемой тематике, то количество работ в этом направлении весьма ограничено [8, 15, 16]. При этом сравнительный анализ различных критериев разрушения клиновидных областей в отмеченных публикациях не проводился.

Основная цель настоящей статьи состоит в распространении критериев разрушения, разработанных для плоских задач, на случай антиплоской деформации тел с вырезами и в их сравнительном анализе при определении предельных нагрузок.

Поскольку при антиплоском нагружении упругое решение для однородной клиновидной области удается получить в замкнутой форме в виде явных представлений для напряжений и перемещений, то появляется возможность оценить точность вычисления разрушающей нагрузки при использовании асимптотик напряжений в вершине выреза.

Функции Грина для острого выреза

Рассмотрим антиплоскую деформацию однородной изотропной клиновидной области с углом раствора 2α $(\pi/2 < \alpha \le \pi)$. Тогда вырез определяется углом $\beta \in [0, \pi)$. На стороне выреза $\theta = \alpha$ на расстоянии r_0 от вершины приложена сосредоточенная сила $2T$, выходящая из плоскости. Общую задачу о нахождении напряженно-деформированного состояния плоскости с вырезом в силу ее линейности представим в виде суперпозиции двух задач:

1) с симметричным нагружением граней выреза, когда

$$\tau_{\theta z}(r, \alpha) = \tau_{\theta z}(r, -\alpha) = T\delta(r - r_0), \qquad (1)$$

2) с антисимметричным нагружением, при котором

$$\tau_{\theta z}(r,\alpha) = -\tau_{\theta z}(r,-\alpha) = T\delta(r-r_0) \qquad (2)$$

($\delta(r-r_0)$ – дельта-функция Дирака).

Применяем далее к гармоническому уравнению равновесия интегральное преобразование Меллина и удовлетворяем граничным условиям (1) и (2); кроме того, используем теорему о вычетах. В результате получим следующие представления для напряжений;

в задаче 1:

$$\begin{aligned} \tau_{\theta z}(r,\theta) &= \frac{K_3^N}{\sqrt{2\pi} r^{1-\lambda}} \frac{1+\rho^2}{1+2\rho^2\cos 2\lambda\theta+\rho^4}\cos\lambda\theta, \\ \tau_{rz}(r,\theta) &= \frac{K_3^N}{\sqrt{2\pi} r^{1-\lambda}} \frac{1-\rho^2}{1+2\rho^2\cos 2\lambda\theta+\rho^4}\sin\lambda\theta; \end{aligned} \qquad (3)$$

в задаче 2:

$$\begin{aligned} \tau_{\theta z}(r,\theta) &= \frac{K_3^N}{\sqrt{2\pi} r^{1-\lambda}} \frac{\rho}{1+2\rho^2\cos 2\lambda\theta+\rho^4}\sin 2\lambda\theta; \\ \tau_{rz}(r,\theta) &= -\frac{K_3^N}{\sqrt{2\pi} r^{1-\lambda}} \frac{\rho(\rho^2+\cos 2\lambda\theta)}{1+2\rho^2\cos 2\lambda\theta+\rho^4}; \end{aligned} \qquad (4)$$

$$\rho = (r/r_0)^\lambda .$$

Здесь $\lambda = \pi/(2\alpha)$, причем $\lambda = 1$ в случае полуплоскости $(\alpha = \pi/2)$ и $\lambda = 1/2$ в случае полубесконечной трещины в неограниченной плоскости $(\alpha = \pi)$.

Величина K_3^N в соотношениях (3) представляет собой обобщенный коэффициент интенсивности напряжений (ОКИН), определяемый формулой

$$K_3^N = \lim_{r\to 0} \sqrt{2\pi} r^{1-\lambda} \tau_{\theta z}(r,0) = \frac{\sqrt{2\pi}T}{\alpha r_0^\lambda}. \qquad (5)$$

При $\alpha = \pi$ ОКИН совпадает с коэффициентом интенсивности напряжений (КИН) в вершине полубесконечной трещины:

$$K_3^N(\pi) = K_3 = T\sqrt{\frac{2}{\pi r_0}}. \qquad (6)$$

Когда сосредоточенные силы принимают критические значения, равные T_c, формулы (5) и (6) определяют критические коэффициенты интенсивности

$$K_{3c}^N = \frac{\sqrt{2\pi}T_c}{\alpha r_0^\lambda}, \quad K_{3c} = T_c\sqrt{\frac{2}{\pi r_0}}. \qquad (7)$$

Следует подчеркнуть, что критический коэффициент интенсивности напряжений в вершине выреза K_{3c}^N, в отличие от константы вязкости разрушения K_{3c}, не является константой материала, поскольку он зависит от угла α. Необходимо также отметить, что в задаче 1 напряжения (3) в вершине выреза имеют степенную особенность, а в задаче 2 напряжения (4) особенности не имеют. Асимптотики напряжений (3) при $r \to 0$ определяются формулами

$$\begin{aligned} \tau_{\theta z}(r,\theta) &= \frac{K_3^N}{\sqrt{2\pi}} r^{1-\lambda}\cos\lambda\theta, \\ \tau_{rz}(r,\theta) &= \frac{K_3^N}{\sqrt{2\pi}} r^{1-\lambda}\sin\lambda\theta. \end{aligned} \qquad (8)$$

Заметим, что формулы (3) для напряжений согласуются с результатами, представленными в работе [17].

Суммируя решения (3) и (4), получаем напряжения в задаче о действии сосредоточенной силы $2T$ на грани выреза $\theta = \alpha$:

$$\begin{aligned} \tau_{\theta z}(r,\theta) &= \frac{K_3^N}{\sqrt{2\pi}} r^{1-\lambda} \frac{\cos\lambda\theta}{1-2\rho\ \sin\ \lambda\theta+\rho^2}, \\ \tau_{rz}(r,\theta) &= \frac{K_3^N}{\sqrt{2\pi}} r^{1-\lambda} \frac{\sin\lambda\theta-\rho}{1-2\rho\ \sin\ \lambda\theta+\rho^2}. \end{aligned} \qquad (9)$$

Очевидно, что напряжения (9) при $r \to 0$ имеют асимптотики (8).

Критерии разрушения острого выреза

Применение критериев разрушения рассмотрим на примере выреза с симметрично нагруженными гранями. В этом случае напряжение $\tau_{\theta z}$ в силу симметрии достигает максимального значения на луче $\theta = 0$ и, следовательно, распространение трещины из вершины выреза будет происходить вдоль этого луча.

Силовой критерий. Аналогично допущениям, принятым в работах [1, 2], будем считать, что разрушение выреза начинается, когда максимальное среднее напряжение, вычисленное на некотором расстоянии d от его вершины, достигает критического значения, равного пределу прочности материала на сдвиг τ_c:

$$\bar{\tau} = \frac{1}{d}\int_0^d \max_{-\alpha<\theta<\alpha} \tau_{\theta z}(r,\theta)dr = \tau_c. \qquad (10)$$

Подставим в выражение (10) напряжение $\tau_{\theta z}$, найденное по формуле (3) при $\theta = 0$; получаем следующее равенство:

$$\frac{K_{3c}^{N}(\alpha) r_0^{\lambda}}{\sqrt{2\pi}\lambda d} \operatorname{arctg}\left(\frac{d}{r_0}\right)^{\lambda} = \tau_c. \quad (11)$$

Оно справедливо при любом значении угла $\alpha \in (\pi/2, \pi]$. Определим параметр d для угла $\alpha = \pi$, т. е. в случае трещины, когда $\lambda = 1/2$, а $K_{3c}^{N}(\pi) = K_{3c}$, т. е. вязкости разрушения по моде III. Тогда из условия (11) получаем следующее уравнение для определения относительного расстояния $x = d/r_0$:

$$x = \gamma \operatorname{arctg}\sqrt{x}. \quad (12)$$

Здесь введен безразмерный параметр

$$\gamma = \sqrt{\frac{2}{\pi r_0}} \frac{K_{3c}}{\tau_c}, \quad (13)$$

аналог которого использовался для случая плоской задачи в работе [12], где вместо расстояния r_0 до точки приложения нагрузки применялся другой линейный размер – глубина выреза. Этот параметр в статье [12] был назван параметром, или числом хрупкости материала.

Оценим величину γ на примере такого хрупкого материала, как графит. Вязкость разрушения графита по моде III, согласно работе [18], имеет значение $K_{3c} = 0{,}415$ МПа·м$^{1/2}$. Учитывая, что $\tau_c = \sqrt{3}\sigma_c$ (σ_c – предел прочности на растяжение, принимающий для графита значение 20 МПа [19]), получаем, согласно формуле (13), $\gamma = 0{,}0287/\sqrt{r_0}$. Отсюда, например при $r_0 = 0{,}01$ м, имеем значение $\gamma = 0{,}287$.

Используя критериальное соотношение (11) и представления (7), получаем оценку для отношения критических сил в случае выреза и трещины:

$$\frac{T_c^N}{T_c} = \frac{x}{\gamma \operatorname{arctg}(x^{\lambda})}. \quad (14)$$

При $\gamma \ll 1$ корень уравнения (12) может быть представлен в виде

$$x = \gamma^2 + O(\gamma^3)$$

и, следовательно, асимптотика относительной критической нагрузки (14) будет определяться формулой

$$\frac{T_c^N}{T_c} = \gamma^{1-2\lambda}. \quad (15)$$

Поскольку при любом значении угла α из интервала $\pi/2 < \alpha \le \pi$ величина λ лежит в диапазоне $1/2 \le \lambda < 1$, то справедливы неравенства $-1 < 1 - 2\lambda \le 0$. Тогда из формулы (15) вытекает, что для разрушения острого выреза при малых значениях параметра γ необходимо приложить бóльшие по величине силы, по сравнению с силами, требующимися для распространения трещины. Иными словами, трещину, рассматриваемую как предельный случай выреза при $\alpha \to \pi$, можно считать самым опасным из вырезов. Этот вывод качественно согласуется с результатом, полученным при одноосном растяжении выреза в работе [12].

Отметим, что, если в критерии разрушения (10) использовать только сингулярные члены разложения напряжений (3), т. е. асимптотики (8), то для предельной нагрузки также получим равенство (15). Таким образом, при не слишком малых расстояниях $\mathbf{r}_0$ от вершины выреза до точек приложения сил, оценки разрушающей нагрузки, построенные на основе точного и асимптотического решений, совпадают.

Энергетический критерий. Разрушение выреза путем образования трещины начнется, когда средняя плотность энергии деформации, вычисленная в конечном объеме радиуса R с центром в вершине выреза, достигнет критической величины Π_c [6]:

$$\frac{1}{2\mu\alpha R^2} \int_0^R \int_{-\alpha}^{\alpha} (\tau_{rz}^2 + \tau_{\theta z}^2) r dr d\theta = \Pi_c, \quad (16)$$

где μ – модуль сдвига материала.

Радиус контрольного объема R зависит от свойств материала.

Критическое значение средней плотности энергии деформации в предположении, что оно не зависит от угла раствора выреза, можно выразить через предел прочности материала на сдвиг τ_c:

$$\Pi_c = \tau_c^2/(2\mu).$$

Тогда, используя представления для напряжений (3) для критического состояния материала и вычисляя интегралы в критерии (16), придем к равенству

$$\frac{(K_{3c}^N)^2 r_0^{2\lambda}}{8\lambda^2 \alpha R^2} \ln \frac{1+(R/r_0)^{2\lambda}}{1-(R/r_0)^{2\lambda}} = \tau_c^2. \qquad (17)$$

В предельном случае, когда вырез вырождается в трещину, т. е. при $\alpha = \pi$ и, значит, когда $K_{3c}^N(\pi) = K_{3c}$, равенство (17) дает уравнение для определения радиуса контрольного объема:

$$y = \frac{\gamma}{2}\sqrt{\ln\frac{1+y}{1-y}}, \quad y = \frac{R}{r_0}. \qquad (18)$$

С учетом равенства (7) и уравнения (18) условие (17) приводит к следующей оценке разрушающей нагрузки для выреза:

$$\frac{T_c^N}{T_c} = \sqrt{\frac{2}{\lambda}}\,\frac{y}{\gamma}\Bigg/\sqrt{\ln\frac{1+y^{2\lambda}}{1-y^{2\lambda}}}. \qquad (19)$$

Из формулы (19) получаем при $y = R/r_0 << 1$, что

$$\frac{T_c^N}{T_c} = \frac{1}{f(\lambda)}\gamma^{1-2\lambda}, \qquad (20)$$

причем функция $f(\lambda) = 2^{1-\lambda}\sqrt{\lambda} \ge 1$ для любого $\lambda \in [0{,}5;\, 1{,}0]$.

Тогда, сравнивая оценки (15) и (20), заключаем, что предельная нагрузка, полученная на основе силового критерия, превосходит предельную нагрузку, найденную с помощью критерия средней плотности энергии, при любом угле $\alpha \in (\pi/2, \pi]$.

Заметим, что применение энергетического критерия (16) при использовании только асимптотических представлений (8) также приводит к оценке вида (20).

Критерий, базирующийся на финитной механике разрушения [12]. В данном случае предполагается, что при конечном продвижении Δ трещины из вершины выреза должны одновременно выполняться два условия: силовое и энергетическое (для напряжений и энергетического баланса):

$$\int_0^\Delta \tau_{\theta z}(r,0)\,dr \ge \tau_c \Delta,$$
$$\int_0^\Delta K_3^2(\varepsilon)\,d\varepsilon \ge K_{3c}^2 \Delta, \qquad (21)$$

где $K_3(\varepsilon)$ – коэффициент интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины длины ε.

Таким образом, для использования этого критерия необходимо, кроме поля напряжений (3), иметь еще решение задачи о трещине конечной длины ε, исходящей из вершины выреза (рис. 1).

Применяем теперь интегральное преобразование Меллина к гармоническому уравнению равновесия, условию (1) на грани $\theta = \alpha$ и к следующим смешанным условиям на луче $\theta = 0$:

$$\tau_{\theta z}(r, +0) = 0 \quad (0 \le r \le \varepsilon),$$
$$w(r, +0) = 0 \quad (\varepsilon \le r < \infty).$$

В результате приходим к уравнению Винера – Хопфа:

$$\operatorname{ctg}(p\alpha)\ T_-(p) + \frac{\mu}{\varepsilon} U_+(p) = \frac{T r_0^p}{\varepsilon^{p+1}\sin(p\alpha)} \quad (p \in L). \qquad (22)$$

Здесь p – параметр преобразования Меллина. Трансформанты напряжений $T_-(p)$ и перемещений $U_+(p)$ на луче $\theta = 0$ являются аналитическими функциями в левой и правой (относительно контура L) полуплоскостях.

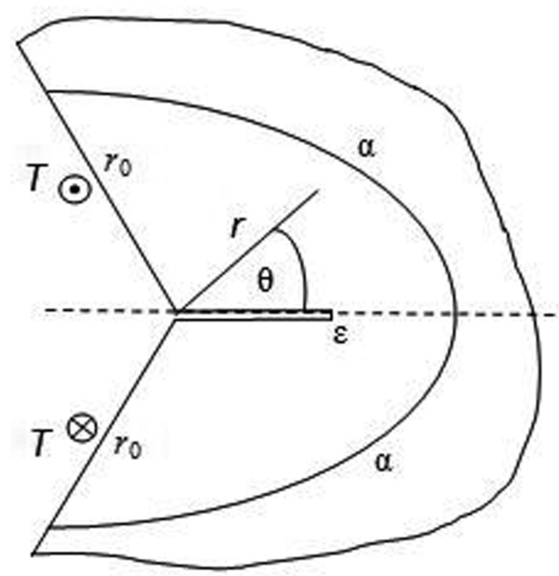


Рис. 1. Острый вырез с симметричной трещиной длиной ε, исходящей из его вершины; 2α – угол раствора клиновидной области; r_0 – расстояние от вершины до точки приложения сосредоточенных сил T, выходящих из плоскости; r, θ – координаты

Используя технику, развитую в работе [20], получим точное решение уравнения (22), которое позволяет выразить КИН в вершине трещины как

$$K_3 = K_3^N \psi(\lambda)\varepsilon^{\lambda-1/2}, \tag{23}$$

где $\psi(\lambda) = \{2\lambda[1+(\varepsilon/r_0)^{2\lambda}]\}^{-1/2}$.

В результате подстановки напряжения (3) и КИН (23) в критерий (21) (при критическом состоянии выреза) получим равенства

$$\begin{gathered} K_{3c}^N \frac{r_0^\lambda}{\lambda\sqrt{2\pi}} \operatorname{arctg}(\Delta/r_0)^\lambda = \tau_c\Delta, \\ (K_{3c}^N)^2 \frac{r_0^{2\lambda}}{4\lambda^2} \ln[1+(\Delta/r_0)^{2\lambda}] = K_{3c}^2\Delta. \end{gathered} \tag{24}$$

Отсюда приходим к уравнению, определяющему относительное продвижение трещины $\varsigma = \Delta/r_0$:

$$\varsigma = \gamma^2 \frac{\operatorname{arctg}^2\varsigma^\lambda}{\ln(1+\varsigma^{2\lambda})}. \tag{25}$$

С помощью равенств (7) находим из первого уравнения (24) относительную разрушающую нагрузку в виде

$$\frac{T_c^N}{T_c} = \frac{\varsigma}{\gamma \operatorname{arctg}\varsigma^\lambda}. \tag{26}$$

Заметим, что при $\varsigma \ll 1$ уравнение (25) имеет корень $\varsigma \approx \gamma^2$. В этом случае равенство (26) приводит к следующей оценке разрушающей нагрузки:

$$\frac{T_c^N}{T_c} = \gamma^{1-2\lambda},$$

которая совпадает с формулой (15) при использовании силового критерия разрушения.

Угол начального направления трещины при несимметричном нагружении выреза

Для определения начального угла распространения трещины из вершины выреза в случае его несимметричного нагружения воспользуемся, например, силовым критерием, который был предложен в рамках плоской задачи [5]. Инициализация трещины происходит вдоль луча $\theta = \theta_*$, где среднее касательное напряжение принимает максимальное значение:

$$\bar{\tau}_{\theta z}(\theta) = \frac{1}{d}\int_0^d \max_{-\alpha<\theta<\alpha} \tau_{\theta z}(r,\theta)dr, \tag{27}$$

$$\left.\frac{\partial\bar{\tau}_{\theta z}(\theta)}{\partial\theta}\right|_{\theta=\theta_*} = 0. \tag{28}$$

Подставляя выражение (9) в формулу (27), получаем для среднего касательного напряжения следующее представление:

$$\begin{gathered} \bar{\tau}_{\theta z}(\theta) = \frac{K_3^N r_0^\lambda}{\sqrt{2\pi}\lambda d} \times \\ \times\left[\operatorname{arctg}\frac{(d/r_0)^\lambda - \sin\lambda\theta}{\cos\lambda\theta} + \lambda\theta\right]. \end{gathered} \tag{29}$$

Отсюда после использования условия (28) находим угол θ_*, определяющий направление начального роста трещины:

$$\theta_* = \frac{1}{\lambda}\arcsin(d/r_0)^\lambda. \tag{30}$$

Заметим, что из критерия разрушения (10) и формул (29) и (30) вытекает следующая оценка разрушающей нагрузки:

$$\frac{T_c^N}{T_c} = \frac{x}{\gamma\ \arcsin(x^\lambda)},$$

где $x = d/r_0$ является корнем уравнения

$$x = \gamma \arcsin\sqrt{x}.$$

Численные результаты и их обсуждение

На основе трех рассмотренных критериев проведено вычисление разрушающих нагрузок при симметричном нагружении выреза в зависимости от параметра γ и различных углов α. Сравнительный анализ результатов, базирующихся на точном решении задачи (3), показывает, что при малых значениях параметра $(\gamma < 0{,}1)$ все критерии дают близкие результаты и максимальное расхождение не превышает 3 %. При этом разрушающая нагрузка, согласно формулам (15) и (20), имеет асимптотическую оценку

$$T_c^N/T_c = O(\gamma^{1-2\lambda}).$$

С увеличением параметра γ относительная предельная нагрузка снижается, а ее значения, определяемые с помощью критериев (10), (16) и (21), расходятся.

Критерий, основанный на финитной механике разрушения, дает наибольшее значение этой нагрузки, а критерий средней плотности энергии деформации обеспечивает оценку нагрузки снизу. Так например, при $\gamma = 0{,}8$ и вырезе с углом 90° разница в оценках величины T_c^N / T_c на основе этих критериев составляет около 13 %.

Значения разрушающих нагрузок для выреза, найденные с помощью асимптотик напряжений (8), практически совпадают, вплоть до $\gamma = 0{,}5$, со значениями, вычисленными на основе точного решения (3).

Таким образом, применение асимптотик полей напряжений вблизи вершины выреза для оценки разрушающей нагрузки в рамках антиплоской задачи является вполне допустимым.

При несимметричном нагружении граней выреза начальный угол распространения трещины является величиной, существенно зависящей от регулярных членов в представлении напряжений (9). Использование только асимптотик полей (9) в форме (8) с помощью критерия (27), (28) определяет начальный угол $\theta_*^{as} = 0$. Однако этот угол, вычисляемый на основе точного решения (9) по формуле (30), может значительно отличаться от величины θ_*^{as} (рис. 2). Отсюда вытекает, что при нахождении направления начального роста трещины из вершины выреза учет несингулярных слагаемых при $r \to 0$ в формулах для напряжений является обязательным.

Заключение

В представленной статье рассмотрены критерии хрупкого разрушения острого выреза при его антиплоском нагружении сосредоточенными силами: а) максимального среднего напряжения, б) средней плотности энергии деформации, в) подхода, основанного на совместном использовании силового и энергетического критериев.

Показано, что разрушающие нагрузки, получаемые в результате применения различных критериальных соотношений, выражаются через один безразмерный параметр, определяемый константами материала – пределом прочности на сдвиг и вязкостью разрушения по моде III. При этом

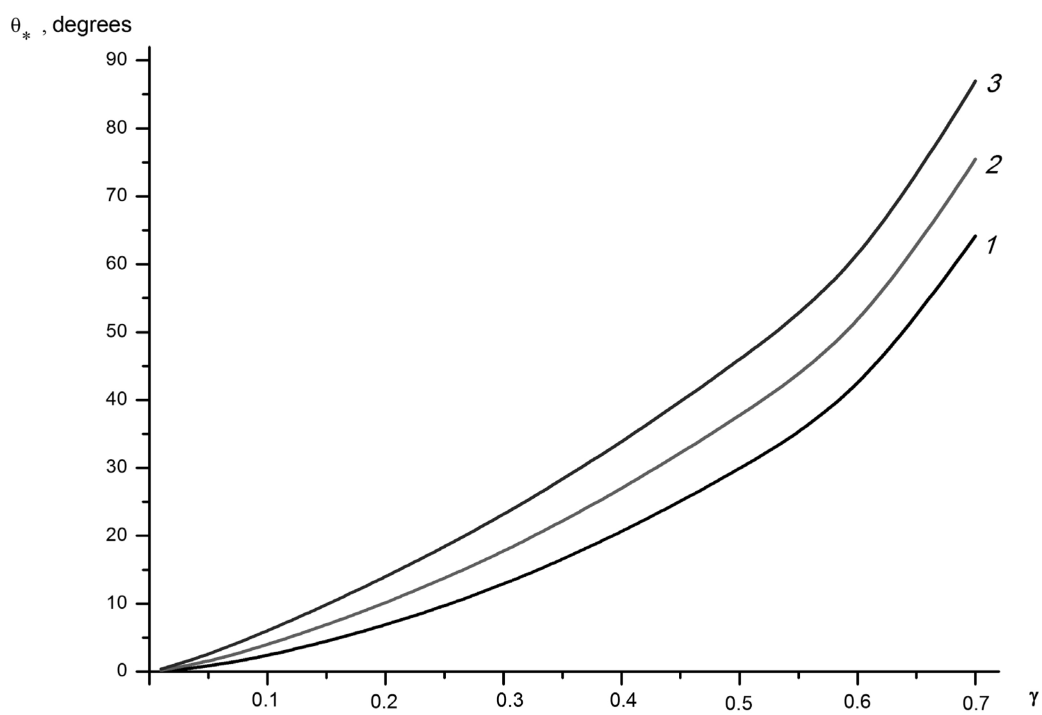


Рис. 2. Зависимости начального угла распространения трещины из вершины выреза от параметра γ при различных углах раствора выреза α, град: 120 (*1*) 135 (*2*), 150 (*3*)

величины предельных нагрузок, найденные с помощью разных подходов, оказываются достаточно близкими.

Однако угол начального распространения трещины из вершины выреза существенно зависит от точности вычисления напряжений вблизи этой вершины, т. е. расчет этого угла на основе асимптотик напряжений приводит к существенным погрешностям.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Новожилов В.В.** О необходимом и достаточном критерии хрупкой прочности // Прикладная математика и механика. 1969. Т. 33. № 2. С. 212–222.

2. **Knesl Z.** A criterion of V-notch stability // Int. J. Fract. 1991. Vol. 48. No. 4. Pp. R79–R83.

3. **Sewerin A.** Brittle fracture criterion for structures with sharp notches // Eng. Fract. Mech. 1994. Vol. 47. No. 5. Pp. 673–681.

4. **Dunn M.L., Suwito W., Cunningham S.J.** Fracture initiation at sharp notches: correlation using critical stress intensities // Int. J. Solids Struct. 1997. Vol. 34. No. 29. Pp. 3873–3883.

5. **Klusak J., Profant T., Kotoul M.** Determination of the threshold values of orthotropic bi-material notches // Proc. Engineering. 2010. Vol. 2. No. 1. Pp. 1635–1642.

6. **Lazzarin P., Zambardi R.** A finite-volume-energy based approach to predict the static and fatigue behavior of components with sharp V-shaped notches // Int. J. Fract. 2001. Vol. 112. No. 3. Pp. 275–298.

7. **Yosibash Z., Bussiba A., Giland I.** Failure criteria for brittle elastic materials // Int. J. Fract. 2004. Vol. 125. No. 2. Pp. 307–333.

8. **Treifi M., Oyadiji O.** Strain energy approach to compute stress intensity factors for isotropic homogeneous and bi-material V-notches // Int. J. Solids Struct. 2013. Vol. 50. No. 14–15. Pp. 2196–2212.

9. **Lazzarin P., Campagnolo A., Berto F.** A comparison among some recent energy- and stress-based criteria for the fracture assessment of sharp V-notched components under Mode I loading // Theor. Appl. Fract. Mech. 2014. Vol. 71. No. 1. Pp. 21–30.

10. **Campagnolo A., Berto F., Leguillon D.** Fracture assessment of sharp V-notched components under Mode II loading: a comparison among some recent criteria // Theor. Appl. Fract. Mech. 2016. Vol. 85. Part B. Pp. 217–226.

11. **Garsia I.G., Leguillon D.** Mixed-mode crack initiation at a V-notch in presence of an adhesive joint // Int. J. Solids Struct. 2012. Vol. 49. No. 15–16. Pp. 2138– 2149.

12. **Carpinteri A., Cornetti P., Pugno N., Sapora A.** On the most dangerous V-notch // Int. J. Solids Struct. 2010. Vol. 47. No. 7–8. Pp. 887–893.

13. **Ayatollahi M.R., Dehghany M., Nejati M.** Fracture analysis of V-notched components – effects of first non-singular stress term // Int. J. Solids Struct. 2011. Vol. 48. No. 10. Pp. 1579–1589.

14. **Mirsayar M.M., Aliha M.R.M., Samaei A.T.** On fracture initiation angle near bimaterial notches – effects of first non-singular stress term // Eng. Fract. Mech. 2014. Vol. 119. No. 1. Pp. 124–131.

15. **Zappalorto M., Lazzarin P.** A unified approach to the analysis of nonlinear stress and strain fields ahead of mode III-loaded notches and cracks // Int. J. Solids Struct. 2010. Vol. 47. No. 6. Pp. 851–864.

16. **Shi W.** Path-independent integral for the sharp V-notch in longitudinal shear problem // Int. J. Solids Struct. 2011. Vol. 48. No. 3–4. Pp. 567– 572.

17. **Chuo C-H., Wei W-B., Liu T.J-C.** The antiplane electro-mechanical field of a piezoelectric wedge under a pair of concentrated forces and free charges // J. Chin. Inst. Eng. 2003. Vol. 26. No. 5. Pp. 575–583.

18. **Aliha M.R.M., Bahmani A., Akhondi S.** Determination of mode III fracture toughness for different materials using a new designed test configuration // Mat. Design. 2015. Vol. 86. Pp. 863–871.

19. **Morrison C.N., Jivkov A.P., Vertyagina Ye., Marrow T.J.** Multi-scale modelling of nuclear graphite tensile strength using the site-bond lattice model // Carbon. 2016. Vol. 100. Pp. 273–282.

20. **Тихомиров В.В.** Трещина моды III, приближающаяся к упругому клиновидному включению // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 2. С. 99–109.

Статья поступила в редакцию 19.03.2018, принята к публикации 20.05.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ТИХОМИРОВ Виктор Васильевич – *кандидат физико-математических наук, заместитель директора по образовательной деятельности Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

victikh@mail.ru

REFERENCES

[1] **V.V. Novozhilov,** On the necessary and sufficient criterion for brittle strength, J. Appl. Math. Mech. 33 (2) (1969) 212 –222.

[2] **Z. Knesl,** A criterion of V-notch stability, Int. J. Fract. 48 (4) (1991) R79–R83.

[3] **A. Sewerin,** Brittle fracture criterion for structures with sharp notches, Eng. Fract. Mech. 47 (5) (1994) 673–681.

[4] **M.L. Dunn, W. Suwito, S.J. Cunningham,** Fracture initiation at sharp notches: Correlation using critical stress intensities, Int. J. Solids Struct. 34 (29) (1997) 3873–3883.

[5] **J. Klusak, T. Profant, M. Kotoul,** Determination of the threshold values of orthotropic bi-material notches, Proc. Engineering. 2 (1) (2010) 1635–1642.

[6] **P. Lazzarin, R. Zambardi,** A finite-volume-energy based approach to predict the static and fatigue behavior of components with sharp V-shaped notches, Int. J. Fract. 112 (3) (2001) 275–298.

[7] **Z. Yosibash, A. Bussiba, I. Giland,** Failure criteria for brittle elastic materials, Int. J. Fract. 125 (2) (2004) 307–333.

[8] **M. Treifi, O. Oyadiji,** Strain energy approach to compute stress intensity factors for isotropic homogeneous and bi-material V-notches, Int. J. Solids Struct. 50 (14–15) (2013) 2196– 2212.

[9] **P. Lazzarin, A. Campagnolo, F. Berto,** A comparison among some recent energy- and stress-based criteria for the fracture assessment of sharp V-notched components under Mode I loading, Theor. Appl. Fract. Mech. 71 (1) (2014) 21–30.

[10] **A. Campagnolo, F. Berto, D. Leguillon,** Fracture assessment of sharp V-notched components under Mode II loading: a comparison among some recent criteria, Theor. Appl. Fract. Mech. 85 B (2016) 217–226.

[11] **I.G. Garsia, D. Leguillon,** Mixed-mode crack initiation at a V-notch in presence of an adhesive joint, Int. J. Solids Struct. 49 (15–16) (2012) 2138– 2149.

[12] **A. Carpinteri, P. Cornetti, N. Pugno, A. Sapora,** On the most dangerous V-notch, Int. J. Solids Struct. 47 (7–8) (2010) 887–893.

[13] **M.R. Ayatollahi, M. Dehghany, M. Nejati,** Fracture analysis of V-notched components – effects of first non-singular stress term, Int. J. Solids Struct. 48 (10) (2011) 1579–1589.

[14] **M.M. Mirsayar, M.R.M. Aliha, A.T. Samaei,** On fracture initiation angle near bi-material notches – effects of first non-singular stress term, Eng. Fract. Mech. 119 (1) (214) 124–131.

[15] **M. Zappalorto, P. Lazzarin,** A unified approach to the analysis of nonlinear stress and strain fields ahead of mode III-loaded notches and cracks, Int. J. Solids Struct. 47 (6) (2010) 851– 864.

[16] **W. Shi,** Path-independent integral for the sharp V-notch in longitudinal shear problem, Int. J. Solids Struct. 48 (3-4) (2011) 567–572.

[17] **C-H. Chuo, W-B. Wei, T.J-C. Liu,** The antiplane electro-mechanical field of a piezoelectric wedge under a pair of concentrated forces and free charges, J. Chin. Inst. Eng. 26 (5) (2003) 575–583.

[18] **M.R.M. Aliha, A. Bahmani, S. Akhondi,** Determination of mode III fracture toughness for different materials using a new designed test configuration, Mat. Design. 86 (2015) 863–871.

[19] **C.N. Morrison, A.P. Jivkov, Ye. Vertyagina, T.J. Marrow,** Multi-scale modelling of nuclear graphite tensile strength using the site-bond lattice model, Carbon. 100 (2016) 273–282.

[20] **V.V. Tikhomirov,** Mode III crack approaching to the wedge-shaped elastic inclusion, St. Petersburg Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 10 (2) (2017) 99–109.

Received 19.03.2018, accepted 20.05.2018.

THE AUTHOR

TIKHOMIROV Victor V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
victikh@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.11310
УДК 532.5.013.4

ЛИНЕЙНАЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ДАЛЬНЕГО ПОЛЯ ЗАТОПЛЕННОЙ ЛАМИНАРНОЙ СТРУИ

Р.И. Мулляджанов, Н.И. Яворский

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе, СО РАН
г. Новосибирск, Российская Федерация

Рассмотрена линейная задача устойчивости для затопленной струи Ландау – Сквайра. Показано, что амплитуда собственных возмущений изменяется в пространстве степенным образом как функция сферического радиуса *R*, отсчитываемого от источника движения. Установлено, что инкремент синусоидальных возмущений становится выше, чем у осесимметричных возмущений, при $\mathrm{Re}_D > 31$. Предложен модельный критерий ламинарно-турбулентного перехода в дальней области струи, который позволил впервые получить хорошее согласие между результатами линейной теории устойчивости и экспериментальными данными при $\mathrm{Re}_D < 2000$ для значения координаты ламинарно-турбулентного перехода как функции числа Рейнольдса.

Ключевые слова: ламинарная струя, решение Ландау, гидродинамическая устойчивость, дальнее поле

Ссылка при цитировании: Мулляджанов Р.И., Яворский Н.И. Линейная гидродинамическая устойчивость дальнего поля затопленной ламинарной струи // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 108–121. DOI: 10.18721/JPM.11310

THE FAR FIELD OF A SUBMERGED LAMINAR JET: LINEAR HYDRODYNAMIC STABILITY

R.I. Mullyadzhanov, N.I. Yavorsky

Kutateladze Institute of Thermal Physics, Novosibirsk, Russian Federation

A linear stability problem for a submerged Landau – Squire jet has been considered. It was shown that in the space, the intrinsic perturbation amplitude varied as a power function of the spherical radius *R*, read from the motion source. It was established that the increment in the sinusoidal disturbance became more than that for axisymmetric one for Re _*D* > 31. The linear stability theory was applied to the value of the laminar-turbulent transition coordinate as a function of the Reynolds number. A model criterion for a laminar-turbulent transition in the far jet region was proposed. For the first time, this made it possible to obtain a good agreement between the theoretical results and experimental data for Re_*D* < 2000.

Key words: laminar jet, Landau solution, hydrodynamic stability, far field

Citation: R.I. Mullyadzhanov, N.I. Yavorsky, The far field of a submerged laminar jet: Linear hydrodynamic stability, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 108–121. DOI: 10.18721/JPM.11310

Введение

В теории гидродинамической устойчивости исследуются условия, при которых один режим течения жидкости или газа сменяется другим [1 – 3]. Такие ситуации часто реализуются в широком спектре природных явлений и технических устройств, поэтому новые результаты в этой области имеют многочисленные фундаментальные и практические приложения. Свободные сдвиговые течения относятся к одному из широчайших классов в гидродинамике, в котором струйные потоки занимают центральное место. Классическая задача об устойчивости круглой затопленной ламинарной струи, вытекающей из локализованного источника, до сих пор не имеет окончательного решения, что побуждает ученых к дальнейшим исследованиям.

Экспериментально показано, что круглая струя теряет устойчивость при относительно небольших скоростях потока. Одним из первых, кто проводил соответствующие эксперименты, был Г. Шаде; они описаны в работе [4]. Его опыты указали на возможность получить устойчивое струйное течение при числах Рейнольдса в несколько сотен. Далее, в 1962 году, А. Виилу [5] получил результат, несколько противоречащий данным Шаде, определив критическое число Рейнольдса в диапазоне всего лишь 10,5 – 11,8. В том же году результаты аналогичных экспериментов опубликовал А.Дж. Рейнольдс [6], который привел достаточно детальное описание сценариев потери устойчивости потока.

В подобных экспериментах входные условия часто реализуются при помощи длинной трубы, профиль скорости на выходе из которой должен быть близок к параболическому профилю Пуазейля. Однако выходные характеристики сильно зависят от длины подводящей трубки.

Относительно недавняя серия экспериментов [7, 8] отличается тщательным исследованием выходного профиля скорости. Измерения показали, что длина подводящей трубки, составляющей около 200 диаметров канала, оказывается достаточной, чтобы сформировать параболический профиль скорости вплоть до чисел Рейнольдса порядка 6700. Кроме того, было установлено, что при высоких значениях скорости потока и достаточно близко к соплу, начинает развиваться неосесимметричная мода, визуализированная в поперечном сечении.

В экспериментах В.В. Леманова и др. [9] изучались затопленные струи, вытекающие из подводящей трубки длиной $100D$ (D – диаметр трубки). Кроме того, была проведена визуализация течения и показано, что при увеличении числа Рейнольдса область устойчивого ламинарного течения сокращается. При этом обнаружено (в согласии с результатами предыдущих авторов), что в области, расположенной перед окончательной турбулизацией струи, начинают возрастать синусоидальные возмущения. Экспериментальные данные этой работы будут далее нами использоваться для качественного и количественного сравнения с представленной ниже теорией.

Аналитическое исследование этой задачи началось с работы Дж.К. Бэтчелора и А.Е. Гилла [5], в которой авторы установили, что в невязком случае неустойчивой модой в дальнем поле является только синусоидальное возмущение. Однако они указали, что учет расширения струи вниз по потоку может несколько изменить выводы, полученные при помощи плоскопараллельного приближения.

Т. Татсуми и Т. Какутани [10] отмечают, что анализ устойчивости непараллельных потоков недостаточно развит в теории гидродинамической устойчивости, в рамках которой даже такие течения, как струи и следы рассматриваются как квазипараллельные. Ч.-Х. Линг и У.К. Рейнольдс [11] развили подход, при котором учитывается расширение потока в рамках теории возмущения. В.К. Гарг [12] использовал более общий подход, который применялся только к (двумерной) струе У.Г. Бикли [13]. В отличие от двумерного случая, где характеристики возмущений меняются с продольной координатой неавтомодельным образом и необходимо использовать некоторые приближения [14, 15], в трехмерном случае общий вид возмущений может быть выписан при помощи соображений автомодельности. Впервые такой анализ был выполнен О.А. Лихачёвым [16] для струи Шлихтинга. Помимо неустойчивых возмущений с $m = 1$ (m – азимутальное волновое число), были обнаружены неустойчивые осесимметричные моды с $m = 0$. И хотя осесимметричные возмущения оказались наиболее неустойчивыми только в небольшом диапазоне довольно малых чисел Рейнольдса, это позволило качественно объяснить экспериментально наблюдаемые осесимметричные пульсации, описанные У.К. Рейнольдсом. Напомним, что при относительно больших значениях чисел Re наиболее опасными становятся возмущения при $m = 1$. В данном анализе использовано решение Шлихтинга, которое является аналогом точного решения Ландау в приближении пограничного слоя.

В. Штерн и Ф. Хуссейн [17] провели аналогичный анализ для струи Ландау. В отличие от прежних работ, где зависимости возмущения v от продольной координаты имели вид $v \propto e^{ik(x)x}$ (x – координата вдоль направления распространения струи, $k(x)$ – продольное волновое число), при котором максимальное значение v уменьшается вниз по течению, эти исследователи рассмотрели возмущения вида $v \propto e^{ik(R)\ln R}$ (R – сферический радиус), опираясь на предыдущие работы для двумерного случая [14, 15]. Таким образом, авторы исследовали возмущения со степенной зависимостью от R и получили результаты, аналогичные представленным в работе [16]. Однако они рассмотрели только нейтральные решения (мнимая часть $k = 0$).

Помимо нестандартной зависимости от пространственной координаты, возмущения также не будут иметь (чисто) экспоненциальную зависимость от времени. Таким образом, анализ устойчивости не является модальным, что следует из того факта, что характерное время в струйной задаче увеличивается как $(R/|\mathbf{u}|) \propto R^2$ вниз по течению, где $|\mathbf{u}|$ – значение локальной скорости на оси струи. Вместе с основным течением, эволюционируют и возмущения, длина волны и характерное время колебания которых также растет с величиной R [12]. На основе выводов работы [16] мы можем заключить, что если необходимо рассмотреть пространственную эволюцию малого возмущения фиксированной частоты ω_0, то нейтральная кривая $\omega_0(\mathrm{Re})$ и масштабное подобие $\omega_0 \propto R^{-2}$ определят диапазон изменения R, в котором это возмущение будет расти, для данного значения числа Re.

Это утверждение подтверждено трехмерными расчетами задачи устойчивости [18]. Кроме того, в работе [19] имеется важное замечание, что расчеты задачи устойчивости в неограниченных областях сильно осложняются численными трудностями из-за «выходных» граничных условий; последние могут существенно исказить получаемые результаты.

Из анализа вышеприведенного краткого обзора следует, что использование автомодельного вида возмущений позволяет избежать упомянутых численных трудностей. Это утверждение можно рассматривать и в качестве дополнительного аргумента в пользу автомодельного подхода в данной задаче.

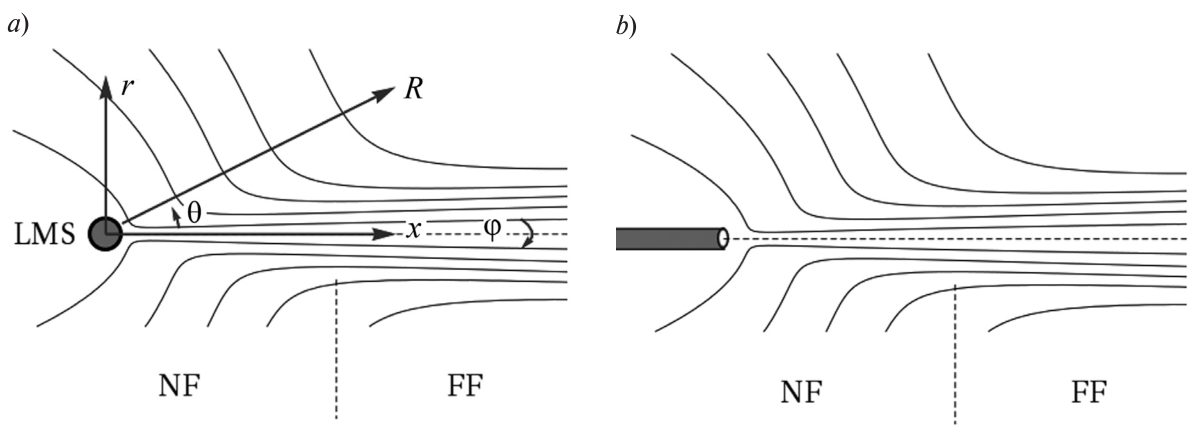


Рис. 1. Графическое представление решения (3):
a – идеализированное осесимметричное струйное течение (показаны линии тока), вызванное локализованным источником движения (LMS), и системы координат (сферическая и цилиндрическая); *b* – одна из реализаций такого течения – струя жидкости, вытекающая из длинной трубы в затопленное пространство; NF, FF – ближнее и дальнее поля, соответственно

Постановка задачи

Исследуется эволюция возмущений **v** некоторого ламинарного поля скорости **U**; при этом полное поле скорости представляется как **u** = **U** + **v**. Подставим это представление в уравнения Навье – Стокса и проведем линеаризацию, считая при этом, что амплитуда возмущения скорости мала, по сравнению с основным потоком. Получаем следующее уравнение:

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{U}\cdot\nabla)\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{U} = -\frac{1}{\rho}\nabla\chi + \nu\Delta\boldsymbol{v}, \quad (1)$$

где χ – возмущение поля давления, ν – кинематическая вязкость, ρ – плотность жидкости.

Поле скорости основного течения описывается точным решением уравнений Навье – Стокса, которое можно представить в сферической системе координат (R,θ,φ):

$$U_R = -\frac{\nu y'(\psi)}{R}, U_\theta = -\frac{\nu y(\psi)}{R\sqrt{1-\psi^2}},$$
$$U_\varphi = 0, y(\psi) = 2\frac{1-\psi^2}{A-\psi}, \quad (2)$$

где $\psi = \cos\theta$.

Параметр A связан с «импульсом» струи P_x следующим образом:

$$P_x = 16\pi\rho\nu^2 A\left[1 + \frac{4}{3(A^2-1)} - \frac{A}{2}\ln\frac{A+1}{A-1}\right]. \quad (3)$$

Это решение было получено Н.А. Слезкиным [20], Л.Д. Ландау [21] и Г.Б. Сквайром [22] и соответствует струйному течению, вызванному точечным источником импульса.

На рис. 1 приведено графическое представление полученного решения. В нашем исследовании оно используется в качестве основного потока, так как его прямое сравнение с экспериментальными данными показало хорошее соответствие в дальнем поле струи [23 – 25].

Поскольку в постановке задачи отсутствует характерная размерность длины, из соображений размерности будем искать возмущения в следующем классе:

$$v_R = \frac{\nu}{R} f(\psi,\eta)e^{im\varphi},$$
$$v_\theta = -\frac{\nu}{R\sqrt{1-\psi^2}} g(\psi,\eta)e^{im\varphi},$$
$$v_\varphi = \frac{\nu}{R} h(\psi,\eta)e^{im\varphi}, \chi = \frac{\rho\nu^2}{R^2} q(\psi,\eta)e^{im\varphi}, \quad (4)$$

где переменная $\eta = \sqrt{(R/\nu t)}$.

Стоит отметить, что переменные ψ и η были также использованы при анализе двумерных [14, 15, 26, 27] и трехмерных [28 – 30] конических течений. При помощи метода разделения переменных можно показать, что в случае $y = 0$ ($A \to \infty$) решение выражается аналитически через полиномы Лежандра по переменной ψ и через гипергеометрические функции по переменной η [31]. Фактически это означает, что решение имеет степенную зависимость от η, что неудивительно, потому что представление поля скорости основного потока, мотивированное соображениями размерности, имеет степенную зависимость R^{-1}. Далее преобразуем степенную зависимость с неким показателем n следующим образом:

$$\eta^n = (R/R_0)^n(\nu t/R_0^2)^{-n/2} =$$
$$= \exp[n\ln(R/R_0) - (n/2)\ln(\nu t/R_0^2)], \quad (5)$$

где R_0 – некоторая постоянная размерности длины (радиус подводящей трубки).

Видно, что в случае $y \neq 0$ целесообразно рассмотреть задачу устойчивости к возмущениям в виде волн в новых переменных:

$$\boldsymbol{v} = (\nu/R)\boldsymbol{v}_0(\psi)\exp(ik\xi - i\omega\ln\tau + im\varphi),$$
$$\xi = \ln(R/R_0), \tau = \nu t/R_0^2, \quad (6)$$

где $\boldsymbol{v}_0$ – безразмерный вектор, зависящий только от угла ψ; k, m – радиальное и азимутальное безразмерные волновые числа; ω – безразмерная частота, τ – безразмерное время.

Тогда компоненты возмущения поля скорости и давления имеют вид:

$$v_R = (\nu/R)f(\psi)\exp(ik\xi - i\omega\ln\tau + im\varphi),$$
$$v_\theta = \frac{\nu}{R\sqrt{1-\psi^2}} g(\psi)\exp(ik\xi - i\omega\ln\tau + im\varphi), \quad (7)$$
$$v_\varphi = \frac{\nu}{R\sqrt{1-\psi^2}} ih(\psi)\exp(ik\xi - i\omega\ln\tau + im\varphi),$$

$$\chi = \frac{\rho\nu^2}{R^2} q(\psi) \exp(ik\xi - i\omega \ln \tau + im\varphi), \qquad (7)$$

где f, g, h, q – безразмерные функции только угловой переменной ψ.

Подставим представление (7) в уравнения (1), и после некоторых преобразований получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}
&i\Omega f + \frac{2mh}{1-\psi^2} + (2-ik)q - 2g' + y''g + \\
&+ \frac{2yg}{1-\psi^2} - \left(2 + ik + k^2 + \frac{m^2}{1-\psi^2}\right) f - \\
&- (2-ik)y'f - yf' - 2\psi f' + (1-\psi^2)f'' = 0; \\
&i\Omega g + mh' + (1-\psi^2)(2f - (1+ik)f') - \\
&- \left(ik + k^2 - \frac{m^2}{1-\psi^2}\right) g - (1-ik)y'g - \\
&- \frac{2\psi yg}{1-\psi^2} - yg' - (1-\psi^2)q' = 0; \\
&i\Omega h - mq + 2mf - \frac{2m\psi g}{1-\psi^2} - \left(ik + k + \frac{m^2}{1-\psi^2}\right) h + \\
&+ iky'h - yh' + (1-\psi^2)h'' = 0; \\
&(1+ik)f + g' - \frac{mh}{1-\psi^2} = 0,
\end{aligned} \qquad (8)$$

где $\Omega = \omega R^2 / (\nu t)$ – некоторый постоянный параметр, играющий роль обобщенной частоты; он включает в себя зависимость от радиуса и времени (пропорционально переменной η^2).

Во втором уравнении системы (8) понижен порядок производной функции g со второго до первого при помощи уравнения неразрывности. Стоит отметить, что уравнения (8) оказываются идентичны уравнениям, полученным В. Штерном и Ф. Хуссейном, где, однако, рассматривалась экспоненциальная зависимость возмущения от времени (точнее от $1/\eta^2$). При выводе потребовалось использовать приближение дальнего поля ($\eta \to \infty$, что эквивалентно $\tau \to 0$) и отбросить ряд слагаемых с высокими степенями τ. В настоящей работе не делается никаких приближений при выводе данных уравнений, кроме того, что Ω считается постоянным параметром.

Для полной постановки задачи система уравнений (8) должна быть дополнена подходящими граничными условиями. Из представления (7) вытекают следующие требования, налагаемые на поле скорости:

$$g(\pm 1) = 0, h(\pm 1) = 0, \qquad (9)$$

они соответствуют требованиям ограниченности функций g и h.

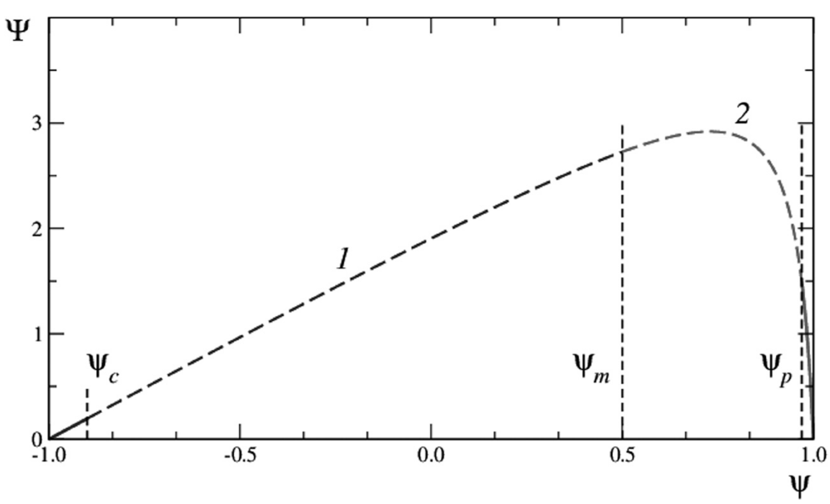


Рис. 2. Схема используемого численного алгоритма:
В диапазонах $\psi \in [-1{,}0; \psi_c]$ и $[\psi_p; 1{,}0]$ используются асимптотические разложения некой пробной функции Ψ в окрестности особых точек $\psi = \pm 1{,}0$; пунктирные кривые *1*, *2* – области дальнейшего численного интегрирования; в точке ψ_m необходимо обеспечить непрерывность значений функции ψ и ее производных

Процедура численного решения

Процедура численного решения полученной системы уравнений схематически изображена на рис. 2. Поскольку точки $\psi = \pm 1{,}0$ являются особыми, необходимо найти асимптотическое разложение функций задачи в их окрестности и сместить начало численного интегрирования. В диапазонах $\psi \in [-1{,}0; \psi_c]$ и $[\psi_p; 1{,}0]$ используются асимптотические разложения некой пробной функции Ψ в окрестности особых точек $\psi = \pm 1{,}0$ (см. разложение (10)). Далее строятся два решения уравнений (8) численным интегрированием от ψ_c до ψ_m и от ψ_p до ψ_m. В точке ψ_m необходимо обеспечить непрерывность значений функции Ψ и ее производных, согласно порядку системы дифференциальных уравнений (см. условия (11)).

Можно показать [32], что для уравнений типа Лежандра функции задачи пропорциональны множителю $(1 - x^2)^{m/2}$ и определенной аналитической (в окрестности $\psi = \pm 1{,}0$) функции, которую, в свою очередь, можно представить в виде ряда Тейлора.

Таким образом, некоторую пробную функцию Ψ (f, g, h или q) в окрестности точки $\psi = 1{,}0$ можно представить в следующем виде:

$$\Psi = (1-\psi^2)^{m/2}(\Psi_0 + \Psi_1(1-\psi) + \\ + \Psi_2(1-\psi^2) + \Psi_3(1-\psi^3) + \ldots), \tag{10}$$

где комплекснозначные коэффициенты разложения $\Psi_0, \Psi_1, \Psi_2, \Psi_3$ определяются при подстановке функции (10) в систему уравнений (8). Некоторые параметры остаются неопределенными (свободными); их следует находить уже при непосредственном решении спектральной задачи.

Разложение, аналогичное выражению (10), можно выписать и в окрестности точки $\psi = -1{,}0$. Далее для выбранных значений A (в функции y), Ω и набора свободных параметров надо построить два численных решения, при этом интегрирование уравнений (8) начинается из точек $\psi_c = -1{,}0 + \varepsilon_c$ и $\psi_p = 1{,}0 - \varepsilon_p$, где ε_c и ε_p – малые параметры (в диапазоне 10^{-5} – 10^{-3}). В некоторой точке ψ_m ($\psi_m = 0{,}9$ для найденных ниже решений), выбор которой не влияет на результат, необходимо удовлетворить условиям непрерывности функций задачи и их производных, согласно порядку системы обыкновенных дифференциальных уравнений. А именно, необходимо выполнить следующие условия:

$$\begin{gathered} f_-(\psi_m) = f_+(\psi_m),\ f'_-(\psi_m) = f'_+(\psi_m), \\ g_-(\psi_m) = g_+(\psi_m), \\ h_-(\psi_m) = h_+(\psi_m),\ h'_-(\psi_m) = h'_+(\psi_m), \\ q_-(\psi_m) = q_+(\psi_m), \end{gathered} \tag{11}$$

где плюс и минус соответствуют решениям, полученным при интегрировании системы уравнений из точек ψ_p и ψ_c, соответственно.

Условия (11) достигаются варьированием свободных параметров и волнового числа $k = k_{re} + ik_{im}$ при помощи метода Ньютона. Аналогичная схема расчета была использована нами в работе [33].

Результаты и их обсуждение

Растущие возмущения (при $-k_{im} > 0$) были обнаружены только для азимутальных волновых чисел $m = 0$ и $m = 1$, как и в работе [17], в которой, однако, исследовались только нейтральные возмущения ($k_{im} = 0$). Таким образом, в работе [17] зависимость $k_{im}(\mathrm{Re})$ не была проанализирована, что как раз позволяет нам провести полноценное сравнение с экспериментальными данными, как будет показано ниже. В данной задаче удобно использовать число Рейнольдса, построенное по скорости на оси и расстоянию от начала координат:

$$\mathrm{Re} = \frac{U_R R}{\nu}\Big|_{\psi=1} = -y'(1) = -\frac{4}{A-1}, \tag{12}$$

согласно точному решению (2).

На рис. 3 показаны дисперсионные кривые $-k_{im}(\Omega)$ для различных чисел Рейнольдса Re и $m = 0$. При увеличении числа Рейнольдса выше критического значения $\mathrm{Re}_{crit}^{m=0} = 26{,}20$ появляется диапазон значений Ω, для которых существуют решения, у которых $-k_{im} > 0$. Следует отметить, что в работе [17] указано, что $\mathrm{Re}_{crit}^{m=0} = 28{,}1$. Небольшое отличие можно объяснить недостаточно аккуратным алгоритмом расчета спектральной задачи, используемым в ра-

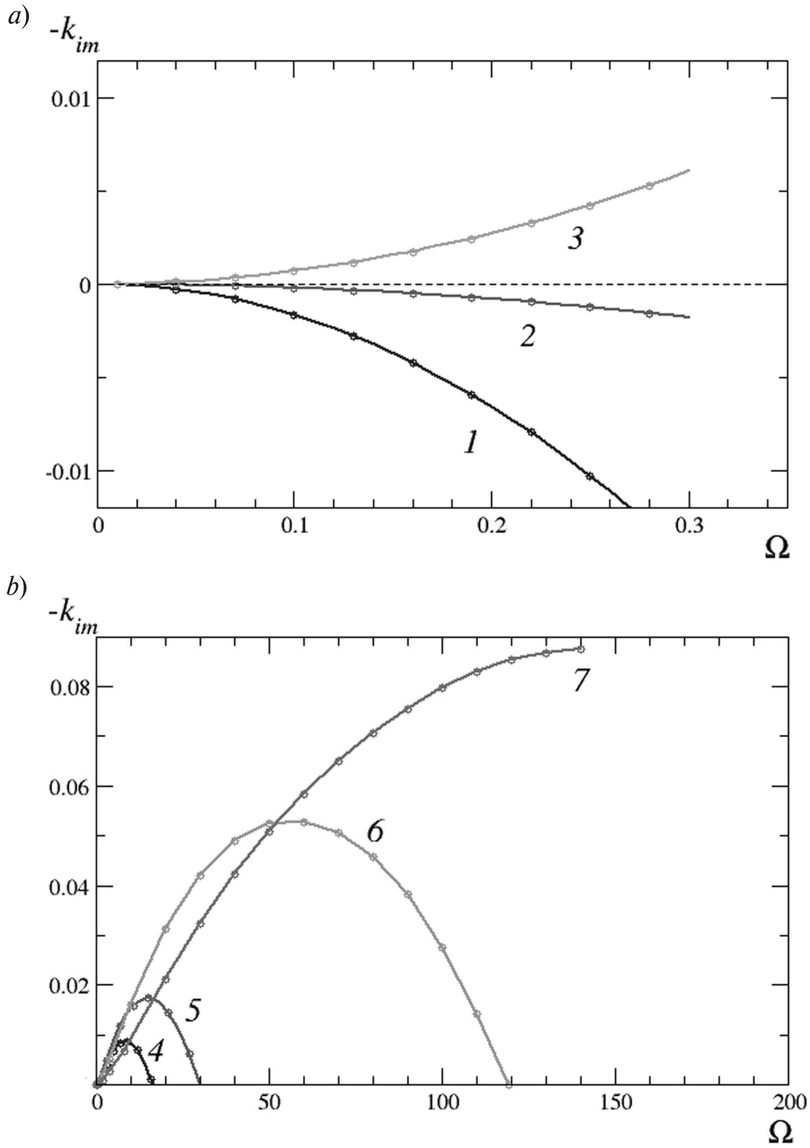


Рис. 3. Дисперсионные кривые $-k_{im}(\Omega)$ в диапазонах значений параметра Ω, равных (0 – 0,35) (*a*) и (0 – 200) (*b*), для самого неустойчивого решения при $m = 0$, при разных значениях числа Рейнольдса Re: 20 (*1*), 25 (*2*), 33,33 (*3*), 40 (*4*), 50 (*5*), 100 (*6*) и 200 (*7*)

боте [17], где не были использованы асимптотические разложения функций задачи в окрестности точек $\psi = \pm 1, 0$.

Текущая постановка задачи позволяет исследовать эволюцию возмущений во всем пространстве, благодаря автомодельности основного течения и рассматриваемых возмущений и, таким образом, является глобальной. Отношение амплитуды скорости возмущения на оси к скорости основного потока подчиняется следующей зависимости:

$$v_R / U_R = \left| [(\nu / R) f(1) e^{-k_{im}(\mathrm{Re})\xi}] \times \right.$$
$$\left. \times [(-\nu / R) y'(1)]^{-1} \right| \infty (R / R_0)^{-k_{im}(\mathrm{Re})}. \quad (13)$$

Амплитуда возмущения растет (затухает) вниз по потоку относительно основного течения алгебраически в зависимости от расстояния, отсчитываемого от начала координат. При этом скорость роста определяется мнимой частью волнового числа и зависит от числа Рейнольдса. Очень важным оказы-

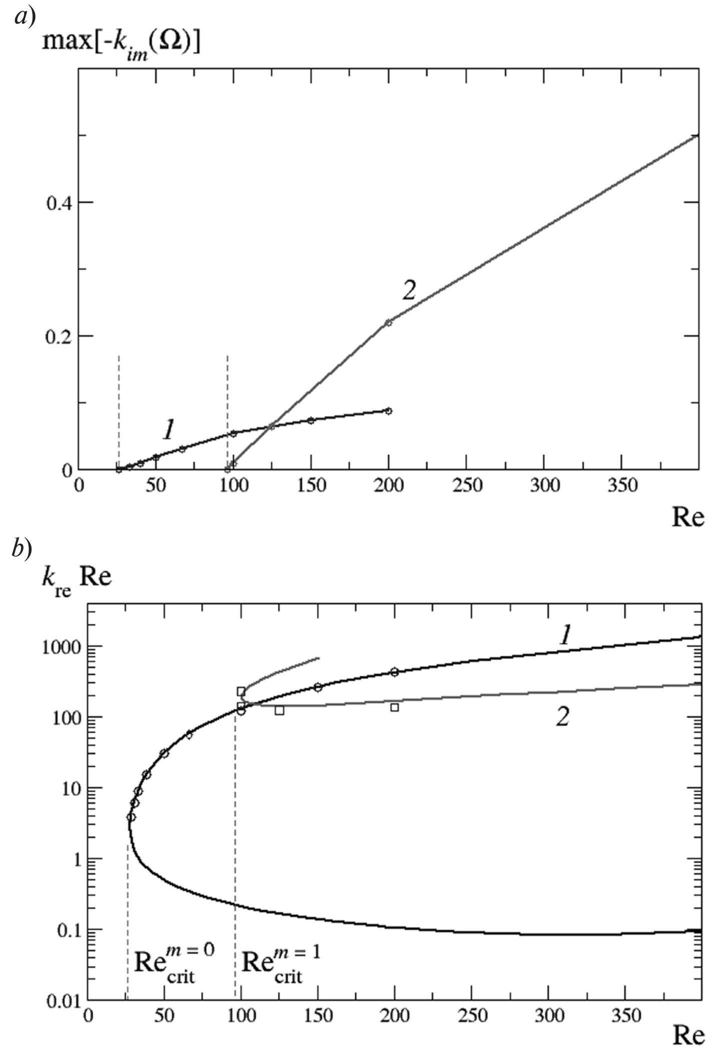


Рис. 4. Зависимости максимального значения мнимой части $-k_{im}$(*a*) и значения действительной части k_{re}Re (*b*) волнового числа *k* от величины числа Рейнольдса для самых неустойчивых решений при m = 0 (*1*) и m = 1 (*2*). Проведено сравнение (*b*) данных настоящей работы (символы) с таковыми работы [17] (сплошные линии).
Значения $\mathrm{Re}_{crit}^{m=0}$ = 26,20 и $\mathrm{Re}_{crit}^{m=1}$ = 96,29 отмечены вертикальными пунктирами

вается абсолютное значение $-k_{im}$(Re).

На рис. 4 показана зависимость максимального значения $-k_{im}(\Omega)$, полученного для каждой дисперсионной кривой, при различных значениях Re. Видно, например, что, несмотря на существование положительных значений $-k_{im}$ для Re ≤ 40, эти значения не превышают 0,01. Это дает основание утверждать, что отношение амплитуды возмущения к скорости основного потока на оси вырастет всего на 7 % (примерно) на расстоянии $R/R_0 = 10^3$, по сравнению с этим отношением на расстоянии $R/R_0 = 1$. При значении Re = 200 пик величины $-k_{im}(\Omega)$ на дисперсионной кривой достигается для $-k_{im}$ = 0,087. Для этих параметров возмущение на расстоянии $R/R_0 = 10^3$ вырастет на 82 %.

Таким образом, можно заключить, что, несмотря на присутствие в рассматриваемом течении механизма роста осесимметричных возмущений, скорость такого роста оказывается крайне низкой. Это дает основания характеризовать осесимметричные возмущения, в первом приближении, как нейтрально устойчивые. Вероятно, именно благодаря слабовыраженному эффекту возмущения при $m = 0$, справедливы только устойчивые решения в плоскопараллельном приближении. На рис. 4, *b* приведено сравнение зависимости $k_{re}\mathrm{Re}$ от числа Рейнольдса Re, полученное нами в данном исследовании и в работе [17]. Отличительной особенностью является отсутствие нижней ветви на кривой, относящейся к работе [17], что наглядно продемонстрировано на рис. 4, *b*.

На рис. 4, *b* также можно видеть, что при увеличении числа Рейнольдса Re до величины порядка 100, появляется неустойчивое решение для $m = 1$. Полученное значение критического числа Рейнольдса составляет $\mathrm{Re}_{crit}^{m=1} = 96{,}29$, что несколько меньше, чем соответствующее значение в работе [17] ($\mathrm{Re}_{crit}^{m=1} = 101$).

Сравнение функций максимального значения $-k_{im}(\Omega)$ от числа Рейнольдса Re при $m = 0$ и при $m = 1$ указывает на то, что скорость роста возмущений при $m = 1$ существенно превышает таковую для $m = 0$ при увеличении числа Рейнольдса выше некоторого значения. При этом максимальные значения $-k_{im}$ примерно одинаковы при значениях $\mathrm{Re} \approx 120 - 130$.

Следующий этап проведенного нами исследования заключался в сравнении результатов описанного выше линейного анализа устойчивости с экспериментальными данными, представленными в литературе. Определим связь числа Рейнольдса, которая выражается формулой (12), с этим числом, которое используется в экспериментах и численных расчетах. Число, построенное по диаметру выходного сопла $D = 2R_0$ и среднерасходной скорости U_b, имеет вид

$$\mathrm{Re}_D = U_b D / \nu. \tag{14}$$

Рассмотрим параболический профиль скорости, сформированный в подводящей трубе. В цилиндрических координатах (x, r, φ) с центром в середине выходного сечения ($x = 0$) этот профиль имеет следующий вид:

$$U(R) = 2U_b(1 - R^2 / R_0^2), \tag{15}$$

где R_0 – радиус трубы (как и прежде).

Полный поток импульса через выходное сечение определяется следующим соотношением:

$$P_x = \oint \rho U^2(R) dS = 2\pi\rho \int_0^{R_0} U^2(R) R dR. \tag{16}$$

Подставим формулу (15) в соотношение (16) и получим, что

$$P_x = \frac{1}{3}\pi\rho\nu^2 \mathrm{Re}_D^2. \tag{17}$$

Таким образом, мы приходим к следующей связи:

$$\mathrm{Re}_D = \sqrt{\frac{3P_x}{\pi\rho\nu^2}}. \tag{18}$$

Следовательно, имеется однозначная связь между величинами Re_D и Re (или между A и Re: $\mathrm{Re} = -4/(A - 1)$). При больших значениях числа Рейнольдса можно выписать следующую асимптотику:

$$\mathrm{Re}_D = \sqrt{8\mathrm{Re}} + \\ +\sqrt{2}(8 + \ln 8 - 3\ln \mathrm{Re})\mathrm{Re}^{-1/2} + \ldots, \mathrm{Re} \to \infty, \tag{19}$$

причем первое слагаемое часто используется в литературе ($\mathrm{Re}_D = \sqrt{8\mathrm{Re}}$).

В таблице показано сравнение результатов анализа для $m = 1$, полученных в данной работе, с результатами других авторов. Следует отметить, что критическое число Рейнольдса Re_{crit} будет существенно ниже, если учитывать расширение струи, однако значения числа Рейнольдса $\mathrm{Re}_{D,crit}$ при таком учете будут различаться меньше. Немного ниже оказываются также значения действительной части волнового числа и обобщенной частоты. Тем не менее, данные, полученные В. Штерном и Ф. Хуссейном, а также О.А. Лихачёвым, находятся в хорошем согласии с результатами текущих расчетов.

Далее производилась оценка расстояния L от источника струи, на котором амплитуда возмущения принимает некоторое критическое значение, так как течение достигает турбулизации. В расчетах считается, что возмущение растет согласно формуле (13), в соответствии с рассмотренным линейным механизмом. Очевидно, что здесь

Таблица

Сравнение результатов разных авторов по анализу линейной устойчивости струи Ландау при значении азимутального волнового числа $m = 1$

Автор	Re_{crit}	$\mathrm{Re}_{D,crit}$	$k_{re,crit}$	Ω_{crit}
В. Штерн, Ф. Хуссейн [17]	101,0	27,77	1,85	84,00
П.Дж. Моррис [34]	177,1	37,64	2,12	86,66
О.А. Лихачёв [16]	94,46	27,49	1,55	59,72
Данная работа	96,29	27,10	1,78	76,93

Обозначения: Re – число Рейнольдса, определенное формулой (12), Re_D – число Рейнольдса, построенное по диаметру D выходного сопла; $k_{re,}$ – действительная часть волнового числа k; Ω – параметр, играющий роль обобщенной частоты; нижний индекс “*crit*” указывает на критическое значение.

Примечания. 1. В работе [34] исследована устойчивость профиля скорости в плоскопараллельном приближении с использованием решения Шлихтинга.
2. В статье [17] применялся такой же подход, как и в данной работе.

важно определить критерий ламинарно-турбулентного перехода.

В нашем исследовании принималось, что турбулизация происходит, когда в некоторой точке амплитуда возмущения достигает существенного преобладания над локальным значением скорости. Путем фиксирования этого расстояния, а также использования найденных зависимостей $-k_{im}(\mathrm{Re})$ и формулы (13), была получена зависимость L от Re.

На рис. 5 приведено сравнение экспериментальных данных, полученных А.Дж. Рейнольдсом [6], а также В.В. Лемановым и др. [9], с теоретической зависимостью, найденной в настоящей работе (показана сплошной линией).

Полученное выражение имеет вид

$$L / D = 2,0 \cdot 10^{\alpha},$$

$$\alpha = 1 + 1 / (0,0081\mathrm{Re}_D^{\,0,8} - 0,11);$$

оно найдено при помощи экстраполяции

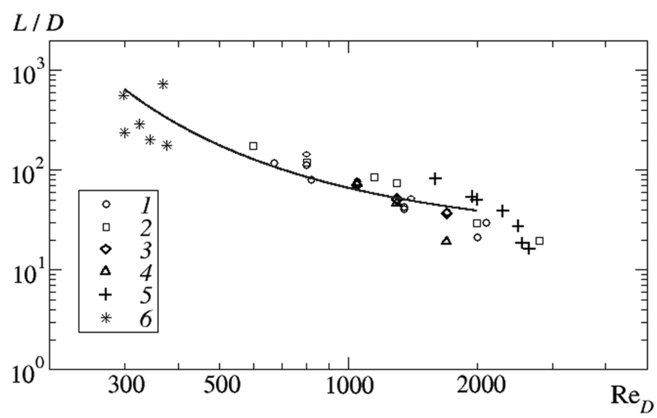


Рис. 5. Теоретическая (линия) и экспериментальная (символы) зависимости расстояния, на котором происходит турбулизация струи, от построенного для D числа Рейнольдса. Использованы экспериментальные данные работ [6, 9], теоретическая кривая получена в настоящей работе. В работе [6] диаметр подводящей трубки D = 0,32 мм (символы *6*). Условия эксперимента в работе [9]: D = 0,5 мм (символы *1*, *2*); 1,0 мм (*3*, *4*); 3,5 мм (*5*); измерения пульсаций скорости проведены термоанемометром (*2*, *4*) и визуально (*1*, *3*, *5*)

функции $-k_{im}$(Re) на более высокие значения числа Рейнольдса Re.

Сравнение теоретических и экспериментальных результатов дает хорошее количественное согласие, несмотря на гораздо более сложные (по сравнению с моделью) процессы турбулизации в действительности, включающей этап нелинейного роста возмущения. Важно отметить, что при значении $\mathrm{Re}_D > 2000$ в вытекающем потоке из трубы уже наблюдались турбулентные пульсации (согласно информации, полученной от В.В. Леманова), что ограничивает область сравнения теоретических и экспериментальных данных до значений $\mathrm{Re}_D < 2000$.

Заключение

В данной работе рассмотрена линейная задача устойчивости для затопленной струи Ландау – Сквайра. Показано, что амплитуда собственных возмущений изменяется в пространстве степенным образом как функция сферического радиуса R, отсчитываемого от источника движения.

Получена задача на собственные значения, которая решается численно. Найдены неустойчивые возмущения для первых двух азимутальных волновых чисел (m = 0 и 1); при этом соответствующие критические значения числа Рейнольдса, построенного по среднерасходной скорости с параболическим распределением внутри подводящей трубы и ее диаметру, составили

$$\mathrm{Re}_D^{\,m=0} = 13{,}98;$$

$$\mathrm{Re}_D^{\,m=1} = 27{,}10,$$

соответственно.

Показано, что инкремент роста синусоидальных возмущений становится больше при значениях $\mathrm{Re}_D > 31$, т. е. больше, чем у осесимметричных возмущений.

Предложен модельный критерий ламинарно-турбулентного перехода в дальней области струи, который основан на том, что отношение амплитуды скорости возмущения к скорости основного потока меняется в пространстве как степенная функция от R; при этом инкремент роста известен из решения сформулированной спектральной задачи.

Впервые получено хорошее согласие между результатами линейной теории устойчивости и экспериментальными данными при значениях $\mathrm{Re}_D < 2000$ для величины координаты ламинарно-турбулентного перехода как функции числа Рейнольдса.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 14-19-01685.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Joseph D.D.** Stability of fluid motions. Vol. I. Berlin-Heidelberg-New York: Springer-Verlag, 1976. 282 p.

2. **Drazin P., Reid W.** Hydrodynamic stability. Cambridge: Cambridge University Press, 1981. 539 p.

3. **Schmid P.J., Henningson D.S.** Stability and transition in shear flows. (Applied Mathematical Sciences. Vol. 142). Berlin: Springer, 2001. 558 p.

4. **Batchelor G.K., Gill A.E.** Analysis of the stability of axisymmetric jets // Journal of Fluid Mechanics. 1962. Vol. 14. No. 4. Pp. 529–551.

5. **Viilu A.** An experimental determination of the minimum Reynolds number for instability in a free jet // Journal of Applied Mechanics. 1962. Vol. 29. No. 3. Pp. 506–508.

6. **Reynolds A.J.** Observations of a liquid-into-liquid jet // Journal of Fluid Mechanics. 1962. Vol. 14. No. 4. Pp. 552–556.

7. **Козлов Г.В., Грек Г.Р., Сорокин А.М., Литвиненко Ю.А.** Влияние начальных условий на срезе сопла на структуру круглой струи // Теплофизика и аэромеханика. 2008. Т. 15. № 1. С. 59–73.

8. **Козлов В.В., Грек Г.Р., Козлов Г.В., Литвиненко М.В.** Дозвуковая круглая и плоская макро- и микроструи в поперечном акустическом поле // Вестник НГУ. Сер. Физика. 2010. Т. 5. № 2. С. 28–42.

9. **Леманов В.В., Терехов В.И., Шаров К.А., Шумейко А.А.** Экспериментальное исследование затопленных струй при низких числах Рейнольдса // Письма в Журнал технической физики. 2013. Т. 39. № 9. С. 34–40.

10. **Tatsumi T., Kakutani T.** The stability of a two-dimensional laminar jet // Journal of Fluid Mechanics. 1958. Vol. 4. No. 3. Pp. 261–275.

11. **Ling Chi-Hai., Reynolds W.C.** Non-parallel flow corrections for the stability of shear flows // Journal of Fluid Mechanics. 1973. Vol. 59. No. 3. Pp. 571–591.

12. **Garg V.K.** Spatial stability of the non-parallel

bickley jet // Journal of Fluid Mechanics. 1981. Vol. 102. Pp. 127–140.

13. **Bickley W.G.** The plane jet // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. 1937. Vol. 23. No. 156. Pp. 727–731.

14. **Tam K.K.** Linear stability of the non-parallel Bickley jet // Canadian Applied Mathematics Quarterly. 1995. Vol. 3. No. 1. Pp. 99–110.

15. **McAlpine A., Drazin P.G.** On the spatio-temporal development of small perturbations of Jeffery – Hamel flows // Fluid Dynamics Research. 1998. Vol. 22. No. 3. Pp. 123–138.

16. **Лихачёв О.А.** Анализ устойчивости автомодельной круглой струи с учетом эффектов непараллельности // Прикладная механика и техническая физика. 1990. № 4. С. 118–124.

17. **Shtern V., Hussain F.** Effect of deceleration on jet instability // Journal of Fluid Mechanics. 2003. Vol. 480. Pp. 283–309.

18. **Garnaud X., Lesshafft L., Schmid P.J., Huerre P.** Modal and transient dynamics of jet flows // Physics of Fluids. 2013. Vol. 25. No. 4. P. 044103.

19. **Lesshafft L.** Artificial eigenmodes in truncated flow domains // Theoretical and Computational Fluid Dynamics. 2018. Vol. 32. No. 3. Pp. 245–262.

20. **Слёзкин Н.А.** Об одном случае интегрируемости полных дифференциальных уравнений движения вязкой жидкости // Ученые записки МГУ. 1934. Вып. 2. С. 89–90.

21. **Ландау Л.Д.** Об одном новом точном решении уравнений Навье –Стокса // Доклады АН СССР. 1944. Т. 43. № 7. С. 299–301.

22. **Squire H.B.** The round laminar jet // The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics. 1951. Vol. 4. No. 3. Pp. 321–329.

23. **Andrade E.N. da C., Tsien L.C.** The velocity-distribution in a liquid-into-liquid jet // Proceedings of the Physical Society. 1937. Vol. 49. No. 4. Pp. 381–391.

24. **Rankin G.W., Sridhar K., Arulraja M., Kumar K.R.** An experimental investigation of laminar axisymmetric submerged jets // Journal of Fluid Mechanics. 1983. Vol. 133. Pp. 217–231.

25. **Boersma B.J., Brethouwer G., Nieuwstadt F.T.M.** A numerical investigation on the effect of the inflow conditions on the self-similar region of a round jet // Physics of Fluids. 1998. Vol. 10. No. 4. Pp. 899–909.

26. **Шапеев А.В.** Нестационарное автомодельное течение вязкой несжимаемой жидкости в плоском диффузоре // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2004. № 1. С. 41–46.

27. **Шапеев А.В.** Исследование смешанной спектрально-разностной аппроксимации на примере задачи о вязком течении в диффузоре // Сибирский журнал вычислительной математики. 2005. Т. 8. № 2. С. 149–162.

28. **Sozou C., Pickering W.M.** The round laminar jet: the development of the flow field // Journal of Fluid Mechanics. 1977. Vol. 80. No. 4. Pp. 673–683.

29. **Sozou C.** Development of the flow field of a point force in an infinite fluid // Journal of Fluid Mechanics. 1979. Vol. 91. No. 3. Pp. 541–546.

30. **Cantwell B.J.** Transition in the axisymmetric jet // Journal of Fluid Mechanics. 1981. Vol. 104. Pp. 369–386.

31. **Мулляджанов Р.И.** Затопленные струйные МГД течения. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН. Новосибирск, 2012. 108 с.

32. **Shtern V., Hussain F.** Instabilities of conical flows causing steady bifurcations // Journal of Fluid Mechanics. 1998. Vol. 366. Pp. 33–85.

33. **Mullyadzhanov R.I., Yavorsky N.I.** On the self-similar exact MHD jet solution // Journal of Fluid Mechanics. 2014. Vol. 746. Pp. 5–30.

34. **Morris P.J.** The spatial viscous instability of axisymmetric jets // Journal of Fluid Mechanics. 1976. Vol. 77. No. 3. Pp. 511–529.

Статья поступила в редакцию 23.03.2018, принята к публикации 23.05.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МУЛЛЯДЖАНОВ Рустам Илхамович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории физических основ энергетических технологий Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация.*

630090, *Российская Федерация,* г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 1.
rustammul@gmail.com

ЯВОРСКИЙ Николай Иванович – *доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией моделирования Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, г. Новосибирск, Российская Федерация.*

630090, *Российская Федерация,* г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 1.
nick@itp.nsc.ru

REFERENCES

[1] **D.D. Joseph,** Stability of fluid motions, Vol. I. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1976.

[2] **P. Drazin, W. Reid,** Hydrodynamic stability. Cambridge University Press, Cambridge, 1981.

[3] **P.J. Schmid, D.S. Henningson,** Stability and transition in shear flows, Applied Mathematical Sciences, Springer, Berlin, 142 (2001).

[4] **G.K. Batchelor, A.E. Gill,** Analysis of the stability of axisymmetric jets, Journal of Fluid Mechanics. 14 (4) (1962) 529–551.

[5] **A. Viilu,** An experimental determination of the minimum Reynolds number for instability in a free jet, Journal of Applied Mechanics. 29 (3) (1962) 506–508.

[6] **A.J. Reynolds,** Observations of a liquid-into-liquid jet, Journal of Fluid Mechanics. 14 (4) (1962) 552–556.

[7] **G.V. Kozlov, G.R. Grek, A.M. Sorokin, Yu.A. Litvinenko,** Influence of initial conditions at the nozzle exit on the structure of round jet, Thermophysics and Aeromechanics. 15 (1) (2008) 55–68.

[8] **V.V. Kozlov, G.R. Grek, G.V. Kozlov, M.V. Litvinenko,** Subsonic round and plane jets in the transversal acoustic field, Vestnik NGU. Ser. Physics. 5(2) (2010) 28–42.

[9] **V.V. Lemanov, V.I. Terekhov, K.A. Sharov, A.A. Shumeyko,** An experimental study of submerged jets at low Reynolds numbers, Technical Physics Letters. 39 (5) (2013) 421–423.

[10] **T. Tatsumi, T. Kakutani,** The stability of a two-dimensional laminar jet, Journal of Fluid Mechanics. 4 (3) (1958) 261–275.

[11] **Chi-Hai Ling, W.C. Reynolds,** Non-parallel flow corrections for the stability of shear flows, Journal of Fluid Mechanics. 59 (3) (1973) 571–591.

[12] **V.K. Garg,** Spatial stability of the non-parallel Bickley jet, Journal of Fluid Mechanics. 102 (1981) 127–140.

[13] **W.G. Bickley,** The plane jet, The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. 23 (156) (1937) 727–731.

[14] **K.K. Tam,** Linear stability of the non-parallel Bickley jet, Canadian Applied Mathematics Quarterly. 3 (1) (1995) 99–110.

[15] **A. McAlpine, P.G. Drazin,** On the spatio-temporal development of small perturbations of Jeffery–Hamel flows, Fluid Dynamics Research. 22 (4) (1998) 123–138.

[16] **O.A. Likhachev,** Analysis of stability in a self-similar circular jet with consideration of the nonparallel effect, Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 31 (4) (1990) 621–626.

[17] **V. Shtern, F. Hussain,** Effect of deceleration on jet instability, Journal of Fluid Mechanics. 480 (2003) 283–309.

[18] **X. Garnaud, L. Lesshafft, P.J. Schmid, P. Huerre,** Modal and transient dynamics of jet flows, Physics of Fluids. 25 (4) (2013) 044103.

[19] **L. Lesshafft,** Artificial eigenmodes in truncated flow domains, Theoretical and Computational Fluid Dynamics. 32 (3) (2018) 245–262.

[20] **N.A. Slyozkin,** Ob odnom sluchaye integriruyemosti polnykh differentsialnykh uravneniy dvizheniya vyazkoy zhidkosti [On a case of integrability of the complete differential equations of the motion of viscous fluid], Uchenyye zapiski MGU. (2) (1934) 89–90.

[21] **L.D. Landau,** Ob odnom novom tochnom reshenii uravneniy Navye –Stoksa [On an innovative exact solution to the Navier – Stokes equations], Doklady USSR AS. 43 (7) (1944) 299–301.

[22] **H.B. Squire,** The round laminar jet, The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics. 4 (3) (1951) 321–329.

[23] **E.N. Andrade da C., L.C. Tsien,** The velocity-distribution in a liquid-into-liquid jet , Proceedings of the Physical Society. 49 (4) (1937) 381–391.

[24] **G.W. Rankin, K. Sridhar, M. Arulraja, K.R. Kumar,** An experimental investigation of laminar axisymmetric submerged jets, Journal of Fluid Mechanics. 133 (1983) 217–231.

[25] **B.J. Boersma, G. Brethouwer, F.T.M. Nieuwstadt,** A numerical investigation on the effect of the inflow conditions on the self-similar region of a round jet, Physics of Fluids. 10 (4) (1998) 899–909.

[26] **A.V. Shapeev,** Unsteady self-similar flow of a viscous incompressible fluid in a plane divergent channel, Fluid Dynamics. 39 (1) (2004) 36 –41.

[27] **A.V. Shapeev,** Issledovaniye smeshannoy spektralno-raznostnoy approksimatsii na primere zadachi o vyazkom techenii v diffuzore [Studies in the mixed spectral-difference approximation illustrated by the example of the problem on the viscous flow in a diffuser], Numerical Analysis and Applications. 8 (2) (2005) 149–162.

[28] **C. Sozou, W.M. Pickering,** The round laminar jet: the development of the flow field, Journal of Fluid Mechanics. 80 (4) (1977) 673–683.

[29] **C. Sozou,** Development of the flow field of a point force in an infinite fluid, Journal of Fluid Mechanics. 91 (3) (1979) 541–546.

[30] **B.J. Cantwell,** Transition in the axisymmetric jet, Journal of Fluid Mechanics. 104 (1981) 369–386.

[31] **R.I. Mullyadzhanov,** Zatoplennyye struynyye MGD techeniya [Submerged MHD jet flows], Thesis for Ph.D., Kutateladze Institute of Thermal Physics, SO RAS, Russian Federation, 2012.

[32] **V. Shtern, F. Hussain,** Instabilities of conical flows causing steady bifurcations, Journal of Fluid Mechanics. 366 (1998) 33–85.

[33] **R.I. Mullyadzhanov, N.I. Yavorsky,** On the self-similar exact MHD jet solution, Journal of Fluid Mechanics. 746 (2014) 5–30.

[34] **P.J. Morris,** The spatial viscous instability of axisymmetric jets, Journal of Fluid Mechanics. 77 (3) (1976) 511–529.

Received 23.03.2018, accepted 23.05.2018.

THE AUTHORS

MULLYADZHANOV Rustam I.
Kutateladze Institute of Thermal Physics
1 Acad. Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation
rustammul@gmail.com

YAVORSKY Nikolay I.
Kutateladze Institute of Thermal Physics
1 Acad. Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation
nick@itp.nsc.ru

DOI: 10.18721/JPM.11311
УДК 536.7; 532.5; 519.6

ТРЕХЖИДКОСТНАЯ ФОРМУЛИРОВКА И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОГИДРАВЛИКИ ДВУХФАЗНОГО ПОТОКА В ДИСПЕРСНО-КОЛЬЦЕВОМ РЕЖИМЕ ТЕЧЕНИЯ

Е.Э. Авдеев, А.А. Плетнев, С.В. Булович

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

Представлена одномерная трехжидкостная модель для решения стационарной задачи течения двухфазного дисперсно-кольцевого потока в вертикальном обогреваемом канале, основанная на девяти балансовых уравнениях, в которых принято равное давление фаз. Проведена валидация маршевого алгоритма описанной стационарной задачи путем сравнения с опубликованными экспериментальными данными, относящимися к течению двухфазного потока в круглой трубе при адиабатических условиях. Рассчитаны перепады полного давления в канале. Получено хорошее совпадение с экспериментальными данными.

Ключевые слова: двухфазное пароводяное течение, трехжидкостная модель, численное решение

Ссылка при цитировании: Авдеев Е.Э., Плетнев А.А., Булович С.В. Трехжидкостная формулировка и численный метод решения стационарной задачи теплогидравлики двухфазного потока в дисперсно-кольцевом режиме течения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 122–132. DOI: 10.18721/JPM.11311

THREE-FLUID FORMULATION AND A NUMERICAL METHOD FOR SOLVING THE STATIONARY PROBLEM OF THERMAL HYDRAULICS OF A TWO-PHASE ANNULAR DISPERSED FLOW

E.E. Avdeev, A.A. Pletnev, S.V. Bulovich

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

The article presents a one-dimensional three-fluid model for solving the stationary flow problem on a two-phase steam-water annular dispersed stream in a vertical heated channel, based on nine balance equations with an equal phase pressure assumed. The validation of the marching algorithm of the described stationary problem has been carried out by comparison with the published experimental data relating to a two-phase flow in a circular pipe under adiabatic conditions for pressures of 3 – 9 MPa, total flow rates of 500 – 3000 kg /(m^2·s) and internal diameters of 10 and 20 mm. The total pressure differences in the channel were calculated. Good qualitative agreement with experimental data was obtained. Small quantitative disagreements were found. They were shown to be reduced by the refinement of the closing relations.

Key words: two-phase steam-water flow, three-fluid model, numerical solution

Citation: E.E. Avdeev, A.A. Pletnev, S.V. Bulovich, Three-fluid formulation and a numerical method for solving the stationary problem of thermal hydraulics of a two-phase annular dispersed flow, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 122–132. DOI: 10.18721/JPM.11311

Введение

Для описания состояния многофазных потоков в теплогидравлическом приближении наиболее распространен подход, основанный на модели взаимопроникающих континуумов. Известные теплогидравлические расчетные коды (КОРСАР, TRAC, RELAP) базируются на так называемом двухжидкостном приближении. Оно относится к случаю, когда многофазный поток представлен двумя «жидкостями»: паром и жидкостью. Соответствующая система основывается на шести дифференциальных уравнениях: баланса массы, импульса и энергии (для каждой из жидкостей). Система замыкается уравнением баланса фаз, уравнением термодинамического состояния (для каждой из жидкостей) и эмпирическими или полуэмпирическими соотношениями (для каждой из жидкостей). Они описывают массообмен, теплообмен и обмен импульсами между фазами и фаз со стенкой канала (называются замыкающими соотношениями).

Структура двухфазной среды и, соответственно, замыкающие соотношения в такой модели будут определяться выбранной картой режимов течения.

Двухжидкостное приближение было первым в хронологии развития теплогидравлических расчетных кодов. Оно до сих пор применяется во многих кодах и часто встречается в литературе. В целом двухжидкостный подход не устарел, так как хорошо описывает все режимы течения, где двухфазный поток было бы правильнее разделить на две любые составляющие. К таким режимам относятся, например, пузырьковый, снарядный, дисперсный, расслоенный. Для всех указанных режимов течения двухжидкостной подход дает приемлемые результаты; и такие описания будут различаться лишь определением «жидкостей» в каждом случае и, соответственно, замыкающими соотношениями.

Однако в дисперсно-кольцевом режиме течения среда разделена на три жидкости: пар, капли и жидкую пленку и, соответственно, каждая из жидкостей должна иметь свою скорость и температуру, что невозможно в двухжидкостном приближении. Для этих случаев существуют приближенные способы учета специфики дисперсно-кольцевого режима, позволяющие оставаться в рамках двухжидкостной модели. Например, в расчетном коде КОРСАР появившиеся капли учитываются дополнительным слагаемым в уравнениях баланса, но они также не имеют собственной скорости и температуры.

Проблема неточного описания дисперсно-кольцевого режима решается заменой двухжидкостного подхода трехжидкостным. В нем каждая из жидкостей, т. е. пар, капли и жидкая пленка, описывается собственными уравнениями баланса массы, импульса и энергии. Трехжидкостная модель не является новшеством. Она разрабатывалась и ранее в ряде отечественных и зарубежных публикаций [1 – 7]. Переход от описания двух жидкостей к трем не несет с собой алгоритмических новаций, но позволяет построить более полную физическую модель, неравновесную по скоростям и температурам рассматриваемых жидкостей.

Трехжидкостная модель более точно описывает дисперсно-кольцевой режим течения, а значит, позволяет получать более точные значения характеристик теплообмена, гидравлического сопротивления, объемных долей жидкостей и, в конечном счете, надежнее определять положение точки кризиса теплообмена. Одновременно с этим вновь поднимается проблема замыкающих соотношений. Большинство апробированных корреляционных зависимостей были сформулированы для двухжидкостного приближения. Однако формулировка трехжидкостной модели позволяет частично использовать накопленный опыт решения двухфазных задач. Так например, замыкающие соотношения, описывающие обменные процессы между паром и каплями в дисперсном режиме или обмен со стенкой канала при однофазном течении, можно использовать при рассмотрении процессов обмена на соответствующих межфазных границах и в трехжидкостном приближении. При этом обменные процессы непосредственно между каплями и пленкой являются отличительной особенностью трехжидкостной модели перед двухжидкостной. Настоящая модель позволяет, путем обработки экспериментальных данных, отказаться от равновесной модели генерации-осаждения и перейти к неравновесным моделям.

В данной работе представлен маршевый алгоритм для численного решения стационарной задачи течения дисперсно-кольцевого режима в одномерном приближении с использованием трехжидкостного подхода. Известно, что при рассмотрении систем в двух- и трехжидкостном приближении в нестационарной постановке, в случае равновесного значения давления (математические модели с общем давлением в жидкостях), при определенном значении режимных параметров утрачивают эволюционные свойства [8]. Восстановление корректности задачи Коши может быть достигнуто различными способами, но все эти приемы «возмущают» исходную систему уравнений. Поэтому, если в рассматриваемой задаче возможен стационарный режим течения, то решение, полученное маршевым методом интегрирования, является «эталонным» для эволюционных задач и тем самым позволяет количественно оценить искажения, вносимые в решения за счет применяемых приемов регуляризации задачи.

Математическая модель

Разработанная стационарная одномерная трехжидкостная модель описывает дисперсно-кольцевой режим течения при наличии в парожидкостном двухфазном потоке движущихся масс пара, капель и жидкой пленки. Модель учитывает фазовый переход, обменные процессы со стенкой канала, унос и осаждение капель на поверхности пленки. Соответственно, решаемая система уравнений состоит из девяти дифференциальных уравнений балансов массы, импульса и энергии для каждой из трех жидкостей.

Решаемые дифференциальные уравнения записываются в следующем виде.

1) *Уравнения баланса массы.*

Для пара:

$$\frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_v\rho_v u_v) = m_{dv}\Pi_{id} + m_{fv}\Pi_{if}, \qquad (1)$$

где x, м, – продольная координата; A, м^2, – площадь поперечного сечения канала; α_v – объемная доля пара; ρ_v, кг/м^3, – его плотность; u_v, м/с, – его скорость; m_{dv}, m_{fv}, кг/(м^2·с), – массовые источники генерации пара от капель и пленки соответственно (положительны при конденсации и отрицательны при испарении); Π_{id}, Π_{if}, м, – периметры поверхности теплообмена капель и пленки с паром, соответственно; индексы v, d, f относятся к пару (vapor), каплям (drops) и к жидкой пленке (film) соответственно. Далее будет использован еще индекс w, который относится к стенке канала (wall).

Для капель:

$$\frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_d\rho_d u_d) = -m_{dv}\Pi_{id} - \Pi_{if}(S_d - S_e), \quad (2)$$

где α_d, ρ_d – объемная доля и плотность капель, соответственно; u_d, м/с, – их скорость; S_e, S_d, кг/(м^2·с), – скорости уноса и осаждения капель на поверхности жидкой пленки, соответственно.

Для жидкой пленки:

$$\frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_f\rho_f u_f) = -m_{fv}\Pi_{id} + \Pi_{if}(S_d - S_e), \quad (3)$$

где α_f, ρ_f – объемная доля и плотность жидкой пленки, соответственно; u_f, м/с, – скорость ее потока.

2) *Уравнения баланса импульса.*

Для пара:

$$\frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_v\rho_v u_v^2) + \bar{\alpha}_v\bar{A}\frac{\partial P}{\partial x} = m_{dv}\Pi_{id}(u_{di} - u_v) + \\ + m_{fv}\Pi_{if}(u_{fi} - u_v) - \Pi_{if}\tau_{vf} - \Pi_{id}\tau_{vd} + A\alpha_v\rho_v g_x, \qquad (4)$$

где P, Па, – давление; u_{di}, u_{fi}, м/с, – скорость межфазной поверхности (пар – капли и пар – пленка соответственно); τ_{vf}, τ_{vd}, кг/(с^2·м) – сдвиговые напряжения (пар – жидкая пленка и пар – капли соответственно); g_x, м/с^2 – проекция вектора тяжести на ось x; верхняя черта указывает на усредненное значение величины.

Используемая скорость межфазной поверхности u_{di} между каплями и паром считается равной скорости капель u_d. Для скорости межфазной поверхности между жидкой пленкой и паром используется зависимость из кода CATHARE [9]:

$$u_{fi} = \frac{\alpha_v}{\alpha_v + \alpha_f} u_f + \frac{\alpha_f}{\alpha_v + \alpha_f} u_v .$$

Для капель:

$$\frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_d\rho_d u_d^2) + \bar{\alpha}_d \bar{A}\frac{\partial P}{\partial x} = -m_{dv}\Pi_{id}(u_{di} - u_v) + \\ + \Pi_{id}\tau_{vd} + A\alpha_d\rho_d g_x - \Pi_{if}(S_d u_d - S_e u_f). \quad (5)$$

Для жидкой пленки:

$$\frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_f\rho_f u_f^2) + \bar{\alpha}_f \bar{A}\frac{\partial P}{\partial x} = \\ = -m_{fv}\Pi_{if}(u_{fi} - u_v) - \Pi_{wf}\tau_{wf} + \Pi_{if}\tau_{vf} + \\ + A\alpha_f\rho_f g_x + \Pi_{if}(S_d u_d - S_e u_f), \quad (6)$$

где Π_{wf}, м – периметр поверхности теплообмена между стенкой канала и пленкой; τ_{wf}, кг/(с²·м), – сдвиговое напряжение между жидкой пленкой и стенкой канала.

3) *Уравнения баланса энергии.*

Для пара:

$$\frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_v\rho_v u_v H_v) = (\text{НТС})_{vd}\Pi_{id}(T_{sat} - T_v) + \\ + \left(h_v + \frac{u_{di}^2}{2}\right) m_{dv}\Pi_{id} + (\text{НТС})_{vf}\Pi_{if}\left(T_{sat} - T_v\right) + \\ + \left(h_v + \frac{u_{fi}^2}{2}\right) m_{fv}\Pi_{if}, \quad (7)$$

где H_v, Дж/кг, – полная удельная энтальпия пара, $H_v = h_v + 0{,}5u^2$ (h_v – удельная энтальпия); $(\text{НТС})_{vd}$, $(\text{НТС})_{vf}$, Вт/(м²·K), – коэффициенты теплоотдачи от пара к межфазной поверхности с каплями и от пара к межфазной поверхности с жидкой пленкой, соответственно; T_{sat}, T_v, K, – температура насыщения и пара, соответственно.

Для капель:

$$\frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_d\rho_d u_d H_d) = (\text{НТС})_{dv}\Pi_{id}(T_{sat} - T_d) - \\ - \left(h_d + \frac{u_{di}^2}{2}\right) m_{dv}\Pi_{id} - \Pi_{if}(S_d H_d - S_e H_f), \quad (8)$$

где H_d, H_f, Дж/кг, – полная удельная энтальпия капель и жидкой пленки, $H_{d,f} = h_{d,f} + 0{,}5u^2$ ($h_{d,f}$ – удельная энтальпия); $(\text{НТС})_{dv}$, Вт/(м²·K), – коэффициенты теплоотдачи от капель к межфазной поверхности с паром; T_d, K, – температура капель.

Для жидкой пленки:

$$\frac{\partial}{\partial x}(A\alpha_f\rho_f u_f H_f) = (\text{НТС})_{fv}\Pi_{if}(T_{sat} - T_f) - \\ - \left(h_f + \frac{u_{fi}^2}{2}\right) m_{fv}\Pi_{if} + \Pi_{if}(S_d H_d - S_e H_f) + \\ + q_{wf}\Pi_{fw} - q_{wfi}\Pi_{fw}, \quad (9)$$

где $(\text{НТС})_{fv}$, Вт/(м²·K), – коэффициент теплоотдачи от жидкой пленки к межфазной поверхности с паром; T_f, K, – температура жидкой пленки; q_{wf}, Вт/м², – тепловой поток от стенки канала к жидкой пленке; q_{wfi}, Вт/м², – часть теплового потока от стенки канала, идущая непосредственно на генерацию пара.

Система также дополняется *уравнением баланса фаз*

$$\sum \alpha_k = 1 \quad (10)$$

и *уравнениями термодинамического состояния* вида

$$\rho_k = \rho_k(P, T), \quad (11)$$

$$e_k = e_k(P, T), \quad (12)$$

где e_k, Дж/кг, – внутренняя удельная энергия k-ой фазы.

Замыкающие соотношения

Для замыкания системы уравнений (1) – (10) требуется набор замыкающих соотношений, описывающий процессы обмена массы, импульса и энергии как между фазами, так и со стенкой канала.

Источники массы, описывающие фазовый переход (m_{dv} и m_{fv}), выводятся при рассмотрении теплового баланса на межфазной поверхности. Учитывая тот факт, что межфазная поверхность не может накапливать тепло, получаем:

$$m_{dv} = -[(\text{НТС})_{dv}(T_{sat} - T_d) + \\ + (\text{НТС})_{vd}(T_{sat} - T_v)] / (h_v - h_d). \quad (13)$$

В дисперсно-кольцевом режиме течения теплообмен непосредственно со стенкой канала будет иметь только жидкая пленка. Соответственно, в правую часть ее уравнения баланса энергии добавляется член $q_{wfi}\Pi_{fw}$, описывающий поток тепла, получаемый жидкой пленкой от стенки канала. В уравнение баланса энергии также добавляется член, характеризующий часть теплового потока от стенки канала, идущая непосредственно на генерацию пара: $q_{wfi}\Pi_{fw}$, где $q_{wfi} = \psi q_{wf}; \psi = 0-1$.

С учетом этого слагаемого, аналогичный источник массы для фазового перехода между жидкой пленкой и паром имеет вид

$$m_{fv} = -[(\text{HTC})_{fv}(T_{sat} - T_f) + (\text{HTC})_{vf}(T_{sat} - T_v) + q_{wfi}] / (h_v - h_f). \quad (14)$$

Для обоих источников массы (13), (14) слагаемые вида $(\text{HTC})_{kv}(T_{sat} - T_k)$ представляют собой тепловой поток от жидкой фазы к межфазной поверхности с паром, а $(\text{HTC})_{vk}(T_{sat} - T_v)$ – тепловой поток от пара к межфазной поверхности с жидкой фазой.

Используемая модель фазового перехода допускает наличие разных по величине коэффициентов теплоотдачи с двух сторон от межфазной поверхности, однако в качестве упрощения используется следующее предположение. Считаем, что коэффициенты теплоотдачи по обе стороны от межфазной поверхности одинаковы и равны лимитирующему показателю – коэффициенту теплоотдачи со стороны пара. Тогда коэффициенты теплоотдачи от пара к межфазной поверхности с каплями и от капель к межфазной поверхности с паром равны и представляются в виде корреляции, описывающей обтекание сферических частиц потоком газа [10]:

$$(\text{HTC})_{vd} = (\text{HTC})_{dv} = \frac{\lambda_v}{D_d}(2 + 0,6\,\text{Re}_d^{0,5}\,\text{Pr}_v^{0,33}), \quad (15)$$

где число Рейнольдса для капель следует выражению

$$\text{Re}_d = \frac{\rho_v \left|u_v - u_d\right| D_d}{\mu_v}$$

(D_d, м, – средний диаметр капель; μ_v, Па·с, – коэффициент динамической вязкости пара); λ_v, Вт/(м·К), – коэффициент теплопроводности пара.

Коэффициенты теплоотдачи от пара к межфазной поверхности с жидкой пленкой и от жидкой пленки к межфазной поверхности с паром рассчитываются по корреляции для однофазной конвекции [11], применительно к парокапельному ядру:

$$(\text{HTC})_{vf} = (\text{HTC})_{fv} = \frac{\lambda_v}{(D-2\delta)}(0,023\,\text{Re}_v^{0,8}\,\text{Pr}_v^{0,4}), \quad (16)$$

где D, м, – внутренний диаметр канала; δ, м, – средняя толщина пленки; Pr_v – число Прандтля для пара; Re_v – число Рейнольдса для пара,

$$\text{Re}_v = \frac{\rho_v \left|u_v - u_f\right|(D-2\delta)}{\mu_v}.$$

Выражения для источников массы, описывающих гидродинамический унос и осаждение на поверхности жидкой пленки (S_e и S_d), заимствованы из работы [2]. Автор работы считает, что доминантным механизмом осаждения капель на поверхность пленки является турбулентная диффузия:

$$S_d = 9\cdot 10^{-3} u_v \left(\frac{C}{\rho_v}\right)^{-0,5} \text{Re}_v^{-0,2}\,\text{Sc}_v^{-2/3} C, \quad (17)$$

где C, кг/м^3, – концентрация капель,

$$C = \frac{G_d}{\dfrac{G_v u_d}{\rho_v u_v} + \dfrac{G_d}{\rho_d}} = \frac{\alpha_d \rho_d}{\alpha_v + \alpha_d};$$

Sc_v – число Шмидта для пара (в качестве упрощения оно приравнивается единице); здесь $\text{Re}_v = \dfrac{\rho_v u_v \alpha_v D}{\mu_v}$.

При описании явления уноса предполагается, что для жидкости с низкой вязкостью (как у воды) срезание гребней валковой волны является главным механизмом гидродинамического уноса капель в парокапельное ядро:

$$S_e = 1,07\frac{u_v \mu_f \tau_{fv}}{\sigma^2}\left(\frac{\rho_f}{\rho_v}\right)^{0,4} \times \begin{cases} k_s, \text{ если } \text{Re}_v > 10^5; \\ k_s[2,136\lg(\text{Re}_v) - 9,68], \text{ если } \text{Re}_v < 10^5, \end{cases} \quad (18)$$

где $k_s = 0,57\delta + 21,73\cdot 10^3\delta^2 - 38,3\cdot 10^6\delta^3 +$

$+ 55{,}68 \cdot 10^9 \delta^4$.

Представленные в уравнениях баланса импульса сдвиговые напряжения (τ_{wf} – между стенкой канала и жидкой пленкой; τ_{vf} – между паром и жидкой пленкой; τ_{vd} – между паром и каплями) записываются в следующем виде:

$$\tau_{wf} = Cf_{wf} \frac{\rho_f}{2} u_f \left| u_f \right|; \tag{19}$$

$$\tau_{vf} = Cf_{vf} \frac{\rho_v}{2} (u_v - u_f) \left| u_v - u_f \right|; \tag{20}$$

$$\tau_{vd} = Cf_{vd} \frac{\rho_v}{2} (u_v - u_d) \left| u_v - u_d \right|, \tag{21}$$

где Cf_{kk} – соответствующие коэффициенты трения (силы сопротивления).

Коэффициент трения между паром и жидкой пленкой рассчитывается по модифицированной корреляции Уоллиса [12]:

$$Cf_{vf} = \frac{0{,}079}{\mathrm{Re}_v^{0{,}25}} \left(1 + 300 \frac{\delta}{D} \right), \tag{22}$$

где

$$\mathrm{Re}_v = \frac{\rho_v \left| u_v \right| (D - 2\delta)}{\mu_v}.$$

Коэффициент аэродинамического сопротивления капель рассчитывается по зависимости [13]:

$$Cf_{vd} = \left(0{,}4 + \frac{24}{\mathrm{Re}_d} + \frac{4}{\sqrt{\mathrm{Re}_d}} \right) \frac{1}{4}, \tag{23}$$

где

$$\mathrm{Re}_d = \max\left(0{,}1; \frac{\rho_v \left| u_v - u_d \right| D_d}{\mu_v} \right).$$

Коэффициент трения между жидкой пленкой и стенкой канала выражается следующим образом [14]:

$$Cf_{fw} = \max\left(\frac{16}{\mathrm{Re}_{Dhf}}; \frac{0{,}079}{\mathrm{Re}_{Dhf}^{0{,}25}} \right), \tag{24}$$

где

$$\mathrm{Re}_{Dhf} = \frac{u_f \rho_f \alpha_f D}{\mu_f}.$$

При записи замыкающих соотношений следует также уделить внимание формулировке используемых геометрических характеристик (представлены далее); к ним относятся:

периметры межфазных взаимодействий;

периметр взаимодействия жидкой пленки со стенкой канала;

средняя толщина жидкой пленки;

средний диаметр капель.

Периметр межфазной поверхности между паром и каплями следует выражению

$$\Pi_{id} = \frac{6\alpha_d}{D_d}. \tag{25}$$

Периметр межфазной поверхности между паром и жидкой пленкой:

$$\Pi_{if} = \pi(D - 2\delta), \tag{26}$$

где $\delta = 0{,}5D(1 - \sqrt{1 - \alpha_f})$ (средняя толщина жидкой пленки).

Периметр поверхности между жидкой пленкой и стенкой канала:

$$\Pi_{wf} = \pi D. \tag{27}$$

Диаметр капли рассчитывается по методике, принятой в работе [14]:

$$D_d = \max(8{,}4 \cdot 10^{-5}; \min[D_{d1}; D_{d2}]), \tag{28}$$

$$D_{d1} = 7{,}96 \cdot 10^{-3} \frac{\sigma}{\rho_v j_v} \mathrm{Re}_v \left(\frac{\rho_d}{\rho_v} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu_v}{\mu_d} \right)^{2/3}, \tag{29}$$

где j_v – приведенная скорость,

$$j_v = \frac{u_v \rho_v A \alpha_v}{\rho_v A} = u_v \alpha_v;$$

число Рейнольдса

$$\mathrm{Re}_v = \frac{\rho_v \left| j_v \right| D}{\mu_v};$$

$$D_{d2} = 0{,}254 L \Big[-0{,}13 We_v + \sqrt{16 + (0{,}13 We_v)^2} \Big], \tag{30}$$

где L – характерный размер (взят как внутренний диаметр канала D);

$$We_v = \frac{\rho_v j_v^2 L}{\sigma}.$$

Численный метод

При переходе к конечно-разностной записи системы введем псевдовекторную запись следующего вида:

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_{k,m} \\ W_{k,i} \\ W_{k,e} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A\alpha_k \rho_k u_k \\ A\alpha_k \rho_k u_k^2 \\ A\alpha_k \rho_k u_k H_k \end{pmatrix}; \qquad (31)$$

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} S_{k,m} \\ S_{k,i} \\ S_{k,e} \end{pmatrix}, \qquad (32)$$

где $\mathbf{W}$ – вектор потоков; $\mathbf{Q}$ – вектор правых частей; индекс k определяет принадлежность к соответствующей «жидкости» (пар, капля, жидкая пленка).

Используем двухточечную аппроксимацию и перейдем к конечно-разностной записи системы уравнений:

$$\frac{W_{k,p}^{n+1} - W_{k,p}^{n}}{\Delta x} = S_{k,p}^{n+1};\ p = m, e; \qquad (33)$$

$$\frac{W_{k,i}^{n+1} - W_{k,i}^{n}}{\Delta x} + \bar{\alpha}\bar{A}\left(\frac{P^{n+1} - P^{n}}{\Delta x}\right) = S_{k,i}^{n+1}; \qquad (34)$$

$$\sum_k (\alpha_k^{n+1}) = 1, \qquad (35)$$

где индекс p обозначает принадлежность к определенному уравнению баланса (m – массы, i – импульса, e – энергии).

При этом в псевдовекторной формулировке, уравнения баланса импульса и энергии записываются идентично, и поэтому объединены. Поскольку вектор потоков не является линейным, с целью достижения сходимости процесса разбиваем искомые величины на следующем шаге на сумму известной величины $W_p^{n+1,s}$ с предыдущей итерации и их приращений на искомой итерации $\Delta W_p^{n+1,s+1}$, что приводит рассматриваемую систему уравнений к виду:

$$\frac{W_{k,p}^{n+1,s} + \Delta W_{k,p}^{n+1,s+1} - W_{k,p}^{n}}{\Delta x} = S_{k,p}^{n+1,s};\ p = m, e; \qquad (36)$$

$$\frac{W_{k,i}^{n+1,s} + \Delta W_{k,i}^{n+1,s+1} - W_{k,i}^{n}}{\Delta x} + \bar{\alpha}\bar{A}\left(\frac{P^{n+1,s} + \Delta P^{n+1,s+1} - P^{n}}{\Delta x}\right) = S_{k,i}^{n+1,s}; \qquad (37)$$

$$\sum_k (\alpha_k^{n+1,s} + \Delta\alpha_k^{n+1,s+1}) = 1. \qquad (38)$$

Оставляя приращения в левой части уравнения, перенесем остальные слагаемые в правую часть и тем самым сведем решение системы к нахождению приращений искомых функций. Таким же образом представим искомый вектор потоков через вектор примитивных переменных:

$$f = (\alpha_k, T_k, u_k, P)^T.$$

В результате система сводится к матричной записи вида

$$M^{n+1.s}\Delta f^{n+1,s+1} = \mathbf{B}^{n+1,s}, \qquad (39)$$

которая решается методом Гаусса; $\mathbf{B}^{n+1,s}$ –

Таблица

Коэффициенты матрицы преобразования $M^{n+1,s}$

Уравнение баланса	$\Delta\alpha_k$	ΔT_k	Δu_k	...	ΔP
массы	$A\rho u$	$A\alpha u \frac{\partial\rho}{\partial T}$	$A\alpha\rho$	...	$A\alpha u \frac{\partial\rho}{\partial P}$
импульса	$A\rho u^2$	$A\alpha u^2 \frac{\partial\rho}{\partial T}$	$A\alpha\rho 2u$	...	$A\alpha u^2 \frac{\partial\rho}{\partial P} + \bar{A}\bar{\alpha}$
энергии	$A\rho u H$	$A\alpha u E \frac{\partial\rho}{\partial T} + A\alpha\rho u \frac{\partial e}{\partial T}$	$A\alpha\rho(H + u^2)$	...	$A\alpha u\left(E\frac{\partial\rho}{\partial P} + \rho\frac{\partial e}{\partial P} + 1\right)$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
фаз	1	0	0	...	0

вектор правых частей; $M^{n+1,s}$ – матрица преобразования вектора потоков к вектору примитивных переменных.

Коэффициенты матрицы $M^{n+1,s}$ можно получить путем векторного дифференцирования вектора потоков по вектору примитивных переменных:

$$\Delta W^{n+1,s+1} = \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{f}}\right)^{n+1,s} \Delta f^{n+1,s+1} =$$
$$= M^{n+1,s} \Delta f^{n+1,s+1}.$$

Матрица $M^{n+1,s}$ имеет повторяющуюся блочную структуру с размером блоков 3 × 3 (см. таблицу).

Рассматриваемый алгоритм применим для решения задач, в которых реализуются сонаправленные значения скоростей жидкостей.

Валидация модели

Представленная в настоящей работе трехжидкостная модель применялась для расчета двухфазного течения воды в адиабатической круглой трубе; за основу были взяты экспериментальные данные, полученные Дж. Вюрцем в работе [15]. В своей работе автор рассматривал течение пароводяного двухфазного потока в адиабатических круглых трубах с внутренним диаметром 10 и 20 мм, с диапазоном давлений 3 – 9 МПа и общих расходов 500 – 3000 кг/(м²·с).

С помощью модели, представленной в настоящей работе, было рассчитано в общей сложности 90 экспериментальных точек. Сравнение рассчитанных зависимостей падения полного давления dp/dx от относительного расхода пара G_{vrel} с измеренными представлено на рис. 1. G_{vrel} – это отношение абсолютного расхода пара к сумме расходов всех трех «жидкостей».

Как видно из представленных результатов, качественно рассчитанные зависимости практически совпадают с экспериментальными. Они имеют одинаковые наклоны, причем даже в случае зависимостей со знакопеременной производной. При количественном анализе этих данных наблюдаются небольшие расхождения, которые хорошо выявляются, если построить график зависимостей рассчитанных падений полного давления от экспериментально измеренных (рис. 2). Указанные расхождения можно объяснить не вполне удачным выбором формулировки замыкающих соотношений. В трехжидкостной модели именно эти соотношения содержат

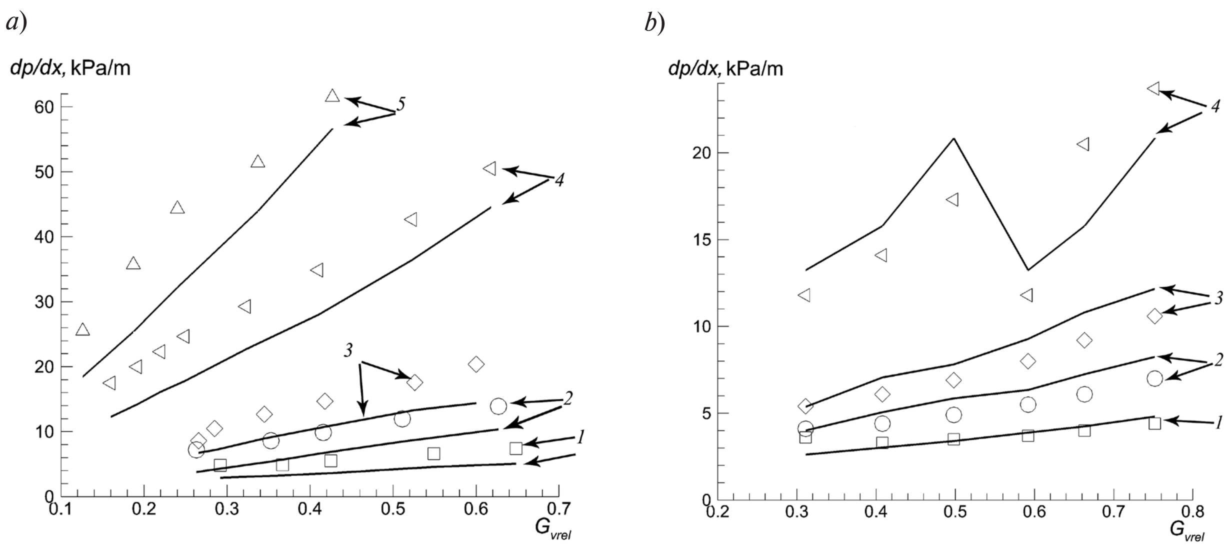


Рис. 1. Экспериментальные (символы) и расчетные (линии) зависимости падения полного давления в канале от относительного расхода пара для внутренних диаметров канала D = 10 мм (*a*) и 20 мм (*b*), при различных значениях общего расхода, кг/(м²·с): 500 (*1*), 750 (*2*), 1000 (*3*), 2000 (*4*), 3000 (*5*). Давление P = 7 МПа

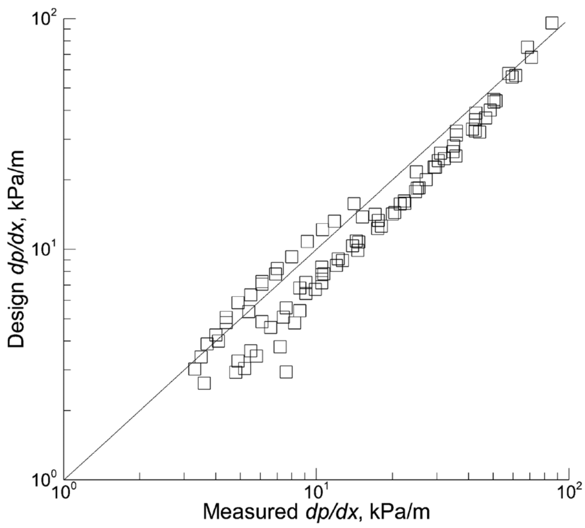


Рис. 2. Связь рассчитанного падения полного давления в канале с измеренными значениями для всех использованных экспериментальных данных работы [15]

физику процессов, а следовательно, определяют расчетный результат. Оптимизация замыкающих соотношений не является целью данной работы.

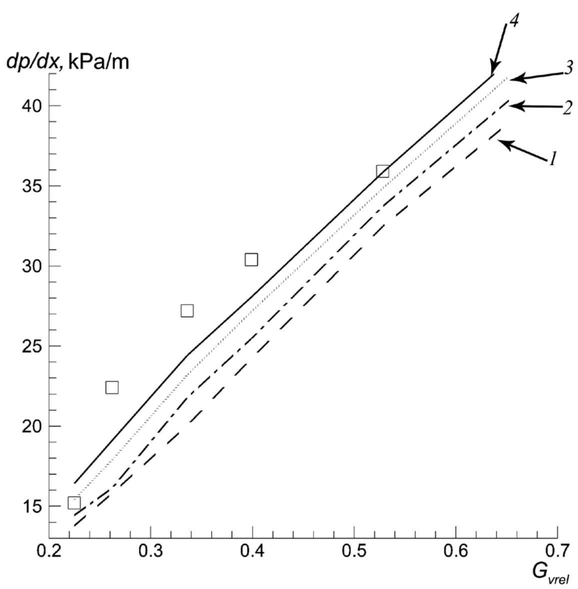


Рис. 3. Зависимости, аналогичные представленным на рис. 1, которые получены для различных коэффициентов шероховатости: 1,00 (*1*), 1,20 (*2*), 1,50 (*3*), 1,85 (*4*); P = 3 МПа, D = 10 мм

Однако можно показать, что учет дополнительных факторов, например шероховатости трубы (который усложнит выражение для коэффициента трения между пленкой и стенкой канала), позволяет приблизить результаты расчета к экспериментально измеренным значениям. Результат такого уточнения расчетов представлен на рис. 3. Для простоты шероховатость трубы учитывается в коэффициенте трения вариацией множителя, а расчеты проведены только для одной серии экспериментов (давление – 3 МПа, общий расход – 1000 кг/(м^2·с), внутренний диаметр канала – 10 мм). Данные рис. 3 наглядно демонстрируют, что путем увеличения коэффициента шероховатости можно приблизить расчетное значение падения полного давления к экспериментально измеренному.

Заключение

В данной работе был разработан численный метод решения стационарной задачи о течении двухфазного пароводяного потока в одномерном приближении при дисперсно-кольцевом режиме течения с использованием трехжидкостной формулировки. Интегрируемая система уравнений учитывает теплообмен между фазами и стенкой канала, трение между фазами и стенкой канала, унос и осаждение на поверхности жидкой пленки, а также взаимодействие поля тяжести для каналов постоянного и переменного сечения.

Выполнено начальное тестирование разработанной вычислительной модели посредством сопоставления результатов расчетов с экспериментальными данными Дж. Вюрца [15]. Сравнение показало, что представленная в настоящей работе трехжидкостная модель хорошо описывает рассматриваемую серию экспериментов с парожидкостным потоком и качественно полученные зависимости полностью повторяют экспериментальные. При этом существуют количественные расхождения, не превышающие 20 %. Однако показано, что указанные расхождения можно снижать путем корректировки замыкающих соотношений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Sami S.M**. An improved numerical model for annular two-phase flow with liquid entrainment // Int. Comm. Heat Mass Transfer. 1988. Vol. 15. No. 1. Pp. 281–292.

2. **Sugowara S.** Droplet deposition and entrainment modeling based on the three-fluid model // Nuclear Engineering and Design. 1990. Vol. 122. No. 1–3. Pp. 62–84.

3. **Hoyer N.** Calculations of dry-out and postdry-out heat transfer for tube geometry // International Journal of Multiphase Flow. 1997. Vol. 24. No. 2. Pp. 319–334.

4. **Алипченков В.М., Зайчик Л.И., Зейгарник Ю.А., Соловьев С.Л., Стоник О.Г.** Развитие трехжидкостной модели двухфазного потока для дисперсно-кольцевого режима течения в каналах. Размер капель// Теплофизика высоких температур. 2002. Т. 40. № 4. С. 641–651.

5. **Jayanti S., Valette M.** Prediction of dry-out and postdry-out heat transfer at high pressures using one-dimensional three-fluid model // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2004. Vol. 47. No. 22. Pp. 4895–4910.

6. **Stevanovic V., Stanojevic V., Radic M.D.** Three-fluid model predictions of pressure changes in condensing vertical tubes // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2008. Vol. 51. No. 15–16. Pp. 3736–3744.

7. **Saffari H., Dalir N.** Effect of virtual mass force on prediction of pressure changes in condensing tubes // Thermal Science. 2012. Vol. 16. No. 2. Pp. 613–622.

8. **Bulovich S.V., Smirnov E.M.** Experience in using a numerical scheme with artificial viscosity at solving the Riemann problem for a multi-fluid model of multiphase flow // AIP Conference Proceedings. 2018. Vol. 1959. Pp. 050007-1–050007-8.

9. **Bestion D.** The physical closure laws in the CATHARE code // Nuclear Engineering and Design. 1990. Vol. 124. No. 3. Pp. 229–245.

10. **Броунштейн Б.И., Бишбейн Г.А.** Гидродинамика, массо- и теплообмен в дисперсных системах. Ленинград: Химия, 1977. 280 с.

11. **Кутателадзе С.С., Боришанский В.М.** Справочник по теплопередаче. М.: Госэнергоиздат, 1958. 414 с.

12. **Wallis G.B.** One-dimensional two-phase flow. New York: McGraw-Hill, 1969. 408 p.

13. **Нигматулин Р.И.** Динамика многофазных сред. В 2-х ч. Ч. 1. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1987. 464 с.

14. **Юдов Ю.В., Волкова С.Н., Слуцкий А.А.** КОРСАР/В1.1. Теплогидравлический расчетный код. Методика расчета замыкающих соотношений и отдельных физических явлений контурной теплогидравлики. Сосновый Бор, 2001. 147 с.

15. **Würtz J.** An experimental and theoretical investigation of annular steam-water flow in tubes and annuli at 30 to 90 bar. Roskilde, Denmark: Technical University of Denmark. Ris. Report. 1978. No. 372. 141 p.

Статья поступила в редакцию 13.07.2018, принята к публикации 07.08.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АВДЕЕВ Евгений Эдуардович – *студент Института прикладной математики и механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

ПЛЕТНЕВ Александр Александрович – *кандидат технических наук, доцент кафедры гидродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

БУЛОВИЧ Сергей Валерьевич – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры гидродинамики, горения и теплообмена Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

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

REFERENCES

[1] **S.M. Sami,** An improved numerical model for annular two-phase flow with liquid entrainment, Int. Comm. Heat mass transfer. 15 (1) (1988) 281–292.

[2] **S. Sugowara,** Droplet deposition and entrainment modeling based on the three-fluid model, Nuclear Engineering and Design. 122 (1–3) (1990) 62–84.

[3] **N. Hoyer,** Calculations of dry-out and postdry-out heat transfer for tube geometry, Int. J. Multiphase Flow. 24 (2) (1997) 319–334.

[4] **V.M. Alipchenkov, L.I. Zaichik, Yu.A. Zeigarnik, et al.,** The development of a three-fluid model of two-phase flow for a dispersed-annular mode of flow in channels: size of droplets, Heat and Mass Transfer and Physical Gasdynamics. 40 (4) (2002) 641–651.

[5] **S. Jayanti, M. Valette,** Prediction of dry-out and postdry-out heat transfer at high pressures using one-dimensional three-fluid model, Int. J. Heat and Mass Transfer. 47 (22) (2004) 4895–4910.

[6] **V. Stevanovic, M. Stanojevic, D. Radic,** Three-fluid model predictions of pressure changes in condensing vertical tubes, Int. J. Heat and Mass Transfer. 51 (15–16) (2008) 3736–3744.

[7] **H. Saffari, N. Dalir,** Effect of virtual mass force on prediction of pressure changes in condensing tubes, Thermal Science. 16 (2) (2012) 613–622.

[8] **S.V. Bulovich, E.M. Smirnov**, Experience in using a numerical scheme with artificial viscosity at solving the Riemann problem for a multi-fluid model of multiphase flow, AIP Conference Proceedings. 1959 (2018) 050007-1–050007-8.

[9] **D. Bestion,** The physical closure laws in the CATHARE code, Nuclear Engineering and Design. 124 (3) (1990) 229–245.

[10] **B.I. Brounshteyn, G.A. Bishbeyn,** Gidrodinamika, masso- i teploobmen v dispersnykh sistemakh [Hydrodynamics, mass and heat exchange in the dispersion systems], Leningrad, Chemistry PH, 1977.

[11] **S.S. Kutateladze, V.M. Borishanskiy,** Spravochnik po teploperedache [Manual of heat transfer], The State Energetic PH, Moscow, 1958.

[12] **G.B. Wallis,** One-dimensional two-phase flow, McGraw-Hill, NewYork, 1969.

[13] **R.I. Nigmatulin,** Dinamika mnogofaznykh sred v 2 ch. Ch.1. [Multiphase mixture dynamics, in 2 parts, P. 1], Moscow, Nauka, 1987.

[14] **Yu.V. Yudov, S.N. Volkova, A.A. Slutskiy,** KORSAR/V1.1 teplogidravlicheskiy raschetnyy kod, metodika rascheta zamykayushchikh sootnosheniy i otdelnykh fizicheskikh yavleniy konturnoy teplogidravliki [KORSAR/V1.1 thermal and hydraulic calculation code, design procedure of constitutive relationships and separate physical phenomena of contour heathydraulics], Sosnoviy Bor, 2001.

[15] **J. Würtz,** An experimental and theoretical investigation of annular steam-water flow in tubes and annuli at 30 to 90 bar, No. 372, Technical university of Denmark, Roskilde, 1978, 141 p.

Received 13.07.2018, accepted 07.08.2018.

THE AUTHORS

AVDEEV Evgeniy E.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
avdeev-evgeni@yandex.ru

PLETNEV Alexander A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
aapletnev@yandex.ru

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

АСТРОФИЗИКА

DOI: 10.18721/JPM.11312
УДК 528.2

РАДИОИЗЛУЧЕНИЕ ЗВЕЗД В СОЗВЕЗДИИ ЕДИНОРОГА

А.А. Липовка, Н.М. Липовка

Центр физических исследований Университета Соноры, г. Эрмосильо, Мексика

В работе выполнены оптические отождествления ярких звезд, расположенных в созвездии Единорога, с сильными радиоисточниками. Созвездие Единорога проецируется на яркую часть Млечного Пути, для которой характерны высокие плотности звезд и газа. На исследуемой площадке размером один квадратный градус расположено семнадцать звезд ярче 11^m, которые удалось отождествить с радиоисточниками по данным NVSS-обзора NRAO-обсерватории. Обнаружена значительная радиорефракция в межзвездной среде. Установлено, что двенадцать звезд из семнадцати имеют нетепловой спектр радиоизлучения.

Ключевые слова: система координат, оптическое отождествление радиоисточников, межзвездная среда.

Ссылка при цитировании: Липовка А.А., Липовка Н.М. Радиоизлучение звезд в созвездии Единорога // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2018. Т. 11. № 3. С. 133–142. DOI: 10.18721/JPM.11312

RADIO EMISSION OF STARS IN THE MONOCEROS CONSTELLATION

A.A. Lipovka, N.M. Lipovka

Center of Physical Studies, University of Sonora, Hermosillo, Mexico

In the present paper, the optical identifications of the bright stars from the Monoceros constellation with strong radio sources have been suggested. The Monoceros constellation is projected on the bright region of the Milky Way, where the densities of the stars and gas are rather high. 17 stars brighter than 11^m are located within the one square degree plate under investigation. All these stars were identified with radio sources from NVSS survey of NRAO observatory. Considerable radio refraction was revealed in the interstellar medium. It was found that twelve stars among seventeen ones exhibited radio emission characterized by non-thermal spectrum.

Key words: coordinates system, optical identification of radio objects, interstellar space.

Citation: A.A. Lipovka, N.M. Lipovka, Radio emission of stars in the Monoceros constellation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 133–142. DOI: 10.18721/JPM.11312

Введение

Первым, кто пришел к выводу о существовании межзвездной среды, был В.Я. Струве, который в 1847 году из теоретических соображений сделал вывод о том, что пространство между звездами должно быть заполнено газом. Позднее предположение Струве было подтверждено наблюдениями, выполненными Б.А. Воронцовым-Вельяминовым, и (независимо от него)

Р. Трюмплером, которые обнаружили поглощение света в межзвездной среде. С появлением радиоастрономии в 30-х годах XX века, начались наблюдения космического пространства в метровом и сантиметровом диапазонах длин волн, а после второй мировой войны были получены независимые экспериментальные подтверждения того, что межзвездное пространство заполнено газом, который ионизируется ближайшими звездами [1]. По этой причине, при исследовании небесных радиоисточников и их отождествлении с оптическими объектами необходимо учитывать характеристики указанной среды, которая влияет на характер распространения радиоволн в межзвездной и межгалактической среде, а также в ионосфере и атмосфере Земли.

Распределение радиоизлучения по Млечному Пути (его «радиояркости»), полученное по наблюдениям на волне 6,4 см при помощи 12-метрового параболического радиотелескопа [2] и Большого пулковского радиотелескопа (БПР) диаметром 100 м [3], подтвердило факт того, что ионизированный водород (HII) концентрируется к плоскости Галактики, где плотность звезд велика.

В работе [3] был проведен анализ всех радиоданных по распределению радиояркости северного неба в диапазоне частот от 0,4 до 7700 МГц. Оказалось, что корона Галактики представляет собой радиоизлучение релятивистских электронов в магнитном поле этой короны (синхротронное излучение) и потому имеет нетепловой характер, покрывая область 20 × 25 кпс (килопарсек) вокруг центра Галактики [3]. При этом размер короны Галактики оказался в два раза больше, чем предполагалось ранее [1]. Вычисления характеристик радиоизлучающей среды (плотности релятивистских электронов и магнитного поля) в короне Галактики [3] были выполнены в соответствии с механизмом синхротронного радиоизлучения релятивистских электронов в магнитном поле [4].

Несовпадение радио- и оптических координат небесных объектов (далее для краткости мы будем применять термин «радио – оптика») было замечено в самом начале появления радиоастрономии, как самостоятельного раздела астрофизики. Первая ошибка по привязке радиоизлучения небесных объектов к оптическому небу была допущена при введении обновленного каталога 3C [5], предложенного в 1962 году в качестве опорного. При этом не указывалось, каким оптическим объектам соответствуют наблюдаемые радиообъекты. Однако в то время это не было столь критично, поскольку обзор был выполнен с низким разрешением ($\Theta = 13{,}6' \times 4{,}6°$) на частоте 178 МГц и в нем, по сути, были осреднены все позиции радиоисточников, расположенных на небесной площадке размером один квадратный градус. Причиной ошибки являлась очень широкая диаграмма направленности радиотелескопа, имеющая карандашную форму [5].

Исследования по оптическим отождествлениям небесных объектов радио – оптика, выполненные в 1990 году в INAOE (Тонантсинтла, Мексика), подтвердили факт несовпадения координат оптических объектов, имеющих диффузное изображение, с радиообъектами [6].

В 1993 – 1997 гг. с помощью радиотелескопа Национальной радиоастрономической обсерватории (NRAO, штат Вирджиния, США) был выполнен обзор северного неба с высокой чувствительностью и хорошим разрешением ($\Theta = 45''$) на частоте 1400 МГц. При этом вновь подтвердился факт несовпадения объектов радио – оптика [7]. На основании полученных данных было сделано предположение, что радиоизлучают, в основном, небесные объекты, расположенные на большом удалении (квазары и далекие галактики, имеющие красные смещения больше единицы) [7], а межзвездная и межгалактическая среды представляют собой пустое пространство, в котором радиолуч распространяется по изотропной геодезической и доходит от самых удаленных объектов с миллисекундной точностью.

На основании такой точки зрения, в 2009 году на съезде Международного астрономического союза (МАС) была рекомендована система ICRF2 [8] для привязки небесных объектов радио – оптика, насчитывающая 3414 опорных радиоисточников. В представленном каталоге ICRF2 [8] отождествление радиообъектов с оптическими небесными объектами было выполнено методом кросс-корреляции между ними, и такие объекты были приняты в качестве опорных. Основная часть этих опорных объектов представляла собой радиоисточники, которые совпали случайным образом с далекими оптическими объектами квазизвездной структуры, плотность которых велика. Это предположение и явилось отправной точкой ошибки, допущенной при необдуманных попытках отождествить радиообъекты с оптическими.

Целью настоящей работы является выполнение альтернативного оптического отождествления ярких звезд из созвездия Единорога, которые являются сильными радиоисточниками.

Опровержение справедливости принятия радиообъекта J(062153.45-041807.69) в качестве опорного

В настоящей работе исследуется площадка неба, которая проецируется на местный рукав Галактики, где велики плотности как звезд, так и газовой составляющей межзвездной среды, состоящей преимущественно из атомарного и ионизированного водорода. На краю исследуемой площадки расположен радиоисточник, рекомендованный в качестве опорного объекта для привязки объектов радио – оптика по каталогу ICRF2 [8].

На рис. 1 представлено изображение радиообъекта J(062153.45-041807.69) в виде изофот (линии равной интенсивности излучения радиоволн) [7], наложенных на изображение оптического неба по данным работы [9]. Видно, что рассматриваемый радиообъект имеет двухкомпонентную структуру и в область этого объекта попадает более 15 других оптических объектов квазизвездной структуры. По этой причине невозможно определить, какой из оптических объектов излучает радиоволны, и поэтому радиообъект J(062153.45-041807.69) следует исключить из списка опорных объектов каталога [8], где он рекомендован для высокоточной привязки «радионеба» к оптическому небу.

Кроме того, в ближайшей окрестности опорного объекта, имеющей размер порядка двух квадратных градусов, ни один радиоисточник не совпадает с каким-либо оптическим объектом, если пользоваться привязкой, предложенной в каталоге [8]. Следует также отметить, что координаты радиообъекта J(062153.45-041807.69), включенного в опорный каталог [8], были определены в метровом диапазоне длин волн [10], где, как известно, существует значительная радиорефракция в ионосфере Земли; а это явление не учитывалось при определении радиокоординат этого объекта.

В 1962 году австралийский исследователь М.М. Комесарофф [11] выполнил обзор неба на частоте 19,7 МГц в Австралии и Новой Зеландии и обнаружил, что в метровом диапазоне длин волн радиоволны испытывают значительную радиорефракцию в ионосфере Земли на высотах более 350 км.

В настоящее время уже установлено, что координаты радиообъектов, полученные в сантиметровом диапазоне длин волн, изменены радиорефракцией в тропосфере Земли и, вследствие этого явления, отличаются от координат радиообъектов, полученных в метровом диапазоне.

Ошибки, допущенные при привязке небесных объектов радио – оптика, подробно рассмотрены в работе [12]. При исследовании небесных радиоисточников и их отождествлении с оптическими объектами необходимо также учитывать параметры среды, которая влияет на характер распространения радиоволн в межзвездной и межгалактической средах.

Согласно нашей методике привязки объектов радио – оптика [13], следует считать, что отождествление выполнено правильно, если на исследуемой площадке размером в один квадратный градус совпало три и более радиоисточников с объектами, видимыми в оптическом диапазоне длин волн. Совпадение трех и более объектов требуется еще и для того, чтобы учесть разворот исследуемой площадки, часто возникающий при сканировании участка неба размером в один квадратный градус, в азимуте на радиоинтерферометре [14].

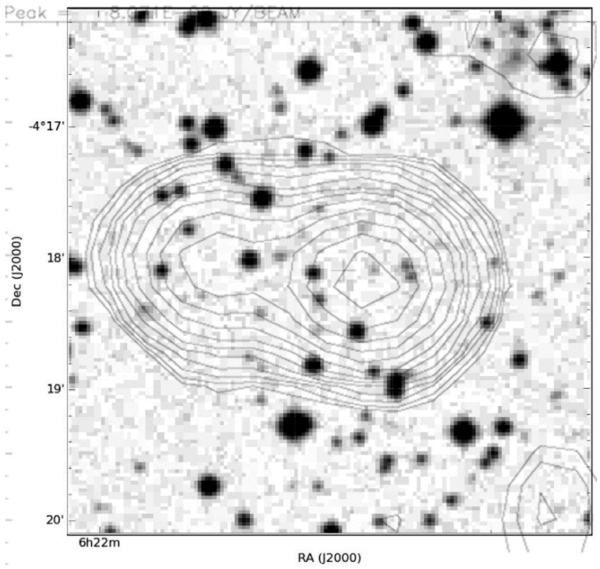


Рис. 1. Координаты опорного радиообъекта J(062153.45041807.69) (согласно работе [8]), наложенные на оптическое изображение: радиообъект изображен в виде изофот, наложенных на изображение участка оптического неба (площадки). По осям отложены координаты на эпоху 2000.0 (J). RA – прямое восхождение, h, m (ч, мин) и DEC – склонение, град, мин

Отождествление радиообъектов со звездами в созвездии Единорога

Первые оптические отождествления были выполнены нами в Мексике, в Национальном институте астрономии оптики и электроники (INAOE, Тонантсинтла) в 1985, 1990, 1993, 1994 гг. при помощи блинк-компаратора фирмы Цейс с точностью

$$\sigma RA \times \sigma DEC = 1,5'' \times 1,5''$$

по всем правилам астрометрии.

При этом было обнаружено, что радиообъекты попадают в пустое поле (empty field) в оптическом изображении неба [6]. Несовпадение радиоисточников с оптическими небесными объектами, существующее и по сей день, объяснялось и многими сейчас объясняется тем, что радиоизлучение исходит от очень далеких компактных объектов (радиогалактик и квазаров), находящихся на краю наблюдаемой Вселенной.

Возможности астрофизики, как и остальных наук, неизмеримо выросли с развитием процесса компьютеризации и появлением Интернета. Практически все результаты изучения небесных объектов в радио- и оптическом диапазонах были занесены в Интернет, что создало блестящие предпосылки для пересмотра имеющихся отождествлений радио – оптика.

В 2007 году мы снова приступили к указанным отождествлениям объектов и обнаружили, что привязка объектов радио – оптика выполнена неверно и что большинство ярких звезд излучают в радиодиапазоне.

Нами разработан и уже много лет успешно используется метод отождествления объектов радио – оптика, основанный на привязке радиоисточников к ярким звездам (метод «Липовки – Костко – Липовка» (ЛКЛ, англ. LKL)) [13].

В настоящей работе выполнены отождествления радиоисточников по данным NVSS-радиообзора NRAO-обсерватории [14] со звездами в созвездии Единорога. Исследуемая площадка неба (рис. 2) проецируется на местный рукав Галактики, где плотность звезд велика.

Привязка радиообъектов к звездам (рис. 2) показала наличие значительной радиорефракции в межзвездной среде, что вполне ожидаемо, поскольку данный участок неба находится в местном спиральном рукаве, для которого характерно большое содержание газа. Плотность звезд на этом участке также велика, и поэтому с радиообъектами отождествились 17 звезд ярче 11^m. Дополнительно семь слабо излучающих звезд были отождествлены со «слабыми» радиоисточниками, плотность потока излучения которых лежит ниже порога чувствительности (P < 2,5 мЯн); такое пороговое значение принято в обзоре [14]. На рис. 2 эти звезды обозначены буквой «a» и в данной работе не рассматриваются, поскольку они отсутствуют в каталоге [15]. Однако совпадение семи слабо светящихся звезд с семью слабо излучающими радиоисточниками, на площадке размером менее 0,2 кв. град, подтверждает правильность выполненного отождествления, представленного на рис. 2 и в табл. 2.

Разработанный нами метод привязки радионеба к оптическому небу (метод ЛКЛ, англ. LKL [13]) основан на использовании

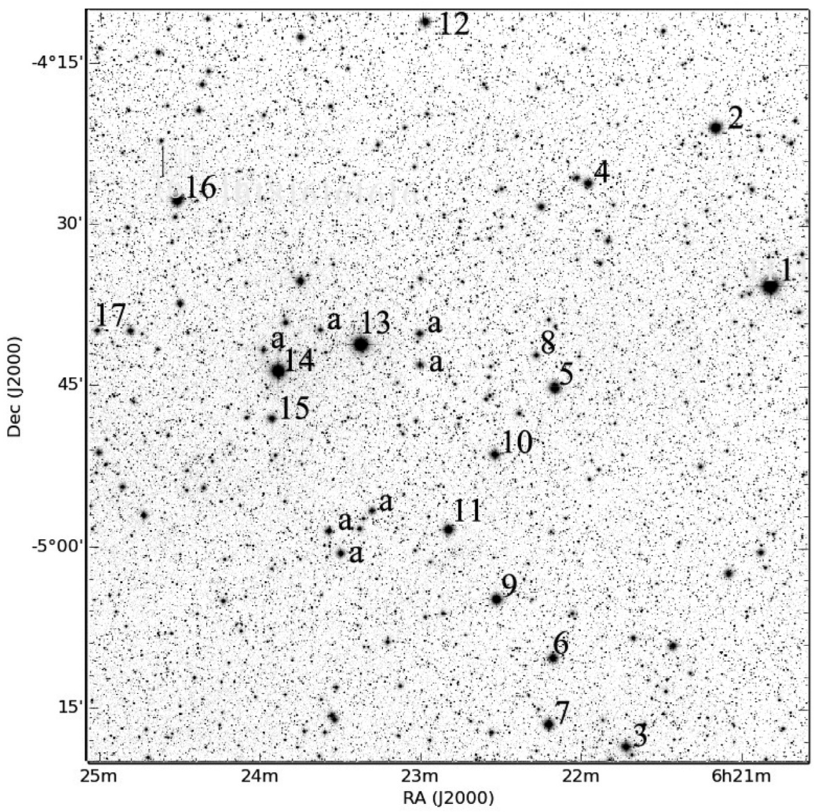


Рис. 2. Изображение участка звездного неба, для которого выполнено отождествление 17 звезд (пронумерованы) с сильными радиоисточниками по данным радиообзоров [9, 14]; небесные объекты, обозначенные буквой «а», отождествлены с очень слабыми радиоисточниками и в данной работе не рассматриваются

данных фундаментальных каталогов звезд [16], и привязка радиоисточников производится непосредственно к звездам, плотность которых и точность измеренных координат достаточна для выполнения уверенной привязки координат радиоизлучающих небесных объектов к объектам, регистрируемым при оптических наблюдениях.

В табл. 1 приведены общепринятые имена звезд [16] и экваториальные координаты звезд по данным каталога UCAC3 [17] на эпоху 2000.0 (J) (столбцы 3 и 4). В столбце 5 приведен параллакс звезды, в шестом – ее звездная величина.

На исследуемом участке неба, согласно данным NVSS-обзора [14], ни один радиоисточник не был отождествлен с оптическим объектом. Использование же нашего метода привязки радиообъектов к звездному небу [13] позволило отождествить 17 сильно излучающих радиоисточников с яркими звездами (см. рис. 2 и табл. 2).

В табл. 2 приведены экваториальные координаты радиоисточников на частоте 1400 МГц (столбцы 2 и 3) по данным работы [15], которые были получены нами в процессе отождествления с оптически наблюдаемыми звездами (см. табл. 1 и рис. 2).

Координаты радиообъектов, исправленные за привязку к звездам, представлены в столбцах 6 и 7 (табл. 2).

Нумерация радиоисточников в табл. 2 соответствует нумерации звезд в табл. 1 и на рис 2. В столбце 4 (табл. 2) приведена плотность потока по данным [15].

Для нескольких радиоисточников, расположенных на этой площадке (см. рис. 2), имеются измерения плотности потока на частотах $\nu = 150 - 1400$ МГц по каталогу [15]. Для этих объектов был вычислен спектральный индекс радиоизлучения α (табл. 2, столбец 5). Спектр радиоизлучения

Таблица 1

Имена [16] и координаты звезд по каталогу UCAC3 [17] на эпоху 2000.0 (J)

Звезда		RA(J), h m s	DEC(J) град, мин, с	ε Pos mas	Mag *m*
№	Имя				
1	HD 44286	06 20 50,466	−04 35 43,70	1270	6,68
2	HD 44335	06 21 10,845	−04 21 00,18	10	7,84
3	HD 44457	06 21 43,488	−05 18 34,15	26	8,92
4	HD 294985	06 21 58,328	−04 26 14,34	34	9,02
5	HD 44546	06 22 10,445	−04 45 13,06	11	7,92
6	HD 44565	06 22 10,867	−05 10 20,73	29	8,80
7	HD 44566	06 22 12,414	−05 16 31,21	26	8,38
8	HD 294989	06 22 17,423	−04 42 10,80	21	10,74
9	HD 44620	06 22 31,967	−05 04 53,95	91	8,18
10	HD 44619	06 22 32,671	−04 51 26,77	18	9,02
11	HD 44678	06 22 49,984	−04 58 25,83	32	8,30
12	HD44702	06 22 59,160	−04 11 13,50	22	8,50
13	HR 2295	06 23 22,793	−04 41 15,20	376	6,89
14	HD 44841	06 23 53,623	−04 43 43,88	102	6,99
15	HD 44856	06 23 53,863	−04 48 09,35	32	9,29
16	HD 295031	06 24 31,450	−04 27 58,40	42	8,44
17	HD295031	06 25 01,010	−04 40 00,00	20	10,08

Примечание. Номера звезд соответствуют приведенным на рис. 2.

Обозначения: RA(J) – прямое восхождение, DEC(J) – склонение, ε Pos mas – оптический параллакс, Mag, *m* – звездная величина.

этих звезд оказался нетепловым; плотность потока радиоизлучения $P \sim \nu^{-\alpha}$, где ν – частота наблюдения в радиодиапазоне.

В табл. 3 приведены поправки к координатам радиоисточников для трех групп объектов. Разница в значениях этих поправок обусловлена различной удаленностью исследуемых объектов от наблюдателя и наличием радиорефракции в межзвездной среде, которая в данном направлении оказалась значительной. Номера радиоисточников в каждой из трех групп приведены в столбце 1 и соответствуют номерам в табл. 1, 2 и на рис. 2.

Разница в поправках к координатам радиообъектов для трех групп звезд обусловлена различной удаленностью исследуемых объектов от наблюдателя и наличием радиорефракции в межзвездной среде, которая в данном направлении оказалась значительной.

Эти поправки (столбцы 2, 4, табл. 3) нужно прибавить (с учетом знака) к измеренным в радиодиапазоне координатам объектов (табл. 2, столбцы 2, 3), чтобы получить координаты радиообъектов, исправленные за привязку к оптическим объектам (табл. 2, столбцы 6, 7).

Заключение

На участке неба [14, 15], рассмотренном в данной статье, ни один радиоисточник не был отождествлен до нашего исследования с оптическим объектом в рамках методики привязки радионеба к оптике, предложенной в NVSS-обзоре [14]; методика предлагает использовать каталог ICRF2 [8], рекомендованный для привязки объектов радио – оптика.

Предложенный и использованный нами метод привязки радионеба к оптическому (метод ЛКЛ) в десятки раз увеличил ко-

Таблица 2

Сравнение данных для радиоисточников в обзоре NVSS с их исправленными значениями в результате привязки к звездам

№	Данные обзора NVSS [14, 15]				Исправленные значения координат	
	RA(J) h m s	DEC(J) град, мин, с	*P* мЯн	α	RA(J) h m s	DEC(J) град, мин, с
1	06 19 13,97	−04 35 53,2	13,5	0,60	06 20 48,8	−04 34 50,0
2	06 19 37,76	−04 22 21,0	46,7	0,70	06 21 12,7	−04 21 17,8
3	06 21 54,53	−05 27 22,6	26,7	0,86	06 21 47,6	−05 18 15,0
4	06 20 26,93	−04 27 13,1	51,7	−	06 22 01,4	−04 26 09,0
5	06 22 20,51	−04 53 57,6	319*	−	06 22 08,8	−04 44 49,3
6	06 22 17,87	−04 55 48,8	37,7	−	06 22 12,0	−05 10 03,5
7	06 22 23,71	−05 19 10,8	23,9	0,57	06 22 15,0	−05 16 25,0
8	06 22 26,70	−05 25 32,0	15,3	−	06 22 10,9	−04 41 38,8
9	06 22 47,48	−05 01 03,7	7,3	0,80	06 22 22,0	−05 05 14,4
10	06 22 28,50	−05 19 25,5	46,1	−	06 22 35,8	−04 52 00,0
11	06 22 42,36	−05 11 27,4	10,0	−	06 22 49,3	−04 57 17,0
12	06 21 19,50	−04 12 33,1	8,8	−	06 22 54,4	−04 11 29,0
13	06 23 17,87	−04 55 48,8	37,7	0,40	06 23 24,7	−04 41 38,1
14	06 23 43,57	−04 58 28,2	246,8	0,80	06 23 50,4	−04 44 18,2
15	06 22 21,56	−04 49 43,4	60,7	0,60	06 23.55,8	−04 48 49,4
16	06 24 38,40	−04 37 41,5	114,9	0,75	06 24 26,7	−04 28 34,5
17	06 24 49,73	−04 53 59,5	174,4	0,70	06 24 55,8	−04 39 49,0

Примечание. Номера звезд соответствуют приведенным на рис. 2 и в табл. 1 и 2.

Обозначения: *P* – плотность потока излучения радиообъекта, α – спектральный индекс радиоизлучения этих объектов ($P \sim \nu^{-\alpha}$, ν – частота наблюдения в радиодиапазоне); остальные обозначения идентичны приведенным в табл. 1.

Таблица 3

Поправки для привязки координат радиообъектов к оптическим данным для звезд

Номер звезды	ΔRA	$\pm\sigma_1$	ΔDEC	$\pm\sigma_2$
	m s	s	мин, с	с
1, 2, 4, 12, 15	1 30	2,9	−10 00	35,5
8, 9, 10, 11, 13, 14, 17	−7	1,3	−14 00	15,2
3, 5, 6, 7, 16	10	1,2	−7 00	10,6

Примечания. 1. Номера звезд соответствуют приведенным на рис. 2 и в табл. 1 и 2.
2. Чтобы получить исправленные значения координат каждой звезды, необходимо представленные значения поправки прибавить (с учетом знака) к координатам радиоисточника из обзора NVSS [14, 15] (см. табл. 2).

Обозначение: σ_i – абсолютные погрешности поправок. Остальные обозначения соответствуют приведенным в табл. 1.

личество радиоисточников, отождествленных с оптическими объектами. Установлено, что радиоисточники отождествляются преимущественно со звездами. При этом полученная поправка к радиокоординатам обусловлена рядом факторов:

точностью привязки объектов радио – оптика;

точностью измерения радиокоординат;

наличием радиорефракции в исследуемом направлении космического пространства.

Полученные результаты красноречиво свидетельствуют о том, что не следует выполнять оптические отождествления обзоров NRAO (Национальная радиоастрономическая обсерватория, штат Вирджиния, США) и DSS (Паломарская обсерватория, штат Калифорния, США) по координатному совпадению объектов радио – оптика, ввиду неверной привязки координат радиоисточников к объектам, видимым в оптическом диапазоне длин волн. Каждую одноградусную астрономическую площадку, отсканированную в NVSS-обзоре, необходимо привязывать к оптическому небу методом ЛКЛ, вне зависимости от указанного совпадения координат.

Применение предложенного метода дает правильную информацию об астрофизических характеристиках отождествленных объектов в широком диапазоне длин волн (радио – оптика).

На основе полученных результатов найдено разрешение парадокса, который заключался в том, что звезды не излучают радиоволн. На исследованной площадке, при правильной привязке радионеба к оптическому небу, отождествилось 17 звезд ярче 11^m.

Отождествления радио – оптика, проведенные в настоящей работе, подтвердили также факт наличия межзвездной среды на исследуемом участке космического пространства, что дополнительно подтверждается и изображением этого участка неба в инфракрасном диапазоне длин волн.

Благодарности

Авторы выражают благодарность сотрудникам Паломарской обсерватории и Национальной радиоастрономической обсерватории (NRAO) за выполнение обзора неба в оптическом диапазоне длин волн и в радиодиапазоне; благодарят создателей базы данных UCAC (USNO CCD Astrograph Catalog) и всех наблюдателей и исследователей, принимавших участие в создании базы данных для общего пользования.

Авторы также глубоко благодарны сотрудникам Астрономического центра данных Канады (CADC) и создателям базы данных в Страсбурге (Франция) за предоставленную возможность получать всю имеющуюся информацию о небесных объектах для научных исследований.

Авторы выражают искреннюю признательность О.В. Верходанову, С.А. Трушкину, В.Н. Черненкову и др. за создание базы данных CATS радиокаталогов Специальной астрофизической обсерватории РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Каплан С.А., Пикельнер С.Б.** Межзвездная среда. М.: Физматгиз, 1963. С. 11–118.

2. **Парийский Ю.Н., Гольнев В.Я., Липовка Н.М.** Предварительные результаты наблюдения Млечного Пути на волне 6,4 см в Пулково // Известия Главной астрономической обсерватории в Пулково. 1967. Т. XXIV. Вып. 6. № 182. С. 199–203.

3. **Липовка Н.М.** Радиоизлучение короны Галактики // Астрономический журнал. 1977. Т. 54. Вып. 6. С. 1211–1220.

4. **Гинзбург В.Л.** Теоретическая физика и астрофизика. Дополнительные главы. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1975. С. 70–90.

5. **Bennett A.S.** The revised 3C catalog of radio sources. MNRAS. 1962. Vol. 125. Pp. 75–86.

6. **Чавира-Наваррете Э., Липовка Н.М., Липовка А.А.** Оптические положения 748 слабых диффузных объектов и галактик в окрестности радиоисточников RC-каталога. Препринт № 88 Специальной астрофизической обсерватории РАН. Санкт-Петербург, 1993. С. 1–47.

7. **Condon J.J., Cotton W.D., Greisen E.W., Yin Q.F., Perley R.A., Taylor G.B., Broderick J.J.** The NRAO VLA Sky Survey // Astron. J. 1998. Vol. 115. No. 5. Pp. 1693–1716.

8. **Fey A.L., Ma C., Arias E.F., Charlot P., Feissel-Verner M., Gontier A.-M., Jacobs C.S., Li J., McMillan D.S.** The second extension of the International Celestial Reference Frame:

ICRF-EXT. 1// Astron. J. 2004. Vol. 127. No. 6. Pp. 3587–3608.

9. Digital Sky Survey System (DSS) – Canadian Astronomy Data Centre, DSS, CADC, URL: www3.cadc-ccda.hia-iha.nrc-cnrc.gc.ca/en/dss/.

10. **Douglas J.N., Bash F.N., Bozyan F.A., Wolfe Ch.** The Texas survey of radio sources covering –35.5 degrees < declination < 71.5 degrees // Astron. J. 1996. Vol. 111. No. 4. Pp. 1945–1963.

11. **Komesaroff M.M.** Ionospheric refraction in radio astronomy. I. Theory // Austr. J. Phys. 1960. Vol. 13. No. 2. Pp. 153–167.

12. **Липовка А.А., Липовка Н.М.** Проблемы привязки радионеба к оптическому небу. История и перспективы // Геодезия и картография. 2013. № 10. С. 2–7.

13. **Липовка А.А., Липовка Н.М.** Способ привязки координат небесных радиоисточников к оптической астрометрической системе координат. Патент на изобретение № 2 010107938/28(011185). ЛКЛ (англ. LKL), 2011.

14. The NRAO VLA Sky Survey.URL: http://www.cv.nrao.edu/NVSS/.

15. **Verkhodanov O.V., Trushkin S.A., Andernach H., Chernenkov V.N.** Current status of the CATS database // Bulletin SAO. 2005. No. 58. Pp. 118–129 (arXiv:0705.2959). URL: http://www.sao.ru/cats/

16. Canadian Astronomy Data Centre, www3.cadc-ccda.hia-iha.nrc-cnrc.gc.ca/en/.

17. **Zacharias N., Finch C., Girard T., et al.** The third US Naval Observatory CCD Astrograph Catalog (UCAC3). URL: http://vizier.u-strasbg.fr/viz-bin/VisieR

Статья поступила в редакцию 05.04.2018, принята к публикации 07.05.2018.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛИПОВКА Антон Адольфович – *кандидат физико-математических наук, профессор Центра физических исследований Университета Соноры, г. Эрмосильо, Мексика.*

83000, Mexico, Calle Rosales e Boulevard Luis, Encinas s/n Colonia Centro, Hernosillo.

nila_lip@mail.ru

ЛИПОВКА Неонила Михайловна – *кандидат физико-математических наук, астрофизик-исследователь, Санкт-Петербург, Российская Федерация.*

nila_lip@mail.ru

REFERENCES

[1] **S.A. Kaplan, S.B. Pikelner,** Mezhzvezdnaya sreda [Interstellar medium], Fizmatgiz, Moscow, 1963, P. 11–118.

[2] **Y.N. Parijsky, V.Y. Golnev, N.M. Lipovka,** The preliminary results of observations of the Milky Way at the wavelength of 6.4 cm obtained at the Pulkovo Observatory, Bulletin of the Main Astronomical Observatory in Pulkovo. 24(6(182)) (1967) 199–203.

[3] **N.M. Lipovka,** Radioizlucheniye korony Galaktiki [Galactic-corona radiation], Soviet Astronomy. 54 (6) (1977) 1211–1220.

[4] **V.L. Ginzburg,** Teoreticheskaya fizika i astrofizika. Dopolnitelniye glavy [Theoretical physics and astrophysics. Supplementary chapters], Nauka, Moscow, (1976) 70–99.

[5] **A.S. Bennett,** The revised 3C catalog of radio sources, MNRAS, 125 (1962) 75–86.

[6] **E. Chavira-Navarrete, N.M. Lipovka, A.A. Lipovka,** Opticheskiye polozheniya 748 slabykh diffuznykh obyektov i galaktik v okrestnosti radioistochnikov RC kataloga [Optical positions of 748 faint diffuse objects and galactics in the vicinity of radio sources from RC catalogue], Special Astrophysical Observatory of RAS, St. Petersburg, Preprint No. 88 (1993) 1–47.

[7] **J.J. Condon, W.D. Cotton, E.W. Greisen, et al.,** The NRAO VLA Sky Survey, Astron. J. 115 (5) (1998) 1693–1716.

[8] **A.L. Fey, C. Ma, E.F. Arias, et al.,** The second extension of the International Celestial Reference Frame: ICRF-EXT. 1, Astron. J. 127 (6) (2004) 3587–3608.

[9] Digital Sky Survey System (DSS) – Canadian Astronomy Data Centre, DSS, CADC, URL: www3.cadc-ccda.hia-iha.nrc-cnrc.gc.ca/en/dss/.

[10] **J.N. Douglas, F.N. Bash, F.A. Bozyan, Ch. Wolfe,** The Texas survey of radio sources covering –35.5 degrees < declination < 71.5 degrees, Astron. J. 111 (4) (1996) 1945–1963.

[11] **M.M. Komesaroff,** Ionospheric refraction in radio astronomy. I. Theory, Aust. J. Phys. 13 (2) (1960) 153–167.

[12] **A.A. Lipovka, N.M. Lipovka,** Problems of connection of radio sky to optical sky. History and perspective, Geodesy. 10 (2013) 2–7.

[13] **A.A. Lipovka, N.M. Lipovka,** Sposob privyazki koordinat nebesnykh radioistochnikov k opticheskoy astrometricheskoy sisteme koordinat. LKL [Method of referencing of celestial radio sources coordinates to optical astrometrical coordinate

system, Lipovka – Kostko – Lipovka, (LKL), Patent No. 2 010107938/28(011185), 2011.

[14] The NRAO VLA Sky Survey, URL: http://www.cv.nrao.edu/NVSS/.

[15] **O.V. Verkhodanov, S.A. Trushkin, H. Andernach, V.N. Chernenkov,** Current status of the CATS database, Bulletin SAO. 58 (2005) 118–129. (arXiv:0705.2959), URL: http://www.sao.ru/cats/.

[16] Canadian Astronomy Data Centre, www3.cadc-ccda.hia-iha.nrc-cnrc.gc.ca/en/.

[17] **N. Zacharias, C. Finch, T. Girard, et al.,** The third US Naval Observatory CCD Astrograph Catalog (UCAC3), URL: http://vizier.u-strasbg.fr/viz-bin/VisieR.

Received 05.04.2018, accepted 07.05.2018.

THE AUTHORS

LIPOVKA Anton A.
Center of Physical Studies, University of Sonora, Hermosillo, Mexico
nila_lip@mail.ru

LIPOVKA Neonila M.
nila_lip@mail.ru

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 11, № 3, 2018**

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Телефон редакции 294-22-85

Сайт http://ntv.spbstu.ru

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.Н. Смирнова*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 28.09.2018. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 18,3. Уч.-изд. л. 18,3. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Издательство Политехнического университета,
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико- математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ». **Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782**. В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание **ISSN 2304-9782** (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, **нежелательны** ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор **текста** осуществляется в редакторе **MS Word**.

6. **Формулы** (включая мелкие), а также символы и обозначения набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется буквой «е» и оставляется только в фамилиях.

7. **Рисунки** (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и **таблицы** оформляются в виде отдельных файлов. Рисунки представляются на английском языке и только в черно-белом варианте. Шрифт – **Times New Roman**, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (http://journals.spbstu.ru). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться ДОСРОЧНО.

Более подробную информацию можно получить по телефону редакции:
(812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Наталья Александровна
или по e-mail: physics@spbstu.ru