МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

TOM 13, №1 2020

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого 2020

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Боровков А.И., проректор по перспективным проектам; Варшалович Д.А., академик РАН; Глухих В.А., академик РАН; Жуков А.Е., чл.-кор. РАН; Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН; Рудской А.И., академик РАН; Сурис Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор; Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора; Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь; Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр Техасского университета, Даллас, США; Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Добода О.С., канд. физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США; Лобода О.С., канд. физ.-мат. наук, профессор, Университет Претории, ЮАР; Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Привалов В.Е., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Смирнов Е.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Словьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Смирнов Е.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Словьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Словьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Словьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Словьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Словьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Словьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Словьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Словьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия; Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Научно-исследовательский центр мезобионаносистем (MBN), Франкфурт-на-Майне, Германия;

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

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

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

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

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

Канберра, Австралия;

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

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

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

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

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

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс 71823. Журнал индексируется в базе данных **Web of** Science (Emerging Sources Citation Index), а также включен в базу данных **«Российский индекс научного ци**тирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте

http://www.elibrary.ru

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства:

Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

Тел. редакции (812) 294-22-85.

http://ntv.spbstu.ru/physics

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2020 THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics and Mathematics

VOLUME 13, No.1, 2020

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 2020

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

- A.I. Borovkov vice-rector for perspective projects;
- V.A. Glukhikh full member of RAS;
- D.A. Indeitsev corresponding member of RAS;
- VA.I. Rudskoy full member of RAS;
- *R.A. Suris* full member of RAS;
- *D.A. Varshalovich* full member of RAS;
- A.E. Zhukov corresponding member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

- V.K. Ivanov Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, editor-in-chief;
- A.E. Fotiadi Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, deputy editor-in-chief;
- *V.M. Kapralova* Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, executive secretary;
- V.I. Antonov Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;

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

- A.V. Blinov Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
- A.S. Cherepanov Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
- D.V. Donetski Dr. Sci. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;
- D.A. Firsov Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
- A.S. Kheifets Ph.D., prof., Australian National University, Canberra, Australia;
- O.S. Loboda Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
- J.B. Malherbe Dr. Sci. (physics), prof., University of Pretoria, Republic of South Africa;
- V.M. Ostryakov Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
- V.E. Privalov Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
- E.M. Smirnov Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
- A.V. Solov'yov Dr. Sci. (phys.-math.), prof., MBN Research Center, Frankfurt am Main, Germany;
- A.K. Tagantsev Dr. Sci. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;
- I.N. Toptygin Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
- E.A. Tropp Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia.

The journal is included in the List of leading peerreviewed 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 Π M Nº Φ C77-52144 issued December 11, 2012.

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

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

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

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

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

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

Phone: (812) 294-22-85.

http://ntv.spbstu.ru/physics

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2020

Содержание

Физика конденсированного состояния

Апушкинский Е.Г., Попов Б.П., Савельев В.П., Соболевский В.К., Круковская Л.П. Аномальное значение g-фактора парамагнитных центров железа в решетке топаза с сильным тетрагональным искажением	7
Математическое моделирование физических процессов	
Смирнов С.И., Смирнов Е.М. Прямое численное моделирование турбулентной конвекции Рэлея — Бенара в слегка наклоненном цилиндрическом контейнере	14
Пичугин Ю.А. Динамико-стохастический подход к построению и использованию моделей прогностического типа	26
Математическая физика	
Бердников А.С., Соловьев К.В., Краснова Н.К. Взаимно-однородные функции с матрицами конечного размера	42
Приборы и техника физического эксперимента	
Степанов В.А., Моос Е.Н., Шадрин М.В., Савин В.Н., Умняшкин А.В., Умняшкин Н.В. Триангуляционный датчик для измерения перемещений и высокоточного контроля параметров изделия на производстве (статья на английском языке)	54
Чумаков Ю.С., Левченя А.М., Храпунов Е.Ф. Экспериментальное исследование течения в зоне влияния цилиндра, погруженного в свободноконвективный пограничный слой на вертикальной поверхности	66
Физическая электроника	
Дюбо Д.Б., Цыбин О.Ю. Компьютерная модель ускорителя ионов с контактной ионизацией для электроракетных двигателей космических летательных аппаратов	78
Физическое материаловедение	
Зимин А.Р., Пашкевич Д.С., Маслова А.С., Капустин В.В., Алексеев Ю.И. Термодинамический анализ процессов взаимодействия тетрафторида кремния и гексафторсиликатов с водород-и кислородсодержащими веществами	92
Старостенко В.В., Мазинов А.С., Тютюник А.С., Фитаев И.Ш., Гурченко В.С. Спектральные СВЧ- и оптические характеристики наноструктурированных углеродных и органических пленок	106
Математика	

Антонов В.И., Богомолов О.А., Гарбарук В.В., Фоменко В.Н. Определение класса распределения	1
вектора медицинских показателей	. 118

Хроника

Λαρνεαμλ	и Эпамппопуос	սս Փօրուռծո	12 80-00000	co dua	потдоппа)	127
Алексино	о эпиминоноое	αν φυπιαύου	(к оо-летнию	со оня	рожоения,	/	171

Contents

Condensed matter physics

Apushkinskiy E.G., Popov B.P, Saveliev V.P., Sobolevskiy V.C., Krukovskaya L.P. The anomalous g-factor value of paramagnetic iron centers in the topaz lattice with strong tetragonal distortion	7
Simulation of physical processes	
Smirnov S.I., Smirnov E.M. Direct numerical simulation of the turbulent Rayleigh – Bénard convection in a slightly tilted cylindrical container	14
Pichugin Yu.A. A dynamic-stochastic approach to the construction and use of predictive models	26
Mathematical physics	
Berdnikov A.S., Solovyev K.V., Krasnova N.K. Mutually homogeneous functions with finite-sized matrices.	42
Experimental technique and devices	
Stepanov V.A., Moos E.N., Shadrin M.V., Savin V.N., Umnyashkin A.V., Umnyashkin N.V. A trian- gulation sensor for measuring the displacements and high-precision monitoring of production per- formance.	54
Chumakov Yu.S., Levchenya A.M., Khrapunov E.F. An experimental study of the flow in the area of influence of a cylinder immersed in the free convective boundary layer on a vertical surface	66
Physical electronics	
Dyubo D.B., Tsybin O.Yu. The contact ionization ion accelerator for the electrically powered space- craft propulsion: a computer model	78
Physical materials technology	
Zimin A.R., Pashkevich D.S., Maslova A.S., Kapustin V.V., Alexeev Yu.I. The interaction processes of silicon tetrafluoride and hexafluorosilicates with hydrogen-containing and oxygenated substances: a thermodynamic analysis.	92
Starostenko V.V., Mazinov A.S., Tyutyunik A.S., Fitaev I.Sh., Gurchenko V.S. Nanostructured carbon and organic films: spectral microwave and optical characteristics	106
Mathematics	
Antonov V.I., Bogomolov O.A., Garbaruk V.V., Fomenko V.N. A vector composed of medical parameters: determination of the distribution class	118
Chronicle	
Alexander Epaminondovich Fotiadi (on the occasion of his 80th birthday)	127

Физика конденсированного состояния

DOI: 10.18721/JPM.13101 УДК 539.21÷539.219, 538.9 ÷ 538.915

АНОМАЛЬНОЕ ЗНАЧЕНИЕ *g*-ФАКТОРА ПАРАМАГНИТНЫХ ЦЕНТРОВ ЖЕЛЕЗА В РЕШЕТКЕ ТОПАЗА С СИЛЬНЫМ ТЕТРАГОНАЛЬНЫМ ИСКАЖЕНИЕМ

Е.Г. Апушкинский, Б.П. Попов, В.П. Савельев,

В.К. Соболевский, Л.П. Круковская

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Российская Федерация

Представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований спектров электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) примесных центров железа в решетке фторосиликата алюминия $Al_2SiO_4(OH,F)_2$ топаза.Обнаружены характерные дефекты системы, приводящие к появлению линий с аномально большими значениями *g*-факторов (4,33 и 2,66) в спектрах ЭПР. Результаты эксперимента обсуждаются в рамках ранее разработанной модели с дефектом при участии примесного иона железа, замещающего ион Al^{3+} или Si⁴⁺. Модель «Fe³⁺— кислородная вакансия» является частным случаем модели комплексов с сильным тетрагональным искажением. В работе приведен расчет *g*-факторов с учетом ковалентного характера химической связи.

Ключевые слова: спектр ЭПР, симметрия центров, топаз, спин-гамильтониан, g-фактор, тетрагональное искажение

Ссылка при цитировании: Апушкинский Е.Г., Попов Б.П., Савельев В.П., Соболевский В.К., Круковская Л.П. Аномальное значение *g*-фактора парамагнитных центров железа в решетке топазас сильным тетрагональным искажением // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 7–13. DOI: 10.18721/JPM.13101

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

THE ANOMALOUS g-FACTOR VALUE OF PARAMAGNETIC IRON CENTERS IN THE TOPAZ LATTICE WITH STRONG TETRAGONAL DISTORTION E.G. Apushkinskiy, B.P Popov, V.P. Saveliev, V.C. Sobolevskiy, L.P. Krukovskaya

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

The theoretical and experimental results of analyzing the electron paramagnetic resonance (EPR) spectra of iron impurity paramagnetic centers in the topaz (aluminum fluorosilicate) lattice are presented. Characteristic defects of the system exhibiting some lines with abnormally large values of g-factor (4.33 and 2.66) in the EPR spectra have been found. The experimental results were discussed within the framework of a previously developed model describing a defect involving an impurity iron ion replacing the Al³⁺ or Si⁴⁺ ion. The "Fe³⁺— an oxygen vacancy" model is a special case of the complexes with strong tetragonal distortion. The g-factors were calculated taking into account the covalent nature of the bonds.

Keywords: EPR spectrum, center symmetry, Hamiltonian, g-factor, topaz, tetragonal distortion **Citation:** Apushkinskiy E.G., Popov B.P., Saveliev V.P., Sobolevskiy V.C., Krukovskaya L.P., The anomalous *g*-factor value of paramagnetic iron centers in the topaz lattice with strong tetragonal distortion, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 7–13. DOI: 10.18721/JPM.13101

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

Введение

Топаз представляет собой фторосиликат алюминия с химической формулой $Al_2SiO_4(OH, F)_2$. Структура топаза состоит из групп SiO_4 , соединяющих октаэдрические цепи $Al[O_4(F,OH)_2]$. Четыре из шести анионов, окружающих ион Al^{3+} , принадлежат кислороду O^{2-} , а остальные два – иону фтора F^- или гидроксильной группе OH⁻.

Параметры решетки топаза следующие, Å:

a = 4,6499, b = 8,7969, c = 8,3909.

Окрашивание кристаллов топаза возможно ввиду включения примесей переходных металлов или в результате облучения [1]. Однако происхождение окрашивания топаза не совсем понятно. Облучение генерирует образование сложных дефектов, которые нестабильны. Присутствие в алюмосиликатах элементов переходной группы железа предотвращает образование центров, возникающих под действием ионизирующего излучения. В связи с этим фтористые алюмосиликаты могут рассматриваться как перспективные материалы для радиационной дозиметрии и защитных покрытий от радиации. Интерес к исследованию алюмосиликатов с примесями переходной группы железа связан также с поиском новых материалов для лазерной техники, так как соединения Al₂SiO₄ обладают хорошими люминесцентнымисвойствами [2]. Кроме того, исследование примесных центров в топазе имеет и чисто научный интерес.Сильные внутренние электрические поля позволяют находиться примесному иону в различных зарядовых состояниях [3, 4]. В наших ранних работах, при исследовании собственных дефектов в алюмосиликатах, наблюдался необычный спектр электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) [1, 5]. Были обнаружены три типа центров, связанных с железом: один центр (Fe(I)) в S-состоянии (электронная конфигурации $3d^5$) со значением g = 2,004 и два типа центров (Fe(II) и Fe(III)) с аномальными значениями g-фактора g = 4,33 и 2,66. Спектры ЭПР были получены при комнатной температуре для Х-полосы (частота $v \approx 9,4$ ГГц) с помощью спектрометра Bruker ER 220D и приведены в работах [1, 5]. Большая интенсивность наблюдаемых спектров для образцов при комнатной температуре указывала на высокую концентрацию примеси железа ($n \approx 10^{19}$ см⁻³). Была предложена модель центров, которые могут образовываться с участием железа.

Прежде всего это центр с *g*-фактором, равным 2,004. Такой ион железа занимает позицию алюминия и оказывается в октаэдрическом кислородном окружении центр Fe(I). Три своих электрона атом железа отдает на образование связи, и он приобретает электронную конфигурацию $3d^5$ (ион Fe³⁺), основное состояние ⁶S. Положение энергетических уровней, их угловая зависимость и расчет *g*-фактора этого центра представлены в работе [5]. Угловые зависимости спектров ЭПР центров Fe(II) и Fe(III) свидетельствуют о тетраэдрической симметрии центров. Центры образуются при замещении ионов кремния ионами железа.Центр Fe(II) с g-фактором, равным 2,66, представляет собой комплекс железо – вакансия кислорода: $Fe^5 - V_0$. Заменяющий ион Fe^{3+} (3 d^5), вследствие взаимодействия с вакансией кислорода, смещается из своего положения равновесия на расстояние $d = 0.544L \cdot tg\phi$ в направлении (110). Из анализа угловой зависимости спектра ЭПР Fe (II) было установлено, что угол ф равен 6°. В результате центр Fe (II) смещен на 0,17 Å от центра тетраэдра.

Центр Fe(III) с g = 4,33 образован ионом железа Fe⁴⁺ в состоянии $3d^4$, замещающим кремний в позиции Si⁴⁺. Однако теоретического расчета аномальных значений *g*-фактора в работе [5] выполнено не было.

В данной статье предложен расчет аномальных значений *g*-фактора центров железа Fe(II) и Fe(III) в сильном кристаллическом поле с учетом ковалентности связи.

Теоретический расчет спектров ЭПР

Рассмотрим теорию парамагнитного резонанса иона железа в кубическом поле, следуя классической работе А. Абрагама и Б. Блини [6, 7]. Как следует из угловой зависимости спектров ЭПР [1], локальные парамагнитные центры Fe(II) и Fe(III) находятся в кристаллическом поле тетраэдрической симметрии. Экспериментальные результаты показывают, что энергия связи электронов с кристаллическим полем превосходит их энергию взаимодействия друг с другом. В этом случае правило Хунда нарушается, и ион находится в конфигурации с низким спином. Схемы расщепления уровней энергии ионов железа в тетраэдрическом кристаллическом поле с учетом спин-орбитальной связи и тетрагонального искажения кристаллической решетки показаны на рис. 1.

Для описания спектра ЭПР мы используем эквивалентный спиновый гамильтониан. В отличие от спин-гамильтониана, использованного в работе [5], мы учитываем искажение кубической симметрии внутрикристаллического поля ввиду ее осевого искажения [8, 9] вдоль тетрагональной оси; при этом величина искажения определяется параметром D тонкой структуры спектра. В данном случае спиновый гамильтониан H записывается в следующем виде:

$$H = \beta(\mathbf{H}g\mathbf{S}) + \frac{1}{6}a\left\{S_x^4 + S_y^4 + S_z^4 - \frac{1}{5}S(S+1)(3S^2+3S-1)\right\} + D\left\{S_z^2 - \frac{1}{3}S(S+1)\right\} + \lambda \mathbf{LS},$$
(1)

где **H** — приложенное магнитное поле; S — полный спин центра, S — его квантовое число; **L** — орбитальный момент, L— квантовое число полного орбитального момента; β — магнетон Бора; a, D — параметры кристаллического поля, определяющие тонкую структуру спектра ЭПР; λ константа спин-орбитальной связи.

Уровни энергии разрешенных переходов вычислены в работе [5]. Учет тетрагонального искажения, характеризуемого параметром D, приводит к изменению энергий на величины $\pm 2D$, $\pm D$. Параметры спин-гамильтониана приведены в таблице.

Таблица

Центр	<i>g</i> -фактор	$a, 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$	$D, 10^{-2} \mathrm{cm}^{-1}$
Fe (II) $\{3d^5 - V_0\}$	2,66	6,2	3,2
Fe(III) $\{3d^4\}$	4,33	7,0	3,5

Параметры спин-гамильтониана парамагнитных центров железа в кристаллической решетке топаза

	7
α	۱
u	,
	/

b)



Рис. 1. Схемы энергетических уровней ионов железа Fe³⁺ в электронной конфигурации 3d⁵ (a) и Fe⁴⁺ в конфигурации 3d⁴(b) в сильных кристаллических полях тетраэдрической симметрии при наличии тетрагонального искажения решетки (a) и спин-орбитального взаимодействия (a, b)

Структура центра Fe(II) (включает ионFe³⁺) определяется тем, что в кристаллическом поле тетраэдрической симметрии уровень энергии *d*-электронов расщепляется на нижний дублет (е-состояния) и верхний триплет (*t*₂-состояния) с энергетически интервалом, обозначаемым как 10Dq (см. рис. 1). Положение резонансных переходов в спектре ЭПР центра Fe(II) свидетельствуют о том, что энергия в кристаллическом поле больше энергии связи спинов, т. е. $D >> g\beta H$. В поле лигандов с тетрагональным искажением нижний дублет расщепляется на орбитальный триплет с эффективным моментом импульса l = 1, S = 1/2. Под действием спин-орбитальной связи триплет расщепляется на серию уровней с эффективным полным моментом

$$J_{eff} = S + 1, J, S - 1.$$

Схема расщепления энергетических уровней в кристаллическом поле тетраэдрической симметрии с учетом аксиального искажения приведена на рис. 1,*а*. Для элементов переходной группы железа в сильном кристаллическом поле полагают [1], что

$$\lambda^2/D \approx 1 \, \mathrm{cm}^{-1}$$

В этом случае энергетический интервал между подуровнями с эффективным моментом J_{eff} описывается эффективным g-фактором g_{eff} , который определяется выражением, эквивалентным множителю Ланде g [6]:

$$g_{eff} = \frac{1}{2} (g_s + g_l) + \frac{l(l+1) \pm s(s+1)}{2J(J+1)(g_s - g_l)}.$$
 (2)

Подставляя значения $g_l = 1$ и $g_s = 2$ в формулу

$$g_{eff} = \frac{4}{3}g_l + \frac{2}{3}g_s,$$

получим значение $g_{eff} = 2,67$, что хорошо соответствует эксперименту.

Схема расщепления энергетических уровней в кристаллическом поле тетраэдрической симметрии с учетом спин-орбитального взаимодействия приведена на рис. 1,*a*.

Структура центра F(III) (ион Fe⁴⁺) определяется тем, что для иона $3d^4$ в сильном кристаллическом поле электронам энергетически выгодно занимать нижний *е*-уровень, пока это разрешено принципом Паули. Следовательно, ион Fe⁴⁺ является немагнитным и его спектр ЭПР не должен наблюдаться. Однако сильная спин-орбитальная связь может снимать вырождение по спину [9, 10]. Образуются три псевдо-*J*-мультиплета, которые характеризуются эффективными моментами

$$J_{eff} = 1/2, 3/2, 5/2.$$

Дублет с $J_{eff} = 1/2$ является основным состоянием вследствие того, что параметр $\alpha\lambda$ (параметр спин-орбитальной связи с учетом ковалентности химической связи) положителен. Схема энергетических расщеплений иона Fe⁴⁺ в электронной конфигурации 3d⁴ приведена на рис. 1,*b*. Учет спин-орбитального взаимодействия приводит к изменению интервалов между энергетическими уровнями на величины

$$\Delta E\left(\frac{5}{2} \to \frac{3}{2}\right) = \frac{5}{2}\alpha\lambda,$$
$$\Delta E\left(\frac{3}{2} \to \frac{1}{2}\right) = \frac{3}{2}\alpha\lambda.$$

Использование эффективного полного момента импульса позволяет провести расчет *g*-фактора с помощью выражения (2) путем замены орбитального значения $g_l = 1$ на $g_l = \alpha = -3/2$ [3, 6]. Для основного состояния с $J_{eff} = 1/2$ имеем:

$$g_{eff} = \frac{5g_s - 2g_l}{3} = \frac{13}{3} = 4,33.$$

Заключение

Исследование примесных центров железа в топазе методом ЭПР-спектроскопии показывает, что сильные кристаллические поля позволяют наблюдать и идентифицировать переходные ионы в различных зарядовых состояниях даже при комнатной температуре. Ионы железа могут находиться как в позициях замещения ионов алюминия AI^{3+} , так и замещения ионов кремния Si⁴⁺. Парамагнитный центр Fe(I) замещает алюминий и находится в октаэдрическом кислородном окружении; парамагнитные центры Fe (II) и Fe (III) занимают в кислородных тетраэдрах SiO₄ позиции ионов кремния Si⁴⁺. Центр Fe (II) с кислородны-

Физика конденсированного состояния

ми вакансиями V_0 образуется путем замены Fe³⁺ \rightarrow Si⁴⁺, а центр Fe (III) — путем замены Fe⁴⁺ \rightarrow Si⁴⁺. Один фрагмент алюмосиликатной решетки с тетраэдрическим кислородным окружением центра железа и одной кислородной вакансией рассмотрен в нашей статье [5].Применение процеду-

ры расчета спектра ЭПР, основанной на представлении модельного спин-гамильтониана и эффективных моментов импульса, позволило значительно упростить расчет и получить хорошее согласие экспериментальных данных с теоретическим описанием.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Apushkinskaya D., Apushkinskiy E., Popov B., Romanov V., Saveliev V., Sobolevskiy V. Analysis of paramagnetic centers for threevalent iron in aluminosilicates // Journal of Physics: Conference Series. 2015. Vol. 633. P. 012115.

2. Sokolov K., Zhurikhina V., Lipovskii A., Melehin V., Petrov M. // Spatially periodical poling of silica glass // Journal of Applied Physics. 2012. Vol. 111. No. 10. P. 104307.

3. Асатрян Г.Р., Бабунц Р.А., Бадалян А.Г., Единач Е.В., Гурин А.С.,Баранов П.Г., Петросян А.Г. ЭПР ионов Yb³⁺ в кристаллах алюминиевого граната // Материалы XXIV Международной конференции «Оптика и спектроскопия конденсированных сред». Под научной редакцией В.А. Исаева, А.В. Лебедева. Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2018. С. 47–51.

4. Yakubenya S.M., Shtel'makh K.F. About anomalous g factor value of Mn-related defects in GaAs : Mn // Applied Magnetic Resonance. 2016. Vol. 47. No. 7. Pp. 671-684.

5. Apushkinskiy E., Popov B., Romanov V., Saveliev V., Sobolevskiy V. Identification of environment symmetry for iron centers in aluminosilicates // Journal of Physics: Conference

Series. 2017. Vol. 936. Р. 012011. 6. Абрагам А., Блини Б. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов. В 2 тт. Т. 1. М.: Мир, 1972. 652 с.

7. Азамат Д.В., Басун С.А., Бурсиан В.Э., Раздобарин А.Г., Сочава Л.С., Неsse Н., Каррhan S. ЭПР некрамерсова иона железа в КТаО₃ // Физика твердого тела. 1999. Т. 41. Вып. 8. С. 1424–1427.

8. Плешаков И.В., Клёхта Н.С., Кузьмин Ю.И. Исследование действия импульсного магнитного поля на сигнал ядерного спинового эха в феррите // Письма в журнал технической физики. 2012. № 18. С. 60–66.

9. **Baimova Yu.A., Rysaeva L.Kh., Rudskoi A.I.** Deformation behavior of diamond-like phases: Molecular dynamics simulation // Diamond and Related Materials. 2018. Vol. 81. January. Pp. 154–160.

10. Politova G.A., Pankratov N.Yu., Vanina P.Yu., Filimonov A.V., Rudskoi A.I., Ilyushin A.S., Tereshina I.S. Magnetocaloric effect and magnetostrictive deformation in Tb-Dy-Gd-Co-Al with Laves phase structure // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2019. Vol. 470. 15 January. Pp. 50–54.

Статья поступила в редакцию 06.03.2020, принята к публикации 20.03.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АПУШКИНСКИЙ Евгений Геннадиевич — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 apushkinsky@hotmail.com

ПОПОВ Борис Петрович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

САВЕЛЬЕВ Владимир Павлович — старший преподаватель кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация. 195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 saveliev@tuexph.stu.neva.ru

СОБОЛЕВСКИЙ Владимир Константинович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

КРУКОВСКАЯ Лидия Петровна — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

REFERENCES

1. Apushkinskaya D., Apushkinskiy E., Popov B., et al., Analysis of paramagnetic centers for threevalent iron in aluminosilicates, Journal of Physics: Conference Series. 633 (2015) 012115.

2. Sokolov K., Zhurikhina V., Lipovskii A., et al., Spatially periodical poling of silica glass, Journal of Applied Physics. 111 (10) (2012) 104307.

3. Asatryan G.R., Babunts R.A., Badalyan A.G., et al., EPR ionov Yb^{3+} v kristallakh alyuminiyevogo granata [ESR of Yb^{3+} ions in the aluminium garnet crystals], Proceedings of the 24-th International Conference: "Optics and Spectroscopy of Condensed Matter", Kuban State University, Krasnodar, September 22–28 2018, Pp. 47–51.

4. Yakubenya S.M., Shtel'makh K.F., About anomalous g factor value of Mn-related defects in GaAs : Mn, Applied Magnetic Resonance. 47 (7) (2016) 671–684.

5. Apushkinskiy E., Popov B., Romanov V., et al., Identification of environment symmetry for iron centers in aluminosilicates, Journal of

Received 06.03.2020, accepted 20.03.2020.

Physics: Conference Series. 936 (2017) 012011.

6. Abragam A., Bleaney B., Electron paramagnetic resonance of transition ions, Clarendon Press, Oxford, 1970.

7. Azamat D.V., Basun S.A., Bursian V.É., et al., EPR of a non-Kramers iron in KTaO₃, Physics of the Solid State. 41 (8) (1999) 1303 - 1306.

8. **Pleshakov I.V., Klekhta N.S., Kuzmin Yu. I.,** The effect of a pulsed magnetic field on the nuclear spin echo signal in ferrite, Technical Phys. Letters. 38 (9) (2012) 853–855.

9. **Baimova Yu.A., Rysaeva L.Kh., Rudskoi A.I.,** Deformation behavior of diamond-like phases: Molecular dynamics simulation, Diamond and Related Materials. 81 (January) (2018) 154–160.

10. Politova G.A., Pankratov N.Yu., Vanina P.Yu., et al., Magnetocaloric effect and magnetostrictive deformation in Tb-Dy-Gd-Co-Al with Laves phase structure, Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 470 (15 January) (2019) 50–54.

THE AUTHORS

APUSHKINSKIY Evgeniy G.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation apushkinsky@hotmail.com

POPOV Boris P.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation popov_bp@spbstu.ru

SAVELIEV Vladimir P.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation saveliev@tuexph.stu.neva.ru

SOBOLEVSKIY Vladimir C.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation sobolevskiy@physic.spbstu.ru

KRUKOVSKAYA Lidia P.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation lidia.ks@mail.ru

Математическое моделирование физических процессов

DOI: 10.18721/JPM.13102 УДК 536.25

ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОЙ КОНВЕКЦИИ РЭЛЕЯ – БЕНАРА В СЛЕГКА НАКЛОНЕННОМ ЦИЛИНДРИЧЕСКОМ КОНТЕЙНЕРЕ

С.И. Смирнов, Е.М. Смирнов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Российская Федерация

Представлены результаты прямого численного моделирования турбулентной конвекции в подогреваемом снизу цилиндрическом контейнере с высотой, равной диаметру. Расчеты проведены для двух сред: воды ($\Pr = 6,4$) и ртути ($\Pr = 0,025$), при числах Рэлея 10^8 и 10^6 соответственно. Ось контейнера наклонена на небольшой угол по отношению к вектору гравитационного ускорения с целью подавления возможных азимутальных перемещений глобального вихря, развивающегося в контейнере. Анализируется структура осредненного конвективного движения, симметричного относительно центрального вертикального сечения. Выявлены особенности вихревого течения в угловых областях, присущие двум рассмотренным случаям. Получены представительные профили всех ненулевых составляющих тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока в центральном сечении.

Ключевые слова: конвекция Рэлея — Бенара, наклоненный контейнер, турбулентность, прямое численное моделирование, крупномасштабная циркуляция

Ссылка при цитировании: Смирнов С.И., Смирнов Е.М. Прямое численное моделирование турбулентной конвекции Рэлея – Бенара в слегка наклоненном цилиндрическом контейнере // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 14–25. DOI: 10.18721/JPM.13102

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

DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF THE TURBULENT RAYLEIGH – BÉNARD CONVECTION IN A SLIGHTLY TILTED CYLINDRICAL CONTAINER

S.I. Smirnov, E.M. Smirnov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,

St. Petersburg, Russian Federation

Results of direct numerical simulation of the turbulent convection in a bottom-heated cylindrical container have been presented. The height-to-diameter ratio was equal to 1.0. The calculations were performed for two media: mercury (Pr = 0.025) and water (Pr = 6.4) at $Ra = 10^6$ and 10^8 respectively. To suppress possible azimuthal movements of the global vortex (large-scale circulation) developing in the container, its axis was tilted a small angle with respect to the gravity vector. Structure of the time-averaged flow pattern symmetrical with respect to the central vertical plane was analyzed. Peculiarities of vortex structures developing in the corner zones were revealed. Representative profiles of the Reynolds stresses and components of the turbulent heat flux vector were obtained for the central vertical plane.

Keywords: Rayleigh – Bénard convection, tilted container, turbulence, direct numerical simulation, large-scale circulation

Citation: Smirnov S.I., Smirnov E.M., Direct numerical simulation of the turbulent Rayleigh – Bénard convection in a slightly tilted cylindrical container, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 14-25. DOI: 10.18721/JPM.13102

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

Введение

Постоянный интерес к исследованию свободной конвекции объясняется ее широким распространением в природе и технике. Одной из наиболее привлекательных модельных задач в этой области является рэлей-бенаровская конвекция жидкости в вертикально ориентированном круговом цилиндрическом контейнере.

В результате многочисленных экспериментальных и численных исследований было установлено, что характерной особенностью свободноконвективного течения в подогреваемом снизу цилиндрическом контейнере является наличие крупномасштабной циркуляции (КМЦ) (см., например, обзорную. работу [1]). Если высота контейнера равна или близка к его диаметру, КМЦ представляет собой крупномасштабный вихрь, охватывающий всю область конвективного движения [1 - 5]. При строго вертикальном положении оси контейнера и осесимметричных граничных условиях, в задаче нет выделенного (преимущественного) азимутального положения, и естественно предполагать, что глобальный вихрь время от времени может перемещаться в азимутальном направлении. Экспериментальные исследования подтверждают это: в большинстве работ, посвященных изучению рэлей-бенаровской конвекции в круговом цилиндрическом контейнере, наблюдались медленные (сверхнизкочастотные) изменения ориентации КМЦ, имеющие нерегулярный характер (см., например, статьи [3 – 9]). Чаще всего экспериментально исследуют жидкие металлы [3, 4, 9] и воду [5 – 8]. Азимутальное поведение КМЦ в каждом конкретном случае определяется, очевидно, весьма малыми, трудно контролируемыми отклонениями от осевой симметрии, которые характерны для лабораторной модели. Указанная особенность КМЦ проявляется также в целом ряде численных экспериментов, связанных с исследованиями переходных и турбулентных режимов рэлей-бенаровской конвекции в цилиндрических емкостях при числах Прандтля (Pr), характерных для жидких металлов [10 – 13], воды [11] и воздуха [14 - 16].

Случайные смены азимутальной ориен-

тации КМЦ — не единственная особенность глобальной вихревой структуры данного вида. Было установлено, что КМЦ присущи еще два вида осцилляций: «плескания» и «скручивания» (в англоязычной терминологии — sloshing and torsional oscillations). Кроме того, КМЦ может исчезать на относительно короткий промежуток времени и возрождаться с существенно иной ориентацией (cessation). Данные особенности КМЦ изучались экспериментально в ряде работ [16 – 20]. Осцилляции «плескания» и «скручивания» воспроизводятся и в численных решениях (см., например, недавнюю работу [21] и ссылки в ней).

КМЦ Азимутальная неустойчивость затрудняет процесс получения статистических характеристик турбулентной конвекции в подогреваемых снизу цилиндрических контейнерах, в том числе осредненных трехмерных полей физических величин, характеризующих относительно мелкомасштабную «фоновую» турбулентность. «Фиксация» КМЦ в некотором азимутальном положении может достигаться посредством введения стабилизирующего внешнего фактора, не приводящего, вместе с тем, к существенному изменению интенсивности и структуры течения. В качестве такого фактора может выступать небольшой наклон контейнера. Данный подход многократно использовался в экспериментальных исследованиях, проведенных при разных значениях числа Рэлея (Ra) для сред с Pr = 0,025 [3, 4], 0,7 - 0,8 [17, 18] и Pr = 4 – 6 [17, 19, 20, 22 – 24]. В расчетной работе [25] численно исследовалось влияние слабого наклона контейнера, заполненного средой с Pr = 0.025, а также неоднородного нагрева горизонтальной стенки и структуры вычислительной сетки в центральной зоне.

Среди используемых сегодня численных подходов к описанию турбулентных свободноконвективных течений в относительно простых по геометрии областях, наиболее востребованным является метод прямого численного моделирования (Direct Numerical Simulation (DNS)), предполагающий разрешение всех составляющих турбулентного движения (см., например, работы [26 – 34], выполненные для сред с различными числами Прандтля: $\Pr = 0,005$ [30], 0,02 [26, 30], 0,1 – 1,0 [26, 27, 29, 32 – 34] и 6,4 [28, 31]). Отметим также недавнюю работу [32], в которой представляются результаты DNS-моделирования турбулентной рэлей-бенаровской конвекции при $\Pr = 1$, $Ra = 10^8$ в областях различной геометрической конфигурации (в том числе цилиндрической), с акцентом на кросс-верификацию различных программных пакетов в части предсказания интегральной теплоотдачи.

Настоящая работа посвящена прямому численному моделированию турбулентной конвекции в подогреваемом снизу, слегка наклоненном цилиндрическом контейнере, имеющем высоту, равную диаметру. Представлены результаты, полученные для значений числа Рэлея $Ra = 10^6$ при значении числа Прандтля Pr = 0,025 и $Ra = 10^8$ при значении Pr = 6,4.

Постановка задачи

В приближении Буссинеска рассматривается турбулентная конвекция жидкости с постоянными физическими свойствами в подогреваемом снизу круговом цилиндрическом контейнере с единичным отношением диаметра цилиндра к его высоте ($\Gamma = D/H = 1$). Контейнер наклонен на небольшой угол, $\varphi = 2^{\circ}$, по отношению к вектору ускорения свободного падения (рис. 1, *a*).

Нестационарное движение жидкости описывается приведенной ниже системой уравнений (1) — (3), включающей уравнение неразрывности, уравнения Навье — Стокса и конвективно-диффузионное уравнение переноса тепла:

 $\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$,

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} =$$
$$= -\frac{1}{2} \nabla p + \beta (T_0 - T) \mathbf{g} + \nu \nabla^2 \mathbf{V}, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \left(\mathbf{V} \cdot \nabla\right) T = \chi \nabla^2 T.$$
(3)

Здесь $\mathbf{V} = (V_x, V_y, V_y)$ – вектор скорости в системе координат $x \ y' z$; t – время; p, T, ρ – давление, температура и плотность жидкости; β , v, χ – коэффициенты ее объемного расширения, кинематической вязкости и температуропроводности; \mathbf{g} – вектор ускорения свободного падения, направленный в противоположную сторону от оси y' и составляющий с ней угол в 2°; T_0 – температура жидкости в условиях гидростатического равновесия.

Решение системы (1) - (3) проводится в системе координат x'y'z, ось y' которой совпадает с осью контейнера (см. рис. 1, *a*).

На всех границах задаются условия их непроницаемости и прилипания. На горизонтальных стенках задаются постоянные температуры; полагается, что верхняя стенка имеет температуру (T_c) меньшую, чем нижняя (T_h) . Боковая стенка полагается адиабатической.

Безразмерными определяющими параметрами задачи являются число Прандтля $\Pr = \nu/\chi$ и число Рэлея, связь между которыми выражается как

$$\operatorname{Ra} = \operatorname{Pr} (V_{\mu} H/\nu)^2$$

где V_{h} – характерная (масштабная) скорость



(1)

Рис. 1. Геометрия расчетной области в случае наклоненной емкости (*a*), а также структура сетки в центральных горизонтальном (*b*) и вертикальном (*c*) сечениях

течения (скорость плавучести),

$$V_{\mu} = (g\beta\Delta TH)^{0.5}$$

 $(\Delta T -$ характерный перепад температуры, разность между температурами горячей (T_h) и холодной (T_c) стенок),

$$\Delta T = T_{\mu} - T_{c}.$$

Введем также число Грасгофа Gr = Ra/Pr, квадратный корень из которого можно рассматривать как аналог числа Рейнольдса в задачах свободной конвекции.

Представленные далее расчеты проведены при значениях пар чисел $\Pr = 0,025$, $\operatorname{Ra} = 10^6 \operatorname{u} \operatorname{Pr} = 6,4$, $\operatorname{Ra} = 10^8$. Числа Грасгофа для этих двух вариантов — величины одного порядка и составляют соответственно $4,0\cdot10^7 \operatorname{u} 1,6\cdot10^7$.

Вычислительные аспекты

Расчеты выполнялись с использованием одной из последних версий конечно-объемного программного кода собственной разработки SINF/Flag-S (реализованные в коде вычислительные алгоритмы оперируют неструктурированными сетками). Применялся метод дробных шагов, авторский вариант которого представлен в работе [35]. Продвижение по времени осуществлялось по схеме Кранка - Николсон со вторым порядком точности. Для аппроксимации конвективных и диффузионных членов в уравнениях сохранения использовалась центрально-разностная схема. Расчетная сетка, состояла примерно из 1,5.107 гексагональных элементов; структура сетки в горизонтальном и вертикальном сечениях иллюстрируется на рис. 1, b, c. Сетка сгущена к стенкам, при этом величина первой пристенной ячейки составляла около 10⁻⁴Н. Характерной особенностью расчетной сетки являлось наличие центральной «неструктурированной» (асимметричной) области диаметром примерно 0,8*D* (см. рис. 1, *b*).

«Конечно-объемные» расчеты конвекции Рэлея — Бенара на данной сетке можно трактовать как прямое численное моделирование турбулентности, если локальный размер ячейки достаточно мал по сравнению с размером наименьших вихрей в данной области. Хорошо известно, что в тех случаях, когда температурные слои толще скоростных ($\Pr < 1$), наименьшим масштабом турбулентного течения является колмогоровский масштаб

$$\delta_{\rm K} = (\nu^3/\epsilon)^{0.25},$$

где є — скорость диссипации кинетической энергии турбулентных пульсаций,

$$\varepsilon = v \frac{\partial V_i'}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial V_i'}{\partial x_j}$$

 $(V'_i - пульсация$ *i* $-ой компоненты скорости, <math>x_i -$ декартовы координаты).

В случае, когда число Прандтля Pr > 1, наименьшим масштабом является масштаб Бэтчелора:

$$\delta_{\rm B} = \delta_{\rm K} / Pr^{0.5}.$$

Соответственно, для оценки качества расчетов следует сопоставить характерный размер сеточных элементов с тем или иным наименьшим масштабом турбулентности.

Расчеты стартовали с нулевого поля скорости и однородного поля температуры, значение которой полагалось равным $(T_h + T_c)/2$. Временной шаг не превышал одной тысячной от характерного времени $t_b = H/V_b$, что обеспечивало значения локального числа Куранта меньше единицы. Осреднение расчетных полей по времени начиналось после прохождения переходного процесса, длящегося около $200t_b$. Выборки для осреднения составляли $3000t_b$ в случае конвекции ртути и $4000t_b$ в расчетах для воды.

Результаты расчетов и их обсуждение

Далее при описании результатов расчетов, под величинами V и *T* подразумеваются скорость и температурная разность $T - T_c$, отнесенные к соответствующему масштабу (V_b и ΔT), а под (x', y', z) — координаты, отнесенные к высоте контейнера.

Оценка качества сеточного разрешения проводилась после проведения расчетов, с помощью накопленной статистики для поля скорости диссипации кинетической энергии турбулентных пульсаций. Фактически анализировались поля рассчитанных (по приведенным выше соотношениям) наименьших масштабов турбулентности $\delta_{\rm K}$ и $\delta_{\rm B}$, отнесенных к кубическому корню из объема расчетной ячейки ($V^{1/3}$). Было установлено, что практически во всей области течения отношения $\delta_{\rm K}/V^{1/3}$ и $\delta_{\rm B}/V^{1/3}$ принимали значения, превосходящие единицу. Исключение составлял небольшой участок вблизи боковой стенки, в среднем по вы-

соте слое, а также область расположения угловых вихрей, где наименьшие значения отношений $\delta_{\rm K}/V^{1/3}$ и $\delta_{\rm B}/V^{1/3}$ составляли 0,6 – 0,7.

Результаты для ртути. Рис. 2, *а* иллюстрирует мгновенную картину конвекции ртути в подогреваемом снизу цилиндрическом контейнере, где отчетливо выражена крупномасштабная циркуляция. На рис. 2, *b*,*c* приведено распределение осредненной вертикальной компоненты скорости в центральном сечении, перпендикулярном оси контейнера; здесь и далее под «вертикальной компонентой скорости» подразумевается составляющая скорости вдоль оси слегка наклоненного контейнера. Видно, что данное распределение обладает двойной симметрией, как этого и следовало ожидать для случая КМЦ, «зафиксированной» в определенном азимутальном положении.

Особый интерес представляет выявление характерных особенностей конвективного движения в центральном вертикальном сечении контейнера, совпадающем со средним сечением КМЦ (см. рис. 2); оно же — плоскость наклона оси контейнера x' O y'.

На рис. 3 показана вихревая структура течения и поле температуры в этом сечении. Примечательно, что помимо КМЦ в картине течения присутствует ряд меньших вихрей, располагающихся в углах емкости. При этом область, занимаемая дополни-



Рис. 2. Распределения мгновенной (*a*) и осредненной (*b*, *c*) вертикальной компоненты скорости в подогреваемом снизу цилиндрическом контейнере (ЦК) при Pr=0,025: *a* – изоповерхности компоненты, $|V_y| = 0,14$; *b* – распределение в центральном сечении, перпендикулярном оси ЦК, *y*' = 0,5; *c* – распределение вдоль линии, лежащей в плоскости

$$(x' O y')$$
 ЦК на высоте $y' = 0,5$

Синие структуры соответствуют нисходящему течению, красные – восходящему



Рис. 3. Поле осредненной температуры в центральном вертикальном сечении контейнера (совпадающем со средним сечением КМЦ) с наложенными векторами осредненной скорости при Pr = 0,025: *b* – вся область конвекции, *a*, *c* – области с угловыми вихрями

тельными вихрями в углах A и C (см. рис. 3, a), существенно больше, чем в углах B и D (см. рис. 3, c); отличается и интенсивность вихрей: в углах A и C она существенно выше. В поле температуры отчетливо выражены градиентные слои у изотермических стенок.

В результате проведенных расчетов были получены также трехмерные поля всех составляющих тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока. Эти данные могут быть интересны, в частности, для дополнительной оценки возможностей различных моделей турбулентности второго порядка (моделей рейнольдсовых напряжений), которые применяются для расчетов конвективных течений на основе осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье - Стокса. В настоящей работе представляются данные, относящиеся к центральному вертикальному сечению контейнера. В этом сечении две из шести компонент тензора рейнольдсовых напряжений, а также одна из трех составляющих турбулентного теплового потока равны нулю вследствие статистической симметрии конвекции.

На рис. 4 распределения составляющих тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока даются вдоль диагоналей центрального вертикального сечения (используется соответствующая координата, обозначаемая

как $d_{r'0v'}$). В силу симметрии осредненного течения, распределения даются только для половины диагонали. Более того, приводимые распределения получены посредством осреднения по двум половинам каждой из диагоналей (очевидно, этот прием эффективно увеличивает исходную выборку для получения статистики). На рис. 4 видно, что в малой угловой области (условно, при $d_{r'_{0,v'}} < 0,02$), где практически отсутствует какое-либо движение среды, почти все приведенные корреляции близки к нулю, за исключением рейнольдсова напряжения, обусловленного пульсациями компоненты скорости, нормальной к рассматриваемому сечению (см. рис. 4, *c*). При $d_{r'0\nu'} > 0,02$ все корреляции нарастают по модулю в той или иной степени, а при дальнейшем увеличении расстояния от угла их изменение носит существенно немонотонный характер. В целом это согласуется с картиной векторного поля скорости, приведенной на рис. 3: здесь за зоной «углового покоя» следует область сосуществования двух вихревых структур, наличие и взаимодействие которых и обуславливает немонотонное поведение профилей, приведенных на рис. 4. В зависимости от выбора диагонали (АС или BD), протяженности участков немонотонности несколько отличаются. После прохождения зон, занятых угловыми вих-рями ($d_{x'0y'} > 0,15-0,20$), следует область, охваченная КМЦ, в пределах которой кор-



Рис. 4. Распределения нормированных компонент тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока вдоль диагоналей *AC* (черная кривая) и *BD* (красная кривая) центрального сечения контейнера в случае конвекции ртути (см. рис. 3), координата $d_{x'0y'} = 0$ в точках *A* и *B*, соответственно

реляции изменяются относительно плавно.

Полученное в результате настоящих расчетов интегральное значение числа Нуссельта для конвекции ртути, при значении числа Рэлея $Ra = 10^6$, составило Nu = 5,64, что хорошо согласуется с результатами предыдущих исследований, выполненных в рамках неявного LES (ILES) подхода: Nu = 5,70 [25], Nu = 5,58 [35], а также с результатами DNS расчетов, Nu = 5,43 [30].

Результаты для воды. Аналогичный набор иллюстраций и графиков приводится на рис. 5 - 7 для конвекции воды (Pr = 6,4) при значении числа Рэлея Ra = 10^8 .

По распределениям осредненной вертикальной скорости и температуры (рис. 5) можно заключить, что и в этом случае полученное решение симметрично относительно среднего сечения КМЦ (центрального вертикального сечения). В случае длительных выборок, симметрию статистических характеристик течения можно достичь лишь в случае КМЦ, «зафиксированной» в определенном азимутальном положении. Сопоставление расчетных данных, приведенных на рис. 2 и 5, позволяет заключить, что максимальные значения нормированной вертикальной скорости в случае конвекции воды оказываются примерно в пять раз меньше, чем для конвекции ртути.

На рис. 6 представлена структура конвективного движения воды в центральном вертикальном сечении. Как и в рассмотренной выше картине для конвекции ртути (см. рис. 3), крупномасштабная циркуляция воды дополняется угловыми вихревыми структурами. Однако, в отличие от конвекции ртути, в данном случае наблюдается только один выраженный угловой вихрь в каждом из углов A и C, а в углах B и D







Рис. 6. Поле осредненной температуры в центральном вертикальном сечении контейнера с наложенными векторами осредненной скорости при Pr = 6,4.

сколько-нибудь интенсивные вихри вообще отсутствуют; здесь наблюдается резкий поворот потока, сопровождаемый образованием малой области очень медленного движения («углового покоя»). Ранее эти особенности конвекции воды в цилиндрическом контейнере отмечались в работе [15]. В поле температуры у изотермических стенок формируются, как и ожидалось, высокоградиентные слои.

На рис. 7 приводятся распределения ненулевых составляющих тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока вдоль диагоналей центрального вертикального сечения. В отличие от случая конвекции ртути, корреляции, приведенные для Pr = 6,4, в целом изменяются более плавно, что обусловлено, очевидно, неразвитостью угловых вихревых структур в случае конвекции жидкости с большим числом Прандтля. Однако и в этом случае на приведенных профилях корреляций просматриваются участки, на которых проявляется влияние угловых вихрей. Отметим также, что, по сравнению с предыдущим случаем (см. рис. 4), общий уровень нормированных корреляций, характеризующих интенсивность турбулентного переноса, при конвекции воды на порядок-полтора меньше, чем в случае жидкости с малым числом Прандтля.

Полученное в результате расчетов интегральное значение числа Нуссельта для конвекции воды, при значении числа Рэлея $Ra = 10^8$, составило Nu = 33,0, что с точностью до трех значащих цифр совпадает с результатами предыдущих расчетов [28], выполненных по методу DNS.

Заключение

Методом прямого численного моделирования накоплен большой объем статистических данных для существенно трехмерной турбулентной конвекции в подогреваемом снизу, слегка наклоненном цилиндрическом контейнере, с высотой, равной диаметру. Расчеты проведены для числа Рэлея, составляющего $Ra = 10^6$ при значении числа Прандтля Pr = 0,025, и для $Ra = 10^8$ при значении Pr = 6,4.

Установлено, что наклон оси контейнера на 2° относительно вектора гравитации обеспечивает надежную «фиксацию» глобального вихря (КМЦ) в определенном азимутальном положении.

Картина осредненного течения в центральном вертикальном сечении контейнера, совпадающем со средним сечением КМЦ, характеризуется сочетанием КМЦ с угловыми вихревыми структурами, наиболее ярко выраженными в случае конвекции среды с малым числом Прандтля.

Рассчитаны трехмерные поля всех составляющих тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока. Эти данные могут быть



Рис. 7. Распределения нормированных компонент тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока вдоль диагоналей *AC* (черная кривая) и *BD* (красная кривая) центрального вертикального сечения контейнера в случае конвекции воды (см. рис. 6), координата $d_{x'0y'} = 0$ в точках *A* и *B*, соответственно

использованы, в частности, для дополнительной оценки возможностей различных моделей турбулентности второго порядка (моделей рейнольдсовых напряжений), которые применяются для расчетов конвективных течений на основе осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье — Стокса.

Полученные значения интегрального числа Нуссельта хорошо согласуются с данными, приводимыми в литературе для случая контейнера с вертикальной осью.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант «Вихреразрешающее численное моделирование турбулентной свободной конвекции в условиях сопряженного теплообмена» №17-08-01543).

Расчетные данные получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра СПбПУ (www.scc.spbstu.ru).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ahlers G., Grossmann S., Lohse D. Heat transfer and large scale dynamics in turbulent Rayleigh–Bénard convection // Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. No. 2. Pp. 503–538.

2. Takeshita T., Segawa T., Glazier J.A., Sano M. Thermal turbulence in mercury // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. No. 9. Pp. 1465–1468.

3. Cioni S., Ciliberto S., Sommeria J. Experimental study of high-Rayleigh-number convection in mercury and water // Dyn. Atmos. Oceans. 1996. Vol. 24. No. 1. Pp. 117–127.

4. Cioni S., Ciliberto S., Sommeria J. Strongly turbulent Rayleigh–Bénard convection in mercury: comparison with results at moderate Prandtl number // J. Fluid Mech. 1997. Vol. 335. No. 1. Pp. 111–140.

5. Qui X.-L., Tong P. Large-scale velocity structures in turbulent thermal convection // Phys. Rev. E. 2001. Vol. 64. No. 3. P. 036304.

6. Niemela J.J., Skrbek L., Sreenivasan K.R., Donnelly R.J. The wind in confined thermal convection // J. Fluid Mech. 2001. Vol. 449. 25 December. Pp. 169–178.

7. Sreenivasan K.R., Bershadskii A., Niemela J.J. Mean wind and its reversal in thermal convection // Phys. Rev. E. 2002. Vol. 65. No. 5. P. 056306.

8. Brown E., Nikolaenko A., Ahlers G. Reorientation of the large-scale circulation in turbulent Rayleigh–Bénard convection // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol. 95. No. 8. P. 084503.

9. Khalilov R., Kolesnichenko I., Pavlinov A., Mamykin A., Shestakov A., Frick P. Thermal convection of liquid sodium in inclined cylinders // Phys. Rev. Fluids. 2018. Vol. 3. No. 4. P. 043503.

10. Verzicco R., Camussi R. Transitional regimes of low-Prandtl thermal convection in a cylindrical cell // Phys. Fluids. 1997. Vol. 9. No. 5. Pp. 1287–1295.

11. Abramov A.G., Ivanov N.G., Smirnov E.M. Numerical study of high-Ra Rayleigh–Bénard

mercury and water convection in confined enclosures using a hybrid RANS/LES technique // Proc. of the Eurotherm Seminar 74. Eindhoven, TUE, 2003. Pp. 33–38.

12. Schumacher J., Bandaru V., Pandey A., Scheel J.D. Transitional boundary layers in low-Prandtl-number convection // Phys. Rev. Fluids. 2016. Vol. 1. No. 8. P. 084402.

13. Смирнов С.И., Смирновский А.А. Численное моделирование турбулентной свободной конвекции ртути в подогреваемом снизу цилиндре при нулевой и конечной толщине горизонтальных стенок // Тепловые процессы в технике. 2018. Т. 10. № 3–4. С. 94–100.

14. **Benzi R., Verzicco R.** Numerical simulations of flow reversal in Rayleigh–Bénard convection // Europhysics Letters. 2008. Vol. 81. No. 6. P. 64008.

15. Wagner S., Shishkina O., Wagner C. Boundary layers and wind in cylindrical Rayleigh– Bénard cells // J. Fluid Mech. 2012. Vol. 697. 25 April. Pp. 336–366.

16. Mishra P.K., De A.K., Verma M.K., Eswaran V. Dynamics of reorientations and reversals of large-scale flow in Rayleigh–Bénard convection // J. Fluid Mech. 2011. Vol. 668. 10 February. Pp. 480–499.

17. Roche P.-E., Gauthier F., Kaiser R., Salort J. On the triggering of the Ultimate Regime of convection // New J. Phys. 2010. Vol. 12. No. 8. P. 085014.

18. He X., van Gils D.P.M., Bodenschatz E., Ahlers G. Reynolds numbers and the elliptic approximation near the ultimate state of turbulent Rayleigh–Bénard convection // New J. Phys. 2015. Vol. 17. No. 6. P. 063028.

19. Chilla F., Rastello M., Chaumat S., Castaing B. Long relaxation times and tilt sensitivity in Rayleigh–Bénard turbulence // Eur. Phys. J. B. 2004. Vol. 40. No. 2. Pp. 223–227.

20. Ahlers G., Brown E., Nikolaenko A.

Математическое моделирование физических процессов

The search for slow transients, and the effect of imperfect vertical alignment, in turbulent Rayleigh–Bénard convection // J. Fluid Mech. 2006. Vol. 557. 25 June. Pp. 347–367.

21. Zwirner L., Khalilov R., Kolesnichenko I., Mamykin A., Mandrykin S., Pavlinov A., Shestakov A., Teimurazov A., Frick P., Shishkina O. The influence of the cell inclination on the heat transport and large-scale circulation in liquid metal convection // J. Fluid Mech. 2020. Vol. 884. 10 February. P. A18.

22. Brown E., Ahlers G. The origin of oscillations of the large-scale circulation of turbulent Rayleigh–Bénard convection // J. Fluid Mech. 2009. Vol. 638. 10 November. Pp. 383–400.

23. Xi H.-D., Zhou S.-Q., Zhou Q., Chan T.S., Xia K.-Q. Origin of the temperature oscillation in turbulent thermal convection // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 102. No. 4. P. 044503.

24. Weiss S., Ahlers G. Effect of tilting on turbulent convection: cylindrical samples with aspect ratio $\Gamma = 0.50$ // J. Fluid Mech. 2013. Vol. 715. 25 January. Pp. 314–334.

25. Smirnov S.I., Abramov A.G., Smirnov E.M. Numerical simulation of turbulent Rayleigh– Bénard mercury convection in a circular cylinder with introducing small deviations from the axisymmetric formulation // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. Vol. 1359. 15–22 September, Yalta, Crimea. P. 012077.

26. Van der Poel E.P., Stevens R.J.A.M., Lohse D. Comparison between two- and threedimensional Rayleigh–Bénard convection // J. Fluid Mech. 2013. Vol. 736. 10 December. Pp. 177–194.

27. Scheel J.D., Schumacher J. Local boundary layer scales in turbulent Rayleigh–Bénard convection // J. Fluid Mech. 2014. Vol. 758. 10 November. Pp. 344–373.

28. Kooij G.L., Botchev M.A., Geurts B.J.

Direct numerical simulation of Nusselt number scaling in rotating Rayleigh–Bénard convection // Int. J. Heat Fluid Flow. 2015. Vol. 55. October. Pp. 26–33.

29. Horn S., Shishkina O. Toroidal and poloidal energy in rotating Rayleigh–Bénard convection // J. Fluid Mech. 2015. Vol. 762. 10 January. Pp. 232–255.

30. Scheel J.D., Schumacher J. Global and local statistics in turbulent convection at low Prandtl numbers // J. Fluid Mech. 2016. Vol. 802. 10 September. Pp. 147–173.

31. Sakievich P.J., Peet Y.T., Adrian R.J. Large-scale thermal motions of turbulent Rayleigh–Bénard convection in a wide aspectratio cylindrical domain // Int. J. Heat Fluid Flow. 2016. Vol. 61. Part A. October. Pp. 193–196.

32. Kooij G.L., Botchev M.A., Frederix E.M.A., Geurts B.J., Horn S., Lohse D., van der Poel E.P., Shishkina O., Stevens R.J.A.M., Verzicco R. Comparison of computational codes for direct numerical simulations of turbulent Rayleigh– Bénard convection // Computers & Fluids. 2018. Vol. 166. 30 April. Pp. 1–8.

33. **Zwirner L., Shishkina O.** Confined inclined thermal convection in low-Prandtl-number fluids // J. Fluid Mech. 2018. Vol. 850. 10 September. Pp. 984–1008.

34. Wan Z.-H., Wei P., Verzicco R., Lohse D., Ahlers G., Stevens R.J.A.M. Effect of sidewall on heat transfer and flow structure in Rayleigh– Bénard convection // J. Fluid Mech. 2019. Vol. 881. 25 December. Pp. 218–243.

35. Смирнов С.И., Смирнов Е.М., Смирновский А.А. Влияние теплопереноса в торцевых стенках на турбулентную конвекцию ртути во вращающемся цилиндре // Научнотехнические ведомости СПбГПУ. Физикоматематические науки. 2017. Т. 10. № 1. С. 31–46.

Статья поступила в редакцию 20.01.2020, принята к публикации 12.02.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СМИРНОВ Сергей Игоревич — инженер научно-образовательного центра «Компьютерные технологии в аэродинамике и теплотехнике» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

СМИРНОВ Евгений Михайлович — доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

REFERENCES

1. Ahlers G., Grossmann S., Lohse D., Heat transfer and large scale dynamics in turbulent Rayleigh-Bénard convection, Rev. Mod. Phys. 81 (2) (2009) 503–538.

2. Takeshita T., Segawa T., Glazier J.A., Sano M., Thermal turbulence in mercury, Phys. Rev. Lett. 76 (9) (1996) 1465–1468.

3. **Cioni S., Ciliberto S., Sommeria J.,** Experimental study of high-Rayleigh-number convection in mercury and water, Dyn. Atmos. Oceans. 24 (1) (1996) 117–127.

4. **Cioni S., Ciliberto S., Sommeria J.,** Strongly turbulent Rayleigh–Bénard convection in mercury: comparison with results at moderate Prandtl number, J. Fluid Mech. 335 (1) (1997) 111–140.

5. **Qui X.-L., Tong P.,** Large-scale velocity structures in turbulent thermal convection, Phys. Rev. E. 64 (3) (2001) 036304.

6. Niemela J.J., Skrbek L., Sreenivasan K.R., Donnelly R.J., The wind in confined thermal convection, J. Fluid Mech. 449 (2001) (25 December) 169–178.

7. Sreenivasan K.R., Bershadskii A., Niemela J.J., Mean wind and its reversal in thermal convection, Phys. Rev. E. 65 (5) (2002) 056306.

8. **Brown E., Nikolaenko A., Ahlers G.,** Reorientation of the large-scale circulation in turbulent Rayleigh–Bénard convection, Phys. Rev. Lett. 95 (8) (2005) 084503.

9. Khalilov R., Kolesnichenko I., Pavlinov A., et al., Thermal convection of liquid sodium in inclined cylinders, Phys. Rev. Fluids. 3 (4) (2018) 043503.

10. Verzicco R., Camussi R., Transitional regimes of low-Prandtl thermal convection in a cylindrical cell, Phys. Fluids. 9 (5) (1997) 1287–1295.

11. Abramov A.G., Ivanov N.G., Smirnov E.M., Numerical study of high-Ra Rayleigh– Bénard mercury and water convection in confined enclosures using a hybrid RANS/LES technique, Proc. of the Eurotherm Seminar 74, Eindhoven, TUE. (2003) 33–38.

12. Schumacher J., Bandaru V., Pandey A., Scheel J.D., Transitional boundary layers in low-Prandtl-number convection, Phys. Rev. Fluids. 1 (8) (2016) 084402.

13. Smirnov S.I., Smirnovsky A.A., Numerical simulation of turbulent mercury natural convection in a heated-from-below cylinder with zero and non-zero thickness of the horizontal walls, Thermal Processes in Engineering. 10 (3–

4) (2018) 94–100 (in Russian).

14. **Benzi R., Verzicco R.,** Numerical simulations of flow reversal in Rayleigh–Bénard convection, Europhysics Letters. 81 (6) (2008) 64008.

15. Wagner S., Shishkina O., Wagner C., Boundary layers and wind in cylindrical Rayleigh–Bénard cells, J. Fluid Mech. 697 (2012) (25 April) 336–366.

16. Mishra P.K., De A.K., Verma M.K., Eswaran V., Dynamics of reorientations and reversals of large-scale flow in Rayleigh–Bénard convection, J. Fluid Mech. 668 (10 February) (2011) 480–499.

17. Roche P.-E., Gauthier F., Kaiser R., Salort J., On the triggering of the ultimate regime of convection, New J. Phys. 12 (8) (2010) 085014.

18. He X., van Gils D.P.M., Bodenschatz E., Ahlers G., Reynolds numbers and the elliptic approximation near the ultimate state of turbulent Rayleigh–Bénard convection, New J. Phys. 17 (6) (2015) 063028.

19. Chilla F., Rastello M., Chaumat S., Castaing B., Long relaxation times and tilt sensitivity in Rayleigh–Bénard turbulence, Eur. Phys. J. B. 40 (2) (2004) 223–227.

20. Ahlers G., Brown E., Nikolaenko A., The search for slow transients, and the effect of imperfect vertical alignment, in turbulent Rayleigh–Bénard convection, J. Fluid Mech. 557 (25 June) (2006) 347–367.

21. Zwirner L., Khalilov R., Kolesnichenko I., et al., The influence of the cell inclination on the heat transport and large-scale circulation in liquid metal convection, J. Fluid Mech. 884 (10 February) (2020) A18.

22. Brown E., Ahlers G., The origin of oscillations of the large-scale circulation of turbulent Rayleigh–Bénard convection, J. Fluid Mech. 638 (10 November) (2009) 383–400.

23. Xi H.-D., Zhou S.-Q., Zhou Q., et al., Origin of the temperature oscillation in turbulent thermal convection, Phys. Rev. Lett. 102 (4) (2009) 044503.

24. Weiss S., Ahlers G., Effect of tilting on turbulent convection: cylindrical samples with aspect ratio $\Gamma = 0.50$, J. Fluid Mech. 715 (25 January) (2013) 314–334.

25. Smirnov S.I., Abramov A.G., Smirnov E.M., Numerical simulation of turbulent Rayleigh– Bénard mercury convection in a circular cylinder with introducing small deviations from the axisymmetric formulation, J. Phys.: Conf. Ser. Математическое моделирование физических процессов

1359 (2019) 012077.

26. Van der Poel E.P., Stevens R.J.A.M., Lohse D., Comparison between two- and threedimensional Rayleigh–Bénard convection, J. Fluid Mech. 736 (10 December) (2013) 177– 194.

27. Scheel J.D., Schumacher J., Local boundary layer scales in turbulent Rayleigh–Bénard convection, J. Fluid Mech. 758 (10 November) (2014) 344–373.

28. Kooij G.L., Botchev M.A., Geurts B.J., Direct numerical simulation of Nusselt number scaling in rotating Rayleigh–Bénard convection, Int. J. Heat Fluid Flow. 55 (October) (2015) 26–33.

29. Horn S., Shishkina O., Toroidal and poloidal energy in rotating Rayleigh–Bénard convection, J. Fluid Mech. 762 (10 January) (2015) 232–255.

30. Scheel J.D., Schumacher J., Global and local statistics in turbulent convection at low Prandtl numbers, J. Fluid Mech. 802 (10 September) (2016) 147–173.

31. Sakievich P.J., Peet Y.T., Adrian R.J.,

Received 20.01.2020, accepted 12.02.2020.

THE AUTHORS

SMIRNOV Sergei I.

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

SMIRNOV Evgueni M.

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

Large-scale thermal motions of turbulent Rayleigh–Bénard convection in a wide aspectratio cylindrical domain, Int. J. Heat Fluid Flow. 61 A (October) (2016) 193–196.

32. Kooij G.L., Botchev M.A., Frederix E.M.A., et al., Comparison of computational codes for direct numerical simulations of turbulent Rayleigh–Bénard convection, Computers & Fluids. 166 (30 April) (2018) 1–8.

33. **Zwirner L., Shishkina O.,** Confined inclined thermal convection in low-Prandtl-number fluids, J. Fluid Mech. 850 (10 September) (2018) 984–1008.

34. Wan Z.-H., Wei P., Verzicco R., et al., Effect of sidewall on heat transfer and flow structure in Rayleigh–Bénard convection, J. Fluid Mech. 881 (25 December) (2019) 218– 243.

35. Smirnov S.I., Smirnov E.M., Smirnovsky A.A., Endwall heat transfer effects on the turbulent mercury convection in a rotating cylinder, St. Petersburg Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 3 (2) (2017) 83–94.

DOI: 10.18721/JPM.13103 УДК 519.226.2-519.248

ДИНАМИКО-СТОХАСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ПОСТРОЕНИЮ И ИСПОЛЬЗОВАНИЮ МОДЕЛЕЙ ПРОГНОСТИЧЕСКОГО ТИПА Ю.А. Пичугин

Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического

приборостроения, Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе рассмотрены два направления развития динамико-стохастического подхода к построению и использованию прогностических моделей. Первое связано с неопределенностью начального состояния моделируемого процесса, а второе — со стохастической природой оценок параметров модели. В первом случае рассмотрены методы вычисления быстрорастущих возмущений начального состояния моделей атмосферной динамики и метод их использования в оптимизации систем наблюдения на основе информационного упорядочивания. Приведен пример определения зон динамической неустойчивости Северного полушария. Во втором случае предложен математический аппарат генерации возмущений параметров модели в соответствии с их вероятностным распределением. На основе данных экономических индексов СССР приведен численный пример возмущения оценок параметров и интегрирования модели Вольтерры.

Ключевые слова: динамическая модель, быстрорастущее возмущение, распределение оценок параметров, ансамбль прогнозов, экономический индекс

Ссылка при цитировании: Пичугин Ю.А. Динамико-стохастический подход к построению и использованию моделей прогностического типа // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 26–41. DOI: 10.18721/JPM.13103

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

A DYNAMIC-STOCHASTIC APPROACH TO THE CONSTRUCTION AND USE OF PREDICTIVE MODELS Yu.A. Pichugin

Saint-Petersburg State University of Aerospace Instrumentation,

St. Petersburg, Russian Federation

The paper considers two directions of development of the dynamic-stochastic approach to the construction and use of predictive models. The first direction is related to the uncertainty of the initial state of the simulated process, and the second – to the stochastic nature of model parameter estimates. In the first case, we consider methods for calculating fast-growing per-turbations (FGPs) of the initial state of atmospheric dynamics models and a method for using FGPs in optimizing observation systems based on information ordering. An example of determining the zones of dynamic instability of the Northern hemisphere is given. In the second case, a mathematical apparatus for generating perturbations of model parameters in accordance with their probability distribution is proposed. Based on the data of the USSR economic indices, a numerical example of perturbation of parameter estimates and integration of the Volterra model is given.

Keywords: dynamic model, fast-growing perturbation, distribution of parameter estimates, ensemble of forecasts, economic index

Citation: Pichugin Yu.A., A dynamic-stochastic approach to the construction and use of predictive models, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 26–41. DOI: 10.18721/JPM.13103

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

Введение

Первоначально динамико-стохастический подход к прогнозированию интенсивно развивался в метеорологии и был связан с неопределенностью начальных состояний прогностических моделей. Однако к настоящему времени вполне сформировалась тенденция (идея) распространения этого подхода на математическое моделирование в целом, так как параметры моделей в случае, когда они оценены методом наименьших квадратов (OLS–Ordinary Least Squares), имеют стохастическую природу.

Цели настоящей работы — во-первых, предложить использование быстрорастущих возмущений начального состояния динамической модели для решения задачи оптимизации мониторинга любого контролируемого многомерного процесса на основе информационного упорядочивания; во-вторых, разработать универсальный метод учета стохастической природы OLS-оценок параметров модели для построения системы прогнозирования, позволяющей отслеживать динамику вероятностного распределения величин, описываемых моделью.

В связи с указанными целями в настоящей работе решаются следующие задачи:

описать основные методы вычисления быстрорастущих возмущений (FGPs – fast-growing perturbations) начального состояния динамической модели и продемонстрировать их применение к выбранной оптимизации;

описать математический аппарат генерирования возмущений в соответствии с вероятностным распределением их OLS-оценок и проиллюстрировать это на численном примере через построение ансамбля интегрирований модели.

При рассмотрении первой задачи, связанной, главным образом, с метеорологией, мы намеренно будем избегать описания некоторых деталей метеорологического прогнозирования, чтобы не перегружать далекого от метеорологии читателя несущественными моментами. Например, рассматривая ошибки измерения начального состояния, мы не будем упоминать объективного анализа — интерполяции на регулярную географическую сетку данных измерений на метеостанциях. В то же время, мы будем делать акцент на деталях математического аппарата, что, с одной стороны, не обнаруживается в достаточной мере в метеорологических статьях, а с другой стороны позволит перенести эти математические приемы и методы в прогнозирование иных многомерных процессов.

Неопределенность начального состояния, быстрорастущие возмущения и оптимизация систем наблюдения

Началом развития динамико-стохастического подхода в построении и реализации прогностических моделей, согласно наиболее известным публикациям, по-видимому, следует считать работу Э.С. Эпштейна [1]. Согласно Эпштейну, стохастическая природа начального состояния динамической прогностической модели, которая естественным образом возникает из-за случайных погрешностей измерений, должна отражаться на результате интегрирования модели.

Пусть $\mathbf{x}(t)$ — вектор величин, которыми оперирует динамическая модель, где t время, т.е. $\mathbf{x}(t)$ — вектор, с помощью которого описывается некоторый моделируемый многомерный процесс. В чисто динамическом подходе мы в результате интегрирования переходим от некоторого состояния $\mathbf{x}(t_0)$ к состоянию $\mathbf{x}(t)$, где $t = t_0 + \Delta t$, а Δt величина временного интервала интегрирования модели. На практике вместо истинного начального состояния $\mathbf{x}(t_0)$ мы всегда имеем возмущенное начальное состояние

$$\tilde{\mathbf{x}}(t_0) = \mathbf{x}(t_0) + \Delta \mathbf{x}(t_0),$$

где возмущение $\Delta \mathbf{x}(t_0)$ возникает в результате погрешностей измерения начального состояния.

Эпштейн предложил моделировать разброс возмущений начального состояния $\Delta \mathbf{x}(t_0)$, который бы соответствовал если не многомерному вероятностному распределению, то хотя бы масштабу погрешностей измерений. Таким образом, при наличии некоторого ансамбля сгенерированных возмущений $\left\{\Delta \mathbf{x}(t_0)_i\right\}_{i=1}^n$ мы имеем также и ансамбль начальных состояний

$$\left\{\tilde{\mathbf{x}}(t_0)_i = \mathbf{x}(t_0) + \Delta \mathbf{x}(t_0)_i\right\}_{i=1}^n.$$

(см. замечание ниже).

Интегрируя динамическую модель от каждого члена этого ансамбля начальных состояний, мы получаем новый ансамбль

 $\left\{\mathbf{x}(t)_{i}\right\}_{i=1}^{n}$ – выборку результатов интегри-

рования объема n. Такая выборка дает возможность оценивать вероятности тех или иных состояний моделируемого процесса $\mathbf{x}(t)$, если предварительно оценить параметры распределения (предположительно нормального).

Внедрение идей Эпштейна в практику метеорологических прогнозов сначала базировалось на использовании метода Монте-Карло как метода генерации возмущений начального состояния [2]. Однако очень скоро, с внедрением ансамблевых прогнозов, возникла идея использовать быстрорастущие возмущения FGPs. Здесь имеются в виду возмущения, которые при сохранении масштаба погрешностей измерения начального состояния имели бы такую (пространственную) конфигурацию, которая приводила бы к наибольшим отклонениям прогноза от результата, полученного интегрированием от измеренного начального состояния. Использование FGPs позволяет получать наибольший разброс ансамбля прогнозов и тем самым в большей мере учитывать степень неопределенности, возникающую вследствие погрешности измерений начального состояния. Эту идею можно реализовать различными методами.

Пусть A есть вещественная матрица оператора модели, линеаризованного в некотором начальном состоянии. Из геометрической интерпретации линейных операторов известно, что в качестве наиболее быстро растущих векторов (возмущений) следует брать собственные векторы матрицы A^TA (T – оператор транспонирования), соответствующие наибольшим собственные векторы и квадратные корни из собственных

чисел матрицы $A^T A$ известны как сингулярные векторы и сингулярные числа (соответственно) матрицы A. Трудность реализации этой идеи в метеорологии состояла в необходимости снижения размерности модели (размерности матрицы A) из-за ограниченных возможностей компьютеров, по крайней мере, на момент внедрения этой идеи в метеорологию. Снижение размерности естественно приводит к сглаживанию исходных данных, т.е. к неизбежной потере информации, что в конечном итоге снижает и эффективность этой идеи [3].

Сравнительно более легким в реализации оказался метод, основанный на вычислении собственных векторов матрицы А, соответствующих наибольшим по модулю собственным числам. Некоторая незначительная потеря состоит здесь в том, что наибольший модуль собственного числа матрицы А не превосходит наибольшего сингулярного числа (см. выше) этой матрицы. Геометрическая суть этого вопроса состоит в том, что сингулярные числа можно интерпретировать длинами полуосей *N*-мерного эллипсоида, в котором *N*-мерная сфера единичного радиуса с центром в нуле векторного пространства отображается линейным оператором с матрицей А (*N* – размерность пространства). Таким образом, сингулярные числа - это коэффициенты растяжения (сжатия) по взаимно ортогональным направлениям сингулярных векторов, которые, в отличие от собственных векторов, в общем случае не сохраняют своего направления, претерпевая некоторый поворот в пространстве. Модули собственных значений равны величинам некоторых отрезков, соединяющих этот эллипсоид со своим центром.

Если матрица А является симметричной, что имеет место в случае самосопряженного оператора, то собственные числа и векторы совпадают с сингулярными числами и векторами. Следовательно, возмущения, пропорциональные сингулярным векторам, которые соответствуют наибольшим сингулярным числам, в принципе, могут расти быстрее, чем возмущения, пропорциональные собственным векторам. Поэтому, когда размерность модели такова, что линеаризацию оператора можно произвести без снижения размерности, а сам линеаризованный оператор не является самосопряженным, использование сингулярных векторов предпочтительнее.

В метеорологии большую популярность приобрел второй подход к вычислению FGPs, пропорциональных собственным векторам матрицы линеаризованного оператора гидродинамической модели. Эта популярность основана на относительной простоте численной реализации, известной как метод выращивания (breeding method [4]). По своей сути этот метод подобен методу прямых итераций с той лишь разницей, что умножение $A\Delta x(t_0)$, на котором основан этот хорошо известный метод, заменено интегрированием модели на некоторое относительно короткое время Δt_{L} (в метеорологии $\Delta t_{b} = 12$ или 24 ч, не более), позволяющее считать определенный таким образом оператор линейным. Действие оператора на возмущение $\Delta \mathbf{x}_k(t_0)$ в итерационном процессе метода выращивания обычно определяется как разность

$$\Delta \mathbf{y}_{k+1}(t_0) = A(\mathbf{x}(t_0) + \Delta \mathbf{x}_k(t_0), \Delta t_b) - (1) -A(\mathbf{x}(t_0), \Delta t_b)$$

с последующим нормированием

$$\Delta \mathbf{x}_{k+1}(t_0) = \delta \left\| \Delta \mathbf{y}_{k+1}(t_0) \right\|_e^{-1} \Delta \mathbf{y}_{k+1}(t_0), \quad (2)$$

где $A(\mathbf{x}(t_0), \Delta t)$ есть результат интегрирования модели на время Δt от начального со-

стояния **х**(t_0); $\| * \|_e$ – энергетическая норма;

 δ — стандарт нормы возмущения (см. ниже); k — номер итерации.

Начальное возмущение $\Delta \mathbf{x}_0(t_0)$ (при k = 0) выбирается произвольно, но с соблюдением масштаба (принятой нормы).

В методе выращивания важную роль играет скалярное произведение. В метеорологии принято использовать энергетическое скалярное произведение.

Пусть суммарная энергия процесса в момент времени t выражается квадратичной формой от компонент вектора $\mathbf{x}(t)$:

$$E(\mathbf{x}(t)) = \sum_{i=1}^{N} \mu_i x_i^2(t),$$

где μ_i (*i* = 1, 2,..., *N*, *N* = dim**x**) – константы модели.

Тогда энергетическое скалярное произведение двух возмущений $\Delta \mathbf{x}'(t)$ и $\Delta \mathbf{x}''(t)$ выражается как [5]

$$\left\langle \Delta \mathbf{x}'(t), \Delta \mathbf{x}''(t) \right\rangle_e = \sum_{i=1}^N \mu_i \Delta x_i'(t) \Delta x_i''(t).$$

Величина энергетической нормы возмущения равна

$$\left\|\Delta \mathbf{x}(t)\right\|_{e} = E^{1/2}(\Delta \mathbf{x}(t)),$$

а величина стандарта нормы возмущения δ (см. формулу (2)) определяется как $\delta = \|\delta \mathbf{x}\|_e$, где компонентами вектора $\delta \mathbf{x}$ выступают стандарты погрешностей измерений начального состояния.

Отношения Рэлея, которые представляют собой приближения собственных значений и, в сущности, коэффициенты роста возмущений, вычисляются с использованием энергетического скалярного произведения

$$l_{k+1} = \frac{\left\langle \Delta \mathbf{y}_{k+1}(t_0), \Delta \mathbf{x}_k(t_0) \right\rangle_e}{\left\langle \Delta \mathbf{x}_k(t_0), \Delta \mathbf{x}_k(t_0) \right\rangle_e}$$

Когда методом прямых итераций вычисляются собственные векторы и собственные значения симметричной вещественной матрицы, после вычисления первого вектора (он будет соответствовать максимальному собственному числу) необходимо производить ортогонализацию Грамма — Шмидта при вычислении последующих векторов, для того чтобы исключить конфигурации (направления) уже вычисленных собственных векторов. В случае симметричной матрицы, ортогонализацию достаточно осуществлять при формировании каждого следующего начального приближения.

В методе выращивания ортогонализацию необходимо выполнять и в каждой итерации между действиями формул (1) и (2). Полученные таким образом последующие векторы можно интерпретировать как собственные векторы не исходного линеаризованного оператора, а его некоторого самосопряженного приближения, что естественным образом приводит к дополнительному ограничению количества растущих векторов возмущений. В качестве критерия остановки «выращивания» возмущений принимается прекращение роста отношения Рэлея l_k .

Замечание. Математическое моделирование в целом, как и большая часть физико-математических и естественных наук, которая имеет дело с реальными природными процессами и явлениями, при построении моделей не обходится без каких-либо допущений, когда приходится пренебрегать явными несоответствиями модели своему объекту. Для того чтобы моделируемое распределение возмущений было хотя бы симметричным, каждое из возмущений добавляется к начальному состоянию дважды с разными знаками. Однако эта цель в полной мере не достигается, поскольку мы никогда не имеем невозмущенного начального состояния $\mathbf{x}(t_0)$, так как моделируемые возмущения прибавляются к результату измерений, который уже содержит ошибки $\tilde{\mathbf{x}}(t_0)$ (возмущения, см. выше). К этому следует добавить и то, что интегрирование модели на относительно длительные сроки (большие, чем при выращивании возмущений), в принципе, не является линейным оператором, действующим на возмущение. Следовательно, смоделировав ансамбль нормально распределенных возмущений («статистически оправданных возмущений» [6]), мы не обязательно получим ансамбль нормально распределенных прогнозов.

Этими моментами метеорология вынуждена пренебрегать, что вполне компенсируется хотя бы тем фактом, что результативность прогнозов, полученных осреднением прогнозов по ансамблю возмущенных начальных состояний, как показала практика, заметно превосходит результативность прогнозов от исходного начального состояния. С другой стороны, как отмечалось выше, полученный таким образом ансамбль прогнозов позволяет оценить параметры распределения, т.е. построить вероятностное распределение и вероятностный прогноз. Динамико-стохастический подход к прогнозированию, реализуемый таким образом, уже в конце прошлого столетия прочно вошел в общемировую практику метеорологического прогнозирования и, в частности, практику Гидрометцентра России.

Как нетрудно было заметить, быстрорастущие возмущения (FGPs), вычисленные тем или иным методом, определяются начальным состоянием, так как от начального состояния зависит результат линеаризации оператора модели (см. выше), но и существенно зависят от качества использованной модели.

Пусть имеется выборка начальных состояний $\{\mathbf{x}(t_i)\}_{i=1}^n$, полученных как результаты измерений в моменты времени $\{t_i\}_{i=1}^n$, и эти моменты охватывают достаточно большой период времени. По этой выборке начальных состояний можно вычислить выборку FGPs $\left\{\Delta \mathbf{x}(t_i)\right\}_{i=1}^n$ с наибольшим

коэффициентом роста на промежутке выращивания или, если размерность позволяет, соответствующие наибольшему сингулярному числу (см. выше). Далее, построив по выборке возмущений базис главных компонент и регрессию возмущений на этот базис (см. работу [7]), мы можем упорядочить компоненты вектора $\Delta \mathbf{x}(t)$ (т. е. исходного вектора $\mathbf{x}(t)$) по убыванию количества информации (см. работу [8]) относительно главных компонент, интерпретируемых как скрытые факторы. В метеорологии, если в качестве $\Delta \mathbf{x}(t)$ рассматривать возмущения только одного конкретного метеорологического поля, например геопотенциала $H_{_{500}}$ (высота изобарической поверхности – 500 мбар), приземного давления или приземной температуры, то каждая компонента вектора $\Delta \mathbf{x}(t)$ соответствует некоторой конкретной точке географической сетки. Таким образом можно выявить географические зоны, где ошибки метеорологических измерений могут приводить к существенным ошибкам прогнозирования. Другими словами, зоны наибольшей информативности, по сути, являются зонами динамической неустойчивости. Эта идея была реализована в работе [9] с использованием полусферной модели циркуляции атмосферы по выборке начальных состояний объемом n = 216и охватывающей временной интервал в три года (1999 – 2001). При этом в алгоритме вычисления FGPs применялась формула

$$\Delta \mathbf{y}_{k+1}(t_0) =$$

$$= A \big(\mathbf{x}(t_0) + \Delta \mathbf{x}_k(t_0), \Delta t_b \big) - \mathbf{x}(t_0).$$
^(1a)

Мотивация применения формулы (1а) состоит в том, что нас интересует максимально быстрый уход не от результата интегрирования на короткое время Δt_b , а от начального состояния. К этому следует добавить, что применение формулы (1а) ускоряет процесс вычисления быстрорастущих возмущений (FGPs), а использование полученных таким образом FGPs существенно улучшило результаты ансамблевых прогнозов. Информационное упорядочивание в работе [9] производилось по возмущениям поля H_{500} как наиболее важного компонента динамики атмосферы. Работа [9] является иллюстрацией к вышедшей существенно позже работе [8]. На рис. 1 приводится итоговый результат работы [9]. Отмеченные на карте наиболее информативные зоны соответствуют известным географическим особенностям (Гольфстрим, Алеутские острова), оказывающим, по общему мнению метеорологов, существенное влияние на атмосферные процессы, что, в свою очередь, говорит об объективности метода и качестве использованной модели.

Очевидно, методика, предложенная в работе [9], может быть использована для оптимизации любых систем пространственного мониторинга при наличии выборки наблюдений и математической модели контролируемого процесса. Актуальность этой методики (перехода от наблюдений к FGPs) в информационном упорядочивании определяется необходимостью решать задачу прогноза, когда системы наблюдения действительно нуждаются в оптимизации, помимо задачи контроля.

Стохастическая природа оценок параметров модели и генерация возмущений, соответствующих их вероятностному распределению

При построении математических моделей каких-либо процессов, не обязательно природных, возникает задача оценки параметров, которые, с одной стороны, не являются известными физическими или иными константами, а с другой стороны, при их линейном вхождении в модель, оцениваются OLS-методом по исходным данным. Некоторым продвижением в развитии динамико-стохастического подхода в математическом моделировании была постановка вопроса проверки статистической гипотезы о принадлежности истинных значений параметров модели такой области, когда интегрирование модели устойчиво (или неустойчиво) по Ляпунову [10]. Решение этого вопроса, представленное в той же работе

[10], в дальнейшем получило существенное уточнение и теоретическое обоснование в работе [11].

Однако на проблему динамической устойчивости модели можно смотреть и с другой стороны. Вместо того, чтобы проверять статистическую гипотезу, отвечающую на вопрос, будет ли решение устойчиво или нет при истинных значениях параметров, можно исследовать степень возможной неустойчивости, моделируя разброс оценок параметров в соответствии с полученным распределением. Таким образом, следующим этапом развития динамико-стохастического подхода к построению и использованию моделей прогностического типа, по всей видимости, должно быть моделирование распределения OLS-оценок параметров модели, что позволяет учесть неопределенность, возникающую вследствие стохастической природы этих оценок. Рассмотрим основные технические моменты реализации этой идеи.

Следуя работе [11], будем предполагать, что параметры модели оцениваются как параметры системы регрессионных уравнений:

$$y_{l} = \theta_{0l} + \theta_{1l}x_{1} + \theta_{2l}x_{2} + \dots + \theta_{kl}x_{k} + \varepsilon_{l},$$
(3)
$$l = 1, 2, \dots, m,$$

где каждое уравнение содержит одинаковый набор регрессоров $\{x_j\}_{j=1}^k$ и соответствует

какому-либо дифференциальному уравнению исходной модели, в которое подлежащие оценке параметры входят линейно.

При этом под левыми частями уравнений системы (3) подразумеваются любые выражения, а под переменными правых частей системы (регрессорами, см. выше) также подразумеваются любые выражения, но имеющие в качестве множителей пара-



Рис. 1. Зоны Северного полушария, связанные с динамической неустойчивостью

метры, подлежащие оценке. Ниже это будет проиллюстрировано конкретным примером.

Будем предполагать, что имеется выборка всех значений переменных объемом *n*. Вычислив средние значения по каждой из переменных величин

$$\overline{y}_{l} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_{il}, \ l = 1, 2, ..., m;$$

$$\overline{x}_{j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_{ij}, \ j = 1, 2, ..., k,$$

перейдем к центрированным переменным

$$y_{il} := y_{il} - \overline{y}_l, \ l = 1, 2, ..., m;$$

$$x_{ij} := x_{ij} - \overline{x}_j, \ j = 1, 2, ..., k$$

$$(i = 1, 2, ..., n),$$

что позволит избавиться в системе (3) от параметров θ_{0l} (l = 1, 2, ..., m)

$$y_l = \theta_{1l} x_1 + \theta_{2l} x_2 + \dots + \theta_{kl} x_k + \varepsilon_l,$$
 (3a)
 $l = 1, 2, \dots, m.$

Полученными таким образом центрированными переменными заполним матрицы Y и X размерностей $n \times m$ и $n \times k$, соответственно. В матричном виде система (3а) может быть записана в виде

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} \mathbf{\Theta} + \mathbf{E}, \tag{4}$$

где каждый *l*-ый столбец матрицы **O** есть вектор $\boldsymbol{\theta}_{l}$, параметров *l*-го уравнения центрированной системы (3a); элемент є $(n \times m)$ -матрицы Е есть погрешность *l*-го уравнения при подстановке *i*-х центрированных значений выборки, а OLS-оценка матрицы параметров следует выражению

$$\widehat{\boldsymbol{\Theta}} = \left(\widehat{\boldsymbol{\theta}}_1, \widehat{\boldsymbol{\theta}}_2, ..., \widehat{\boldsymbol{\theta}}_m\right) = \left(\mathbf{X}^T \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}.$$
 (5)

Матрицы Θ и Θ имеют размерность $k \times m$. Из столбцов этих матриц сконструируем составные векторы

$$\boldsymbol{\theta}^{T} = (\boldsymbol{\theta}_{1}^{T}, \boldsymbol{\theta}_{2}^{T}, ..., \boldsymbol{\theta}_{m}^{T}),$$
$$\hat{\boldsymbol{\theta}}^{T} = (\hat{\boldsymbol{\theta}}_{1}^{T}, \hat{\boldsymbol{\theta}}_{2}^{T}, ..., \hat{\boldsymbol{\theta}}_{m}^{T}).$$

Согласно теории OLS, если предполагается, что каждый столбец матрицы Е подчиняется многомерному нормальному распределению, т. е.

$$\boldsymbol{\varepsilon}_l \sim N(\mathbf{0}, \sigma_l^2 \mathbf{I}),$$

где **0** – нулевой вектор, **I** – единичная матрица, то каждый столбец матрицы Θ подчиняется распределению

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_l \sim N(\boldsymbol{\theta}_l, \boldsymbol{\sigma}_l^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}).$$

Несмещенная оценка σ_l^2 выражается как

$$\widehat{\sigma}_{l}^{2} = \frac{1}{n-k-1} (\mathbf{Y}_{l} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{l})^{T} (\mathbf{Y}_{l} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\theta}}_{l}), \quad (6)$$

где Y₁ – *l*-ый столбец матрицы Y. Из этого следует, что составной вектор $\boldsymbol{\theta}$ также подчиняется многомерному нормальному распределению $\boldsymbol{\theta} \sim N(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{V}_{\hat{\mathbf{h}}}).$ Поэтому рассмотрим подробно задачу построения матрицы V_д.

Пусть ортогональная матрица R размерности *m* × *m* приводит к диагональному виду матрицу $\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}$, т. е. матрица $\mathbf{R}^T \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} \mathbf{R}$ имеет диагональную структуру. Вычислим матрицу

$$\mathbf{Z}=\mathbf{Y}\mathbf{R},$$

для которой запишем систему регрессионных уравнений в матричном виде, аналогично представлению (4):

$$\mathbf{Z} = \mathbf{X} \mathbf{\Xi} + \Delta. \tag{7}$$

Далее вычислим несмещенные оценки, аналогичные оценкам (5) и (6) (Δ – матрица остатков), т. е.

$$\widehat{\mathbf{\Xi}} = \left(\widehat{\boldsymbol{\xi}}_1, \widehat{\boldsymbol{\xi}}_2, ..., \widehat{\boldsymbol{\xi}}_m\right) = \left(\mathbf{X}^T \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Z}$$
(8)

И

$$\widehat{\delta}_{l}^{2} = \frac{1}{n-k-1} \left(\mathbf{Z}_{l} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\xi}}_{l} \right)^{T} \left(\mathbf{Z}_{l} - \mathbf{X}\widehat{\boldsymbol{\xi}}_{l} \right), \quad (9)$$

где \mathbf{Z}_l означает *l*-ый столбец матрицы \mathbf{Z} , а $\hat{\boldsymbol{\xi}}_{l} - l^{l}$ ый столбец матрицы $\widehat{\boldsymbol{\Xi}}$.

При этом каждый столбец Е подчиняется многомерному нормальному распределению

$$\widehat{\boldsymbol{\xi}}_l \sim N(\boldsymbol{\xi}_l, \delta_l^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}),$$

а составной вектор (аналогичный векто $py\boldsymbol{\theta}$)

 $\widehat{\boldsymbol{\xi}} \sim N(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{V}_{\widehat{\boldsymbol{\xi}}}).$

Матрица $V_{\hat{\xi}}$ имеет размерность $(mk) \times (mk)$ и блочно-диагональную структуру в силу некоррелированности столбцов **Z**:

 $\begin{pmatrix} \delta_1^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{v} \\ \mathbf{0} & \delta_2^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} & \dots & \mathbf{0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ & \dots & \mathbf{0} & \delta_m^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \end{pmatrix}$

Тогда, следуя работе [11], имеем:

$$\mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}} = \mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_{(k)} \mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\xi}}} (\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_{(k)})^T, \qquad (10)$$

где $\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_{(k)}$ – кронекеровское произведение **R** (см. выше) на единичную матрицу размерности $k \times k$.

Формула (10) естественным образом следует из формул для оценок составных векторов:

$$\widehat{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_{(k)} \widehat{\boldsymbol{\xi}},$$

$$\widehat{\boldsymbol{\xi}} = (\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_{(k)})^T \widehat{\boldsymbol{\theta}}.$$
(11)

Из остатков регрессий (3а) можно составить вектор

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots \varepsilon_m)^T,$$

который подчиняется многомерному нормальному распределению $\varepsilon \sim N(0, V_s)$, а также аналогичный вектор $\delta \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{V}_{\delta})$.

Реализациями вектора є являются строки матрицы E, а вектора δ – строки матрицы Δ (см. формулы (4) и (7)). Для указанных векторов и их ковариационных матриц выполняются следующие равенства:

$$\delta = \mathbf{R}^{T} \varepsilon, \mathbf{V}_{\delta} = \mathbf{R}^{T} \mathbf{V}_{\varepsilon} \mathbf{R},$$

$$\varepsilon = \mathbf{R} \delta, \mathbf{V}_{\varepsilon} = \mathbf{R} \mathbf{V}_{\delta} \mathbf{R}^{T}.$$
(12)

Из групп формул (11) и (12) следует, что в принципе достаточно вычислить оценки (5) и (6), а оценки (8) и (9) получить, пользуясь этими группами формул, или наоборот, вычислить только оценки (8) и (9), а (5) и (6) получить на основе (11) и (12).

В центрированном варианте модели (3а) с вычисленными OLS-оценками параметров для каждого *l*-го уравнения (l = 1, 2, ..., m)введем обозначения

$$\widehat{y}_{il} = \widehat{\theta}_{1l} x_{i1} + \widehat{\theta}_{2l} x_{i2} + \dots + \widehat{\theta}_{kl} x_{ik},$$

$$i = 1, 2, \dots, n$$

и вычислим коэффициенты детерминации (квадраты коэффициентов множественной

корреляции):

$$R_l^2 = \sum_{i=1}^n \hat{y}_{il}^2 / \sum_{i=1}^n y_{il}^2.$$
(13)

Проверку гипотезы

$$H_{l}: \theta_{1l} = \theta_{2l} = ... = \theta_{kl} = 0$$

можно осуществить посредством статистики [12]:

$$\gamma_l = \frac{R_l^2 (n - k - 1)}{\left(1 - R_l^2\right)k},$$
 (14)

которая, при верной гипотезе Н, подчиня-

ется F-распределению, т.е. $\gamma_l \sim F_{n-k-1,k}$. Отвергая гипотезу H_l , мы утверждаем право на включение в систему (3а), а, следовательно, и в исходную систему (3), *l*-го уравнения (l = 1, 2, ..., m). Следует отметить, что переход к матричной записи (4) системы (3) вовсе не требует центрирования переменных. Если бы мы не прибегали к центрированию, матрица Х имела бы дополнительный столбец, стоящий слева на первом месте и заполненный единицами, а матрица Θ имела бы дополнительную строку, стоящую сверху на первом месте и заполненную параметрами $\hat{\theta}_{0l}$ (l = 1, 2, ..., m). Однако построение матрицы $V_{\hat{\theta}}$ в об-

щем случае невозможно без регрессии (7) и оценки (8), что требует непременного перехода к центрированным переменным.

Из структуры $V_{\hat{\theta}}$ следует, что ортогональная матрица Q, приводящая $V_{\hat{\theta}}$ к диагональному виду, имеет следующий вид [11]:

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_{(k)})(\mathbf{I}_{(m)} \otimes \mathbf{W}) = \mathbf{R} \otimes \mathbf{W}, \qquad (15)$$

где ортогональная матрица W размерности $k \times k$ приводит к диагональному виду матрицу $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$.

Следовательно, имеет место равенство

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{V}_{\widehat{\boldsymbol{\theta}}} \mathbf{Q} = \mathbf{\Lambda}_{\widehat{\boldsymbol{\theta}}}$$

где Л – диагональная матрица.

Предположим, что матрица Р размерности $h \times s$, где h = mk (см. выше), содержит линейно независимые центрированные строки, удовлетворяющие тесту на нормальное распределение. Если Р является матрицей полного ранга, т.е. при s > h rank $\mathbf{P} = h$, то переход к независимым (некоррелированным) строкам матрицы не приведет к снижению размерности. Поэтому после соответствующих преобразований и нормирования можно считать столбцы этой матрицы \mathbf{P}_i (i = 1, 2, ..., s) реализациями многомерного нормального распределения $\mathbf{P}_i \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$. Ансамбль возмущений параметров $\{\Delta \boldsymbol{\theta}_i\}_{i=1}^s$ получаем по формуле

$$\Delta \boldsymbol{\theta}_{i} = \mathbf{Q} \boldsymbol{\Lambda}^{1/2} \mathbf{P}_{i}, i = 1, 2, \dots, s, \quad (16)$$

так как матрица $\mathbf{Q} \mathbf{\Lambda}^{1/2}$ переводит распределения $N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ в распределение $N(\mathbf{0}, \mathbf{V}_{\hat{\mathbf{\theta}}})$. При этом матрица $\mathbf{\Lambda}^{1/2}$ задает масштаб возмущений, а матрица \mathbf{Q} — взаимозависимость, соответствующую их распределению.

Возвращаясь к нецентрированной исходной системе уравнений (3) (к нецентрированным переменным), мы должны вычислить оценки параметров θ_{0l} (l = 1, 2, ..., m), играющих роль свободных членов. Напомним, что OLS-оценки невозмущенных свободных членов системы (3) удовлетворяют соотношениям

$$\hat{\theta}_{0l} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(y_{il} - \hat{\theta}_{1l} x_{i1} + \hat{\theta}_{2l} x_{i2} + \dots + \hat{\theta}_{kl} x_{ik} \right) =$$

$$= \overline{y}_l - \sum_{j=1}^{k} \hat{\theta}_{jl} \overline{x}_j, l = 1, 2, \dots, m,$$
(17)

которые можно использовать в качестве формул вычисления во всех случаях, включая случаи возмущенных параметров.

Действительно, пусть вычислены возмущенные значения параметров

$$\tilde{\theta}^{i}_{jl} = \hat{\theta}_{jl} + \Delta \theta^{i}_{jl}, \quad l = 1, 2, ..., m,$$

$$j = 1, 2, ..., k, \quad i = 1, 2, ..., s.$$
(18)

Из формулы (17) видно, что свободные члены уравнений системы (3) вычисляются как средние арифметические. Из этого факта следует утверждение.

Утверждение. При любом фиксированном наборе возмущенных параметров (см. формулу (18)) подстановка этих значений в формулу (17) дает OLS-оценку свободных членов системы уравнений (3), т.е. OLS-оценка свободных членов равна

$$\widehat{\theta}_{0l}^{i} = \overline{y}_{l} - \sum_{j=1}^{\kappa} \widetilde{\theta}_{jl}^{i} \overline{x}_{j}, \qquad (19)$$

$$l = 1, 2, ..., m, i = 1, 2, ..., s.$$

Непременное следование формуле (19) при вычислении свободных членов модели опирается на предположение, что возмущения, вносимые в оценки параметров, которые являются коэффициентами при переменных, в достаточной мере реализуют стохастическую природу модели.

Как и в замечании к разделу «Неопределенность начального состояния, быстрорастущие возмущения и оптимизация систем наблюдения», здесь следует отметить, что в итоге мы моделируем не распределение $N(\hat{\theta}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$, а распределение $N(\hat{\theta}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$ так как истинное значение вектора параметров $\boldsymbol{\theta}$ остается неизвестным, а прибавив к распределению $N(\mathbf{0}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$ значение оценки $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ (см. формулу (18)), мы получаем распределение $N(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$. Поэтому употребляемый ниже термин *невозмущенные параметры* не вполне корректен.

Проинтегрировав исходную модель, параметры которой оценивались посредством регрессионной модели (3) как при невозмущенных, так и при возмущенных параметрах, мы получаем временную последовательность выборок элементов модели. Вычисляя оценки параметров модели. Вычисляя оценки параметров распределений отдельных элементов или групп элементов модели, мы учитываем неопределенность, связанную с оценкой параметров модели, и получаем возможность оценивать вероятности тех или иных состояний исследуемого процесса и проверять те или иные статистические гипотезы.

Замечание. В реализации динамико-стохастического подхода к построению и использованию моделей прогностического типа имеют место две существенные проблемы.

Первая связана с необходимостью моделировать выборки, принадлежащие многомерному нормальному распределению $N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$. Здесь размерность равна количеству оцениваемых параметров. Эта задача требует немалых усилий, но, в принципе, решаема.

Вторая проблема связана с ситуацией, когда в уравнениях системы (3) группы переменных правых частей различны или совпадают лишь частично, и мы не можем использовать формулы (4) и (5), оценивая параметры каждого уравнения отдельно. Эта проблема разрешается естественным образом, когда система (3) состоит из одного уравнения или когда левые части системы (3) независимы. В последнем случае $\mathbf{R} = \mathbf{I}$ и $\mathbf{V}_{\hat{\theta}} = \mathbf{V}_{\hat{\xi}}$, т. е. матрица взаимных ковариаций оценок параметров имеет блочно-диагональную структуру, где все блоки различны и каждый блок соответствует одному из уравнений системы (3). При этом матрица **Q** также имеет блочно-диагональную структуру (см. формулу(15)):

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_{1} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{W}_{2} & \dots & \mathbf{0} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{W}_{m} \end{pmatrix}, \qquad (20)$$

где все ортогональные блоки \mathbf{W}_{l} (l = 1, 2, ..., m) различны.

В противном случае (при $\mathbf{R} \neq \mathbf{I}$) равенство $\mathbf{R} = \mathbf{I}$ становится еще одним вынужденным допущением.

И наконец, отметим, что на рассмотренный в вышеприведенном замечании случай различных правых частей уравнений системы (3) при условии $\mathbf{R} = \mathbf{I}$, очевидно, также в полной мере распространяется теорема, отвечающая на вопрос принадлежности истинных значений параметров некоторой области, сформулированная и доказанная в работе [11].

Численный пример

В качестве примера рассмотрим построение (оценку параметров) и интегрирование при возмущенных значениях параметров модели Вольтерры (см. работу [10]), а в качестве исходных данных для построения модели возьмем таблицу значений индексов выпуска, фондов и труда в СССР за период 1958 — 1990 гг. (n = 33), использованную и в работе [11], где все значения даны в процентах от значений на 1970 г. (табл. 1).

При этом мы будем считать, что индекс выпуска продукции достаточно точно определяется известной формулой производственной функции

$$Y = aK^{\alpha 1}L^{\alpha 2},\tag{21}$$

где параметры a, α_1 и α_2 успешно определены по данным табл. 1 в работе [11], а модель Вольтерры описывает взаимную динамику капиталовложений и людских ресурсов, т. е.

$$\frac{K}{K} = \beta_{01} + \beta_{11}K + \beta_{21}L,$$

$$\frac{\dot{L}}{L} = \beta_{02} + \beta_{12}K + \beta_{22}L.$$
(22)

Таблица	1

Индексы выпуска, фондов и труда (%) в СССР за период 1958 – 1990 гг. [13]

Год	Y	K	L
1958	43,20	43,20 30,83	
1959	46,45	33,94	64,19
1960	50,17	50,17 38,10	
1961	53,59	41,59	73,06
1962	56,63	44,97	75,72
1963	58,90	49,79	78,16
1964	64,38	54,31	81,26
1965	68,81	60,16	85,25
1966	74,39	68,11	88,36
1967	80,85	78,00	91,24
1968	87,55	86,68	94,35
1969	91,68	93,01	97,45
1970	100,00	100,00	100,00
1971	105,65	107,84	102,88
1972	109,81	116,64	105,54
1973	119,62	125,98	108,09
1974	125,98	135,32	110,64
1975	131,73	145,69	113,30
1976	139,48	156,78	115,52
1977	145,81	167,69	117,96
1978	153,32	179,45	120,40
1979	157,10	191,56	122,62
1980	164,82	203,74	124,72
1981	173,55	216,58	126,39
1982	186,64	230,20	127,72
1983	195,43	244,73	128,71
1984	203,11	259,80	129,49
1985	206,29	274,32	130,60
1986	211,03	288,73	131,37
1987	214,41	303,50	131,49
1988	223,85	318,14	129,93
1989	229,43	333,94	127,94
1990	220,26	349,49	125,17

Обозначения: Y – выпуск продукции, K – капиталовложения, L – людские ресурсы. Данные 1970 г. приняты за 100 %.

Такой выбор определен целым рядом причин. Во-первых, к рассмотренному в работе [11] вопросу о статистически корректной оценке параметров α, и α, производственной функции (21) есть существенные добавления относительно оценки параметра а (см. ниже). Во-вторых, модель Вольтерры (22) представляет собой пример минимальной размерности, позволяющий проиллюстрировать предлагаемый математический аппарат. В-третьих, модель (22) обладает тем замечательным свойством, что при положительных начальных значениях результат интегрирования никогда не выйдет за пределы положительных значений (за пределы первого квадранта), что вполне соответствует природе входящих в нее переменных. В рассматриваемом примере, согласно модели (22) и данным табл. 1, m = k = 2 и n = 33. Отметим, что в модели (22) обозначения параметров приняты в соответствии с работой [10] и отличаются от обозначений в моделях (3) и (3а) предыдущего раздела. Однако остальные обозначения предыдущего раздела, в частности обозначения вспомогательных матриц, мы оставляем неизменными.

Напомним, что в работе [11] после логарифмирования равенства (21) были получены следующие OLS-оценки параметров: $\hat{\alpha}_1 = 0,631$ и $\hat{\alpha}_2 = 0,260$. Для выполнения принятого в экономической науке условия

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1 \tag{23}$$

экономисты используют центральную проекцию на прямую (23) в плоскости значений этих параметров (α_1 и α_2), что дает значения $\alpha_1^e = 0,708$ и $\alpha_2^e = 0,292$.

В работе [11] предложено брать на прямой (23) точку максимального правдоподобия по распределению $N(\hat{\alpha}, V_{\hat{\alpha}})$, где $\hat{\alpha} = (\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2)^T$, что дает значения $\alpha_1^* = 0,585$ и $\alpha_2^* = 0,415$. Как показала проверка соответствующих статистических гипотез, точка (вектор $\alpha^* = (\alpha_1^*, \alpha_2^*)^T$) максимального правдоподобия не опровергает гипотезу $H_*: \alpha = \alpha^*$ по любому из стандартных статистических критериев (χ^2 , *t*, *F*), а принятая в экономике центральная проекция опровергает гипотезу $H_e: \alpha = \alpha^e$ по всем критериям (см. работу [11]).

Однако в статье [11] не был отмечен важный момент, а именно — после внесения коррективы в оценки значений α, и α_2 , следует, согласно утверждению предыдущего раздела, вычислить новое значение коэффициента *a* формулы (19), а именно $a = e^{\mu}$, где

$$\hat{\mu} = \frac{1}{33} \sum_{i=1}^{33} (\ln Y_i - \alpha_1^* \ln K_i - \alpha_2^* \ln L_i),$$

что дает следующие значения коэффициентов: 2

$$\hat{\mu} = 6,13 \cdot 10^{-3}, a = 1,01.$$

Они существенно отличаются от первоначальной OLS-оценки ($\hat{\mu} = 0,50$, a = 1,65).

Значения производных по времени от капиталовложений аппроксимируем по формулам

$$\dot{K}_{1} \coloneqq \frac{K_{2} - K_{1}}{\Delta t}, \quad \dot{K}_{33} \coloneqq \frac{K_{33} - K_{32}}{\Delta t},$$
$$\dot{K}_{t} \coloneqq \frac{K_{t+1} - K_{t-1}}{2\Delta t}, \quad t = 2, 3, ..., 32.$$

Эти же формулы используем для аппроксимации значений производных по времени индекса трудовых затрат L (людских ресурсов). В обоих случаях $\Delta t = 1$ год.

После центрирования всех значений системы (22), согласно формуле (5), получаем следующие значения:

$$\begin{pmatrix} \hat{\beta}_{11} & \hat{\beta}_{12} \\ \hat{\beta}_{21} & \hat{\beta}_{22} \end{pmatrix} = 10^{-4} \begin{pmatrix} -1,31 & -1,90 \\ -3,15 & 0,065 \end{pmatrix}, \quad (24)$$

а оценки свободных членов системы (22), вычисленные по формуле (19), соответственно равны $\hat{\beta}_{01} = 0,129$ и $\hat{\beta}_{02} = 0,050$.

Качество полученных оценок характеризуется значениями коэффициентов детерминации (13) $R_1^2 = 0,772$ и $R_2^2 = 0,906$, а также значениями статистик (14) $\gamma_1 = 50,7$ и $\gamma_2 = 144,6$, что в обоих случаях значительно превосходит критическое значение *F*-статистики при уровне значимости $\alpha = 0,01$ и равное $F_{30,2} = 5,39$.

На рис. 2 представлен результат интегрирования модели методом Рунге — Кутты с временным шагом h = 0,25 года при невозмущенных значениях параметров системы (22).

Далее мы ограничимся лишь рассмотрением индекса выпуска *Y*, вычисляемого по формуле (21).
Вычисленные матрицы

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 0,760 & -0,650 \\ 0,650 & 0,760 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 0,979 & -0,204 \\ 0,204 & 0,979 \end{pmatrix}$$
(25)

показывают необходимость в полной мере использовать идеологию построения возмущений параметров, рассмотренную в предыдущем разделе.

Здесь мы воздержимся от того, чтобы приводить значения остальных матриц, связанных с построением этой модели. Для реализации ансамбля возмущений в формуле (16) использована матрица (таблица чисел) **Р** размерности 4×25 , строки которой не коррелируют между собой, удовлетворяют тесту на нормальный закон распределения, при этом дают несмещен-

ные оценки среднего значения и стандартного отклонения, равные 0 и 1, соответственно.)

На рис. 3 представлен ансамбль значений Y, полученных в результате интегрирования нашей модели. Ансамбль $\{Y_i(t)\}_{i=0}^{25}$ включает 26 членов: 25 при возмущенных параметрах модели (i = 1, 2, ..., 25) и при невозмущенных оценках параметров (i = 0).

Отметим, что среднее значение по ансамблю на 2020 год, равное \overline{Y} (2020) = 174,95%, практически совпадает с результатом интегрирования при невозмущенных параметрах, равном $Y_0(2020) = 173,34\%$ (относительное расхождение составляет менее одного процента).

Анализ выборки конечных значений интегрирования при возмущенных параметрах обнаружил следующее. При числе интервалов гистограммы, вычисленном по правилу



Рис. 2. Результат интегрирования модели методом Рунге – Кутты при невозмущенных параметрах (22):

1 - выпуск продукции $Y_0, 2 -$ капиталовложения $K_0, 3 -$ людские ресурсы L_0



Рис. 3. Ансамбль результатов интегрирования модели (22). Он включает 26 членов (кривых)

Стёрджеса [14] и равном пяти, значение теста Пирсона у для проверки на нормальный закон распределения составляет $\eta = 0,650$. Критическое значение при уровне значимости $\alpha = 0.05$ и соответствующем числе степеней свободы равно 9,49. Следовательно, у нас нет причин для отрицания нормального закона распределения. В связи с этим на рис. 4 приводим зависимость от времени параметров нормального распределения Y(t), оцененных по ансамблю всех результатов интегрирования. На этом же графике представлен временной ход границ 95%-го стьюдентовского доверительного интервала. Рост стандартного отклонения соответствует тому, что с увеличением дальности прогноза степень неопределенности неизбежно возрастает.

Как уже отмечалось в предыдущем разделе, оценки параметров, вычисленные по ансамблю результатов интегрирования, позволяют рассчитывать вероятности каких-либо конкретных состояний исследуемого процесса и проверять те или иные статистические гипотезы. При этом мы имеем временную эволюцию полученных оценок, чем, в конечном итоге, и реализуется динамико-стохастический подход к построению и использованию моделей прогностического типа.

Замечания относительно модели (22)

1. Если в модели (22) изменить только первое уравнение (см. ниже)

$$\dot{K} = \beta_{01} + \beta_{11}K + \beta_{21}L,$$

$$\frac{\dot{L}}{L} = \beta_{02} + \beta_{12}K + \beta_{22}L,$$
 (22a)

то, соответственно, изменятся оценки параметров и статистик первого уравнения:

$$\hat{\beta}_{01} = -4,083, \ \hat{\beta}_{11} = 0,0175,$$

 $\hat{\beta}_{21} = 0,107,$
 $R_1^2 = 0,966, \ \gamma_1 = 426,3.$

Кроме этого, изменится матрица **R**, которая в данном случае оказывается близка к единичной **R** \approx **I** (совпадает с единичной при округлении до третьего знака после запятой). Последнее означает, что $V_{\hat{\theta}} \approx V_{\hat{\xi}}$. Результаты же интегрирования меняются незначительно. В связи с этим мы не будем приводить графики, весьма сходные с представленными на рис. 2 – 4, а приведем таблицу сравнений результатов интегрирования этих моделей на 2020 год (табл. 2).

Сравнение результатов интегрирования моделей (22) и (22а) на 2020 год

Индекс или	Значение, %, для модели		Относительное
оценка	(22)	(22a)	расхождение, 70
K_0	834,00	757,85	-9,13
L_0	19,09	22,99	20,41
Y	174,95	178,68	2,13
\overline{Y}	173,34	180,29	4,00
$\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{Y}$	47,37	40,21	-15,13



Рис. 4. Параметры нормального распределения, оцененные по ансамблю интегрирований модели (22):

1- среднее значение \overline{Y} ; 2- стандартное отклонение $\widehat{\sigma}_{Y}$; 3- границы 95%-го доверительного интервала

Переход к модели (22а), как следует из табл. 2, на 15 % снижает стандартное отклонение. Кроме того, этот переход ухудшает значение теста Пирсона при проверке на нормальный закон распределения конечных значений интервала интегрирования, которое в этом случае составляет $\eta = 3,7$.

2. Отмеченное выше приближенное равенство $\mathbf{R} \approx \mathbf{I}$ позволяет рассматривать вариант модели (22а) с различными правыми частями, считая например, параметр β_{22} равным нулю (исключая *L* из правой части второго уравнения), на что указывает относительно малое значение его оценки (см. замечание к предыдущему разделу и равенство (24)). В этом случае

$$\boldsymbol{\beta}^{T} = (\beta_{11}, \beta_{21}, \beta_{12}),$$

а матрица \mathbf{Q} , согласно формуле (20) и равенству (25), будет иметь вид

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0,979 & -0,204 & 0\\ 0,204 & 0,979 & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

И, наконец, отметим, что модели (22) и (22а) могут рассматриваться как альтернатива хорошо известной в экономической науке модели Солоу. Конечный выбор модели за исследователем.

Заключение

Рассмотрено развитие динамико-стохастического подхода, связанное с неопределенностью начальных состояний прогностических моделей метеорологии. Рассмотрены все технические детали, позволяющие применять этот подход к прогнозированию любых многомерных процессов.

Показано, как быстрорастущие возмущения (FGPs) начальных состояний динамической модели контролируемого процесса и метод информационного упорядочивания можно использовать для оптимизации системы наблюдений.

Рассмотрена проблема учета стохастической природы OLS-оценок параметров модели. Исследованной ранее задаче проверки гипотезы устойчивости интегрирования предложена альтернатива — генерирование разброса OLS-оценок параметров в соответствии с их вероятностным распределением.

Предложенный в настоящей работе математический аппарат учета стохастической природы OLS-оценок параметров динамической модели может найти широкое применение в прогнозировании экономических, социальных, биологических и иных процессов. Эффективность такого подхода продемонстрирована на рассмотренном численном примере.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Epstein E.S.** A scoring system for probability forecast of ranked categories // J. Appl. Meteor. 1969. Vol. 8. No. 6. Pp. 985–987.

2. Leith C.E. Theoretical skill of Monte Carlo forecasts // Monthly Weather Review. 1974. Vol. 102. No. 6. Pp. 409–418.

3. Hamill T.M., Snyder C., Morss R.E. A comparison of probabilistic forecasts from bred, singular-vector and perturbed observation ensembles // Monthly Weather Review. 2000. Vol. 128. No. 6. Pp. 1835–1851.

4. Toth Z., Kalnay E. Ensemble forecasting at NCEP and the breeding method // Monthly Weather Review. 1997. Vol. 125. No. 12. Pp. 3297–3319.

5. Пичугин Ю.А., Мелешко В.П., Матюгин В.А., Гаврилина В.М. Гидродинамические долгосрочные прогнозы погоды по ансамблю начальных состояний // Метеорология и ги-дрология. 1998. № 2. С. 5–15.

6. Астахова Е.Д. Построение ансамблей начальных полей для системы кратко- и среднесрочного ансамблевого прогнозирования погоды // Труды Гидрометцентра России. 2008. Вып. 342. С. 98–117.

7. 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.

8. Пичугин Ю.А. Особенности использования информации по Шеннону в задачах, связанных с линейной регрессией // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 3. С. 164–176.

9. Пичугин Ю.А. География динамической неустойчивости циркуляции атмосферы в Северном полушарии (моделирование и анализ) // Известия Русского географического

общества. 2005. Т. 137. Вып. 3. С. 12-16.

10. Кондрашков А.В. Пичугин Ю.А. Идентификация и статистическая проверка устойчивости модели Вольтерры // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 1 (189). С. 124 –135.

11. Пичугин Ю.А. Геометрические аспекты проверки сложных статистических гипотез в математическом моделировании // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2015. № 2 (218) C. 123–137.

12. Себер Дж. Линейный регрессионный анализ. М.: Мир, 1980. 456 с.

13. Бессонов В.А. Проблемы построения производственных функций в российской переходной экономике // Бессонов В.А., Цухло С.В. Анализ динамики российской переходной экономики. М.: Институт экономики переходного периода, 2002. 589 с.

14. **Sturges H.** The choice of a class-interval // J. Amer. Statist. Assoc. 1926. Vol. 21. No. 153. Pp. 65–66.

Статья поступила в редакцию 27.01.2020, принята к публикации 25.02.2020.

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, Санкт-Петербург, Большая Морская ул., 61. yury-pichugin@mail.ru

REFERENCES

1. **Epstein E.S.**, A scoring system for probability forecast of ranked categories, J. Appl. Meteor. 8 (6) (1969) 985–987.

2. Leith C.E., Theoretical skill of Monte Carlo forecasts, Monthly Weather Review. 102 (6) (1974) 409-418.

3. Hamill T.M., Snyder C., Morss R.E., A comparison of probabilistic forecasts from bred, singular-vector and perturbed observation ensembles, Monthly Weather Review. 128 (6) (2000) 1835–1851.

4. Toth Z., Kalnay E., Ensemble forecasting at NCEP and the breeding method, Monthly Weather Review. 125 (12) (1997) 3297–3319.

5. Pichugin Yu.A., Meleshko V.P., Matyugin V.A., Gavrilina V.M., Hydrodynamic long-term weather forecasts with ensemble of initial states, Meteorology and Hydrology. (2) (1998) 5–15.

6. Astakhova E.D., Postroenie ansambley nachalnyh poley dlya sistemy kratko- i srednesrochnogo ansamblevogo prognozirovaniya pogody [Construction of ensembles of initial fields for the system of short-and medium-term ensemble weather forecasting], Proceedings of the Hydrometeorological Center of Russia. (342) (2008) 98–117.

7. **Pichugin Yu.A.**, Notes on using the principal components in the mathematical simulation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 74–89.

8. **Pichugin Yu.A.,** The Shannon information quantity in the tasks associated with linear regression: usage pattern, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (3) (2019) 164–176.

9. **Pichugin Yu.A.,** Geografiya dinamicheskoy neustoychivosti tsirkulyatsii atmosfery v Severnom polusharii (modelirovanie i analiz) [Geography of dynamic instability of atmospheric circulation in the Northern hemisphere (simulation and analysis)], Reports of Russian Geographical Society. 137 (3) (2005) 12–16.

10. **Kondrashkov A.V., Pichugin Yu.A.,** On the identification and statistical testing stability of Volterra model, St. Petersburg Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (1 (189)) (2014) 124–135.

11. **Pichugin Yu.A.,** Geometrical aspects of testing the complex statistical hypotheses in mathematical simulation, St. Petersburg Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 2 (218) (2015) 123–137.

12. **Seber G.A.F.,** Linear regression analysis, John Wiley & Sons, New York, London, Sydney, Toronto (1977).

13. **Bessonov V.A.,** Problemy postroyeniya proizvodstvennykh funktsiy v rossiyskoy perekhodnoy ekonomike [Problems of construction of production functions in the Russian transitional economy], In the Book:

Bessonov V.A., Tsukhlo S.V., Analiz dinamiki rossiyskoy perekhodnoy ekonomiki [An analysis of the Russian transitional economy], Institute J. Amer. Statist. Assoc. 21 (153) (1926) 65-66.

of the Transitional Economy, Moscow, 2002. 14. Sturges H., The choice of a class-interval,

Received 27.01.2020, accepted 25.02.2020.

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

Математическая физика

DOI: 10.18721/JPM.13104 УДК 517.51; 517.28; 517.983; 537.213, 537.8

ВЗАИМНО-ОДНОРОДНЫЕ ФУНКЦИИ С МАТРИЦАМИ КОНЕЧНОГО РАЗМЕРА

А.С. Бердников¹, К.В. Соловьев^{2,1}, Н.К. Краснова²

¹Институт аналитического приборостроения Российской академии наук,

Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Российская Федерация

Данная работа продолжает изучение свойств функций, однородных по Эйлеру, которые можно использовать при синтезе электрических и магнитных полей электроннои ионно-оптических систем, реализующих спектрографический режим регистрации. Рассматривается обобщение функционального уравнения общего вида для однородных функций, которое соответствует линейным функциональным соотношениям с матрицей минимального размера. В предположении о дифференцируемости рассматриваемых функций найдено общее решение построенного функционального уравнения. Полученные системы функций названы взаимно-однородными по аналогии с однородными функциями Эйлера и присоединенными однородными функциями Гельфанда.

Ключевые слова: функциональное уравнение, присоединенная однородная функция, взаимно-однородные функции, спектрограф

Ссылка при цитировании: Бердников А.С., Соловьев К.В., Краснова Н.К. Взаимнооднородные функции с матрицами конечного размера // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 42–53. DOI: 10.18721/ JPM.13104

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

MUTUALLY HOMOGENEOUS FUNCTIONS WITH FINITE-SIZED MATRICES A.S. Berdnikov¹, K.V. Solovyev^{2,1}, N.K. Krasnova²

¹Institute 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

This work continues our studies in the properties of the homogeneous Euler's functions that can be used in the synthesis of electric and magnetic fields for electron and ion-optical systems to carry out spectrographic recording mode. A generalization of a functional general equation for homogeneous functions has been considered. This equation corresponds to linear functional relations with a minimal-sized matrix. A general solution of the obtained functional equation was found assuming of differentiability of the functions in question. The resulting systems of functions were termed mutually homogeneous functions by analogy with the homogeneous Euler's functions and the associated homogeneous Gel'fand's functions.

Keywords: functional equation, associated homogeneous function, mutually homogeneous functions, spectrograph

Citation: Berdnikov A.S., Solovyev K.V., Krasnova, N.K., Mutually homogeneous functions with finite-sized matrices, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 42–53. DOI: 10.18721/JPM.13104

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

Введение

Данная статья продолжает серию работ [1-4], посвященных исследованию свойств однородных гармонических функций и их использованию при синтезе электрических и магнитных полей для электронно- и ионно-оптических систем, реализующих спектрографический режим регистрации [5-8].

Функциями, однородными по Эйлеру и имеющими степень однородности p, называются вещественные функции многих переменных, удовлетворяющих при любом λ следующему тождеству [9]:

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_n) = \lambda^p f(x_1, x_2, \dots, x_n).$$
(1)

Любую однородную по Эйлеру функцию можно взаимно-однозначным способом представить в виде [9]:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = x_1^{p} g(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$
(2)

где $g(x_2/x_1, x_3/x_1, ..., x_n/x_1) = g(t_2, t_3, ..., t_n)$ вещественная функция от (n - 1) переменных.

Соответственно, единственной однородной функцией степени *p* от одной переменной является степенная функция $f(x) = \text{const} \cdot x^p$, а единственной однородной функцией нулевой степени от одной переменной — константа.

Если функция $f(x_1, x_2, ..., x_n)$ дифференцируема, то ее частные производные по переменным $x_1, x_2, ..., x_n$ будут однородными функциями степени (p-1) [9]. Кроме того, если функция $f(x_1, x_2, ..., x_n)$ является дифференцируемой в любой точке пространства \mathbb{R}^n , то для того, чтобы она была однородной по Эйлеру степени p, необходимо и достаточно, чтобы в любой точке пространства \mathbb{R}^n выполнялось условие

$$x_1 \partial f \partial x_1 + x_2 \partial f \partial x_2 + \dots + x_n \partial f \partial x_n = pf(3)$$

(теорема Эйлера об однородных функциях, называемая также критерием Эйлера для однородных функций [9]).

Вместо определения (1) можно рассмотреть функциональное уравнение вида

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_n) = a_0(\lambda) f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$
(4)

с заранее неизвестной функцией $a_0(\lambda)$, ко-

торое, на первый взгляд, должно обладать бульшей общностью, чем условие (1).

Однако достаточно быстро оказывается, что когда функция $a_0(\lambda)$ непрерывна хотя бы в одной точке, то единственным случаем, когда у уравнения (4) возможны решения, отличные от нуля и представляющие практический интерес, будет степенная функция $a_0(\lambda) = \lambda^p$. При этом, хотя у уравнения (4) и могут быть решения, отличные от степенной функции $a_0(\lambda) = \lambda^p$ и разрывные в любой точке, такие решения представляют интерес разве что в абстрактно-математическом смысле, но отнюдь не для физических приложений.

Действительно, из условия (4) следует, что функция $a_0(\lambda)$ обязана удовлетворять функциональному уравнению

$$\forall \lambda_1, \lambda_2: a_0(\lambda_1\lambda_2) = a_0(\lambda_1) a_0(\lambda_2),$$

поскольку

٢

$$f(\lambda_1 \lambda_2 x) = a_0 (\lambda_1 \lambda_2) f(x) = a_0 (\lambda_1) f(\lambda_2 x) =$$
$$= a_0 (\lambda_2) f(\lambda_1 x) = a_0 (\lambda_1) a_0 (\lambda_2) f(x).$$

Данное уравнение представляет собой мультипликативное функциональное уравнение Коши. Любое решение этого уравнения имеет вид степенной функции $a_0(\lambda) = \lambda^p$, если функция $a_0(\lambda)$ непрерывна хотя бы в одной точке. Для дифференцируемых функций $a_0(\lambda)$ доказательство этого утверждения получается элементарным образом после дифференцирования соотношения

$$a_0(\lambda\mu) = a_0(\lambda) a_0(\mu)$$

по μ в точке $\mu = 1$ и решения соответствующего обыкновенного дифференциального уравнения.

Обобщением функций, однородных по Эйлеру, являются присоединенные однородные функции Гельфанда [10, 11], которые можно определить как решение полубесконечной системы функциональных уравнений:

$$f_{0}(\lambda x_{1}, \lambda x_{2}, ...) = a_{0}(\lambda) f_{0}(x_{1}, x_{2}, ...);$$

$$f_{1}(\lambda x_{1}, \lambda x_{2}, ...) = a_{1}(\lambda) f_{0}(x_{1}, x_{2}, ...) + (5)$$

$$+ a_{0}(\lambda) f_{1}(x_{1}, x_{2}, ...);$$

43

$$f_{2}(\lambda x_{1}, \lambda x_{2}, ...) = a_{2}(\lambda) f_{0}(x_{1}, x_{2}, ...) + a_{1}(\lambda) f_{1}(x_{1}, x_{2}, ...) + a_{0}(\lambda) f_{2}(x_{1}, x_{2}, ...);$$

которые должны выполняться при любом $\lambda > 0$; при этом $a_k(\lambda) -$ это заранее неизвестные функции.

У системы функциональных уравнений (5), которая имеет вид нижней треугольной матрицы с одинаковыми функциями $a_k(\lambda)$ вдоль диагоналей, общее решение может иметь достаточно сложный вид. Однако практический интерес представляет лишь так называемая главная цепочка присоединенных однородных функций, для которой

$$a_{k}(\lambda) = (1/k!) \lambda^{p} (\ln \lambda)^{k}, \qquad (6)$$

$$f_k(x_1, x_2, \dots, x_n) =$$
 (7)

$$= (1/k!) (x_1)^p (\ln x_1)^k g(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

где $g(t_2, t_3, ..., t_n)$ – произвольная вещественная функция от (n - 1) переменных.

Следующим уровнем обобщения являются функции, которые должны удовлетворять системе функциональных уравнений

$$f_k(\lambda x_1, \lambda x_2, \ldots) = a_{kj}(\lambda) f_j(x_1, x_2, \ldots), \quad (8)$$

где k = 1, 2, ..., m, а функции $a_{kj}(\lambda)$ заранее неизвестны.

Такие функции, названные нами взаимно-однородными, исследуются в данной работе.

Получаемые на выходе конструкции могут иметь не только теоретический, но и практический смысл. Так, для электрических и магнитных потенциалов, однородных по Эйлеру, справедлив принцип подобия траектории, введенный Ю.К. Голиковым [5 – 8]:

если надлежащим образом масштабировать начальные условия заряженных частиц, то при справедливости нерелятивистского приближения, траектории частиц в подобных полях будут представлять собой геометрически масштабированные выражения.

Это свойство позволяет синтезировать эффективно работающие электронно- и ионно-оптические системы, примерами которых могут служить, например, полученные в работах [12 – 28].

Для упрощения выкладок предполагается, что как функции $a_{kj}(\lambda)$, так и функции $f_k(x_1, x_2, ..., x_n)$ будут дифференцируемыми в любой точке. Имеется предположение, справедливое для однородных функций Эйлера и для присоединенных однородных функций Гельфанда, что требование дифференцируемости функций во всех точках можно значительно ослабить, заменив его на непрерывность функций хотя бы в одной точке и получив на выходе точно такие же формулы общего вида.

Доказательство соответствующих теорем выходит за рамки данной публикации, поскольку для скалярных потенциалов электрических и магнитных полей, используемых в электронной и ионной оптике, требование дифференцируемости в любой точке всегда выполняется.

Матрица минимального размера

Рассмотрим систему функциональных уравнений, соответствующую матрице (8) размера 2 × 2:

$$f_{1}(\lambda x_{1}, \lambda x_{2}, ...) = a_{11}(\lambda) f_{1}(x_{1}, x_{2}, ...) + a_{12}(\lambda) f_{2}(x_{1}, x_{2}, ...),$$
(9)

$$f_{2}(\lambda x_{1}, \lambda x_{2}, \ldots) = a_{21}(\lambda) f_{1}(x_{1}, x_{2}, \ldots) + a_{22}(\lambda) f_{2}(x_{1}, x_{2}, \ldots),$$
(10)

где функции $a_{11}(\lambda)$, $a_{12}(\lambda)$, $a_{21}(\lambda)$, $a_{22}(\lambda)$ заранее неизвестны.

Применим взаимно-однозначную замену переменных:

$$x = \ln x_1, t_2 = x_2/x_1,$$

$$x_3 = x_3/x_1, \dots, t_n = x_n/x_1.$$

 $t_3 = x_3/x_1,$ При подстановке

$$f_1(x_1, x_2, \dots) = g_1(\ln x_1, x_2/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots) = g_2(\ln x_1, x_2/x_1, \dots, x_n/x_1)$$

вместо уравнений (9), (10) получаем эквивалентные функциональные уравнения:

$$g_{1}(x + \ln \lambda, t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) =$$

$$= a_{11}(\lambda) g_{1}(x, t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) + (11)$$

$$+ a_{12}(\lambda) g_{2}(x, t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}),$$

$$g_{2}(x + \ln \lambda, t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) =$$

$$= a_{21}(\lambda) g_{1}(x, t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) + (12)$$

$$+ a_{22}(\lambda) g_2(x, t_2, t_3, ..., t_n).$$

После дифференцирования уравнений (11), (12) по переменной λ в точке $\lambda = 1$

получаем обыкновенные линейные дифференциальные уравнения с постоянными коэффициентами по переменной *x*:

$$g'_{1}(x, ...) = a'_{11}(1) g_{1}(x, ...) + + a'_{12}(1) g_{2}(x, ...),$$
(13)
$$g'_{2}(x, ...) = a'_{21}(1) g_{1}(x, ...) + + a'_{22}(1) g_{2}(x, ...).$$
(14)

Форма аналитического решения для уравнений (13), (14) зависит от того, к какому классу относятся собственные числа матрицы $||a'_{ii}(1)||$.

Несовпадающие вещественные собственные значения. Пусть собственные числа матрицы (13), (14) являются вещественными и не равными друг другу. Общее решение для системы дифференциальных уравнений (13), (14) имеет вид

$$g_{1}(x, t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) = c_{11}(t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) \exp(p_{1}x) + c_{12}(t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) \exp(p_{2}x),$$

$$g_{2}(x, t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) = c_{21}(t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) \exp(p_{2}x) + c_{22}(t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) \exp(p_{1}x),$$

где $c_{11}, c_{12}, c_{21}, c_{22}$ — это некоторые функции от (n-1) переменных.

В таком случае функции $f_1(x_1, x_2, ..., x_n)$ и $f_2(x_1, x_2, ..., x_n)$ должны будут иметь вид

$$f_{1}(x_{1}, x_{2}, ..., x_{n}) =$$

$$= x_{1}^{pl}c_{11}(x_{2}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}) + (15)$$

$$+ x_{1}^{p2}c_{12}(x_{2}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}),$$

$$f_{2}(x_{1}, x_{2}, ..., x_{n}) =$$

$$= x_{1}^{pl}c_{21}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}) + (16)$$

$$+ x_1^{p2} c_{22}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1).$$

После подстановки выражений (15) и (16) в условия (9) и (10), в силу того, что функции x_1^{p1} и x_1^{p2} являются линейно-независимыми, получаются соотношения

$$\lambda^{p_1} c_{11} = a_{11}(\lambda) c_{11} + a_{12}(\lambda) c_{21}, \qquad (17)$$

$$\lambda^{p2} c_{12} = a_{11}(\lambda) c_{12} + a_{12}(\lambda) c_{22}, \qquad (18)$$

$$\lambda^{p_1} c_{21} = a_{21}(\lambda) c_{11} + a_{22}(\lambda) c_{21}, \qquad (19)$$

$$\lambda^{p2} c_{22} = a_{21}(\lambda) c_{12} + a_{22}(\lambda) c_{22}.$$
 (20)

Линейные алгебраические уравнения (17), (18) для неизвестных функций $a_{11}(\lambda)$ и $a_{12}(\lambda)$ не могут быть линейно-зависимыми (пропорциональными друг другу), за исключением вырожденного случая

$$c_{11} = c_{12} = c_{21} = c_{22} = 0,$$

не представляющего практический интерес, поскольку функции λ^{p_1} и λ^{p_2} являются линейно-независимыми.

Точно так же линейно-независимыми будут линейные алгебраические уравнения (19), (20) для неизвестных функций $a_{21}(\lambda)$ и $a_{22}(\lambda)$.

Следовательно, без ограничения общности, можно считать, что

$$\Delta = c_{11} c_{22} - c_{12} c_{21} \neq 0.$$

В таком случае

$$a_{11}(\lambda) = \lambda^{p1}(c_{11}c_{22}/\Delta) + \lambda^{p2}(-c_{12}c_{21}/\Delta), \quad (21)$$

$$a_{12}(\lambda) = \lambda^{p1}(-c_{11}c_{12}/\Delta) + \lambda^{p2}(c_{11}c_{12}/\Delta), \quad (22)$$

$$a_{21}(\lambda) = \lambda^{p1}(c_{21}c_{22}/\Delta) + \lambda^{p2}(-c_{21}c_{22}/\Delta), \quad (23)$$

$$a_{22}(\lambda) = \lambda^{p_1}(-c_{12}c_{21}/\Delta) + \lambda^{p_2}(c_{11}c_{22}/\Delta). \quad (24)$$

Поскольку функции $a_{11}(\lambda)$, $a_{12}(\lambda)$, $a_{21}(\lambda)$ и $a_{22}(\lambda)$ не должны зависеть от набора переменных $x_1, x_2, ..., x_n$, а функции

$$c_{11}(x_2/x_1,...,x_n/x_1), c_{12}(x_2/x_1,...,x_n/x_1), c_{21}(x_2/x_1,...,x_n/x_1), c_{22}(x_2/x_1,...,x_n/x_1)$$

не должны зависеть от λ , множители

$$c_{11}c_{22}/\Delta, c_{12}c_{21}/\Delta, c_{11}c_{12}/\Delta, c_{21}c_{22}/\Delta$$

 – это константы, не зависящие ни от указанного набора переменных, ни от λ.

Следовательно, выражения

$$c_{22}: c_{12} = (c_{11}c_{22}/\Delta) : (c_{11}c_{12}/\Delta);$$

$$c_{11}: c_{21} = (c_{11}c_{22}/\Delta) : (c_{21}c_{22}/\Delta)$$

также должны быть константами.

В результате

$$c_{11}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1) =$$

$$= s_{11}h_1(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$c_{12}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1) =$$

$$= s_{12}h_2(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$c_{21}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1) =$$

$$= s_{21}h_1(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$c_{22}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1) =$$

$$= s_{22}h_2(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

где величины s_{11} , s_{12} , s_{21} , s_{22} — это произвольные константы; $h_1(t_2, t_3, ..., t_n)$, $h_2(t_2, t_3, ..., t_n)$ — произвольные функции от (n - 1) переменных.

В окончательном виде общее решение для функциональных уравнений (9) и (10) приобретает вид

$$a_{11}(\lambda) = \lambda^{p_1} + (\lambda^{p_2} - \lambda^{p_1})(-s_{12}s_{21}/\Delta^*), \quad (25)$$

$$a_{12}(\lambda) = (\lambda^{p2} - \lambda^{p1})(s_{11}s_{12}/\Delta^*),$$
 (26)

$$a_{21}(\lambda) = (\lambda^{p2} - \lambda^{p1})(-s_{21}s_{22}/\Delta^*), \quad (27)$$

$$a_{22}(\lambda) = \lambda^{p_2} + (\lambda^{p_2} - \lambda^{p_1})(s_{12}s_{21}/\Delta^*), \quad (28)$$

c (

$$J_1(x_1, x_2, \dots, x_n) =$$

= $x_1^{p_1} s_{11} h_1(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1) + (29)$

$$+ x_{1}^{p2} s_{12} h_{2}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}),$$

$$f_{2}(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{n}) =$$

$$x_{1}^{p1} s_{21} h_{1}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}) + (30)$$

$$+ x_{1}^{p2} s_{22} h_{2}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}),$$

где

$$\Delta^* = s_{11}s_{22} - s_{12}s_{21} \neq 0$$

а величины s_{11} , s_{12} , s_{21} , s_{22} — произвольные константы; $h_1(t_2, t_3, ..., t_n)$, $h_2(t_2, t_3, ..., t_n)$ — произвольные функции от (n - 1) переменных.

В общем случае часть констант в формулах (25) – (30) является лишней, поскольку, например, константу s_{11} можно объединить

с функцией

$$h_1(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

а константу s_{22} — с функцией

$$h_2(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

однако тогда случаи $s_{11} = 0$ или $s_{22} = 0$ придется рассматривать отдельно. В частности, можно без ограничения общности положить в общих формулах $s_{11} = s_{22} = 1$, а случаи, когда $s_{11} = s_{22} = 0$ либо $s_{11} = 0$, $s_{22} = 1$, рассматривать как вырожденные.

Следует отметить, что формулы (25) – (30) остаются корректными и при $p_1 = p_2 = p$, когда они принимают вид

$$a_{11}(\lambda) = \lambda^{p}, a_{12}(\lambda) = 0,$$

$$a_{21}(\lambda) = 0, a_{22}(\lambda) = \lambda^{p},$$

$$f_{1}(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{n}) =$$

$$= x_{1}^{p}h_{1}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}),$$

$$f_{2}(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{n}) =$$

$$= x_{1}^{p}h_{2}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}),$$

т.е. в этом случае решение распадается на две независимые однородные функции одной и той же степени.

Равные вещественные собственные значения. Пусть собственные числа матрицы (13), (14) являются вещественными и равными друг другу. Общее решение для системы дифференциальных уравнений (13), (14) имеет вид

$$g_{1}(x, t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) = c_{11}(t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) \exp(px) + + c_{12}(t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) x \exp(px);$$

$$g_{2}(x, t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) = c_{21}(t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) \exp(px) + + c_{22}(t_{2}, t_{3}, ..., t_{n}) x \exp(px),$$

где $c_{11}, c_{12}, c_{21}, c_{22}$ – это некоторые функции от (n-1) переменных.

В таком случае функции

$$f_1(x_1, x_2, ..., x_n), f_2(x_1, x_2, ..., x_n)$$

должны иметь вид

$$f_{1}(x_{1}, x_{2}, ..., x_{n}) =$$

$$= x_{1}^{p} c_{11}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}) + (31)$$

$$+ x_{1}^{p} (\ln x_{1}) c_{12}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}),$$

$$f_{2}(x_{1}, x_{2}, ..., x_{n}) =$$

$$= x_{1}^{p} c_{21}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}) + (32)$$

$$+ x_{1}^{p} (\ln x_{1}) \cdot c_{22}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}).$$

После подстановки выражений (31) и (32) в условия (9) и (10), в силу того, что функции x_1^p и x_1^p (ln x_1) являются линейно-независимыми, получаются следующие соотношения:

$$a_{11}(\lambda) c_{11} + a_{12}(\lambda) c_{21} = \lambda^p c_{11},$$
 (33)

$$a_{11}(\lambda) c_{12} + a_{12}(\lambda) c_{22} = \lambda^{p} (\ln \lambda) c_{12},$$
 (34)

$$a_{21}(\lambda) c_{11} + a_{22}(\lambda) c_{21} = \lambda^p c_{21},$$
 (35)

$$a_{21}(\lambda) c_{12} + a_{22}(\lambda) c_{22} = \lambda^{p} (\ln \lambda) c_{22}.$$
 (36)

Из-за того, что функции λ^p и λ^p (ln λ) являются линейно-независимыми, линейные алгебраические уравнения (33), (34) для неизвестных функций $a_{11}(\lambda)$ и $a_{12}(\lambda)$, а также линейные алгебраические уравнения (35), (36) для неизвестных функций $a_{21}(\lambda)$ и $a_{22}(\lambda)$ не могут быть линейно-зависимыми (пропорциональными друг другу), за исключением вырожденного случая $c_{12} = c_{22} = 0$, который рассматривается отдельно.

Пусть

$$\Delta = c_{11} c_{22} - c_{12} c_{21} \neq 0.$$

В таком случае

$$a_{11}(\lambda) = \lambda^{p} \left(1 + (1 - \ln \lambda) \left(c_{12}c_{21}/\Delta\right)\right),$$
 (37)

$$a_{12}(\lambda) = \lambda^{p} (1 - \ln \lambda) (-c_{11}c_{12}/\Delta),$$
 (38)

$$a_{21}(\lambda) = \lambda^{p} (1 - \ln \lambda) (c_{21}c_{22}/\Delta),$$
 (39)

$$a_{22}(\lambda) = \lambda^{p} \left(1 + (1 - \ln \lambda) \left(-c_{11}c_{22}/\Delta\right)\right).$$
(40)

Поскольку функции $a_{11}(\lambda)$, $a_{12}(\lambda)$, $a_{21}(\lambda)$ и $a_{22}(\lambda)$ не должны зависеть от набора переменных $x_1, x_2, ..., x_n$, а функции

$$c_{11}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$c_{12}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$c_{21}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$c_{22}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1)$$

не должны зависеть от λ , то множители $c_{12}c_{21}/\Delta, c_{11}c_{12}/\Delta, c_{21}c_{22}/\Delta, c_{11}c_{22}/\Delta$ — это константы, не зависящие ни от указанного набора переменных, ни от λ .

Следовательно, выражения c_{21} : $c_{11} = (c_{12}c_{21}/\Delta) : (c_{11}c_{12}/\Delta)$ и $c_{12} : c_{22} = (c_{11}c_{12}/\Delta) : (c_{11}c_{22}/\Delta) =$ также константы, так что

$$c_{11}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}) =$$

$$= s_{11} h_{1}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}),$$

$$c_{21}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}) =$$

$$= s_{21} h_{1}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}),$$

$$c_{12}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}) =$$

$$= s_{12} h_{2}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}),$$

$$c_{22}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}) =$$

$$= s_{22} h_{2}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots, x_{n}/x_{1}),$$

где s_{11}, s_{12}, s_{21} и s_{22} – константы, не равные одновременно нулю; $h_1(x_2/x_1, x_3/x_1, ..., x_n/x_1)$ и $h_2(x_2/x_1, x_3/x_1, ..., x_n/x_1)$ – некоторые функции от (n - 1) переменных.

В окончательном виде решение приобретает вид

$$a_{11}(\lambda) = \lambda^{p} \left(1 + (1 - \ln \lambda) \left(s_{12} s_{22} / \Delta^{*}\right)\right), \quad (41)$$

$$a_{12}(\lambda) = \lambda^p (1 - \ln \lambda) (-s_{11}s_{12}/\Delta^*),$$
 (42)

$$a_{21}(\lambda) = \lambda^p (1 - \ln \lambda) (s_{21} s_{22} / \Delta^*),$$
 (43)

$$a_{22}(\lambda) = \lambda^{p} \left(1 + (1 - \ln \lambda) \left(-s_{11} s_{22} / \Delta^{*} \right) \right), \quad (44)$$

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) =$$

= $x_1^p s_{11} h_1(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1) + (45)$

$$+ x_1^{p} (\ln x_1) s_{12} h_2(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) =$$

$$= x_1^{p} s_{21} h_1(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1) + 46)$$

$$+ x_1^{p} (\ln x_1) s_{22} h_2(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

где $\Delta^* = s_{11}s_{22} - s_{12}s_{21} \neq 0$, величины $s_{11}, s_{12}, s_{21}, s_{22}$ являются произвольными константами, а $h_1(t_2, t_3, ..., t_n)$ и $h_2(t_2, t_3, ..., t_n)$ произвольными функциями от (n-1) переменных.

Комплексно-сопряженные собственные значения. Пусть собственные числа матрицы (13), (14) являются сопряженными комплексными числами вида $p\pm i\omega$.

Общее решение для системы дифференциальных уравнений (13), (14) имеет вид

$$g_{1}(x, t_{2}, t_{3}, \dots, t_{n}) =$$

$$= c_{11}(t_{2}, t_{3}, \dots, t_{n}) \cos(\omega x) \exp(px) +$$

$$+ c_{12}(t_{2}, t_{3}, \dots, t_{n}) \sin(\omega x) \exp(px);$$

$$g_{2}(x, t_{2}, t_{3}, \dots, t_{n}) =$$

$$= c_{21}(t_{2}, t_{3}, \dots, t_{n}) \cos(\omega x) \exp(px) +$$

$$+ c_{22}(t_{2}, t_{3}, \dots, t_{n}) \sin(\omega x) \exp(px),$$

где $c_{11}, c_{12}, c_{21}, c_{22}$ – некоторые функции от (n-1) переменных.

В таком случае функции f_1 и f_2 должны иметь следующий вид:

$$f_{1}(x_{1}, x_{2}, ..., x_{n}) =$$

$$= x_{1}^{p} c_{11}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}) \cos (\omega \ln x_{1}) + (47)$$

$$+ x_{1}^{p} c_{12}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}) \sin (\omega \ln x_{1});$$

$$f_{2}(x_{1}, x_{2}, ..., x_{n}) =$$

$$= x_{1}^{p} c_{21}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, ..., x_{n}/x_{1}) \cos (\omega \ln x_{1}) + (48)$$

+
$$x_1^p c_{22}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1) \sin(\omega \ln x_1).$$

После подстановки выражений (47) и (48) в условия (9) и (10), в силу того, что функции $x_1^{p}\cos(\omega \ln x_1)$ и $x_1^{p}\sin(\omega \ln x_1)$ являются линейно-независимыми, получаются следующие соотношения:

$$c_{11} a_{11}(\lambda) + c_{21} a_{12}(\lambda) =$$

$$= \lambda^{p} c_{11} \cos (\omega \ln \lambda) + \lambda^{p} c_{12} \sin (\omega \ln \lambda),$$
(49)

$$c_{12}a_{11}(\lambda) + c_{22}a_{12}(\lambda) =$$

$$= \lambda^{p}c_{12}\cos(\omega \ln \lambda) - \lambda^{p}c_{11}\sin(\omega \ln \lambda),$$
(50)

$$c_{11}a_{21}(\lambda) + c_{21}a_{22}(\lambda) =$$

$$= \lambda^{p}c_{21}\cos(\omega \ln \lambda) + \lambda^{p}c_{22}\sin(\omega \ln \lambda),$$

$$c_{12}a_{21}(\lambda) + c_{22}a_{22}(\lambda) =$$
(51)

$$= \lambda^{p} c_{22} \cos (\omega \ln \lambda) - \lambda^{p} c_{21} \sin (\omega \ln \lambda).$$
(52)

Линейные алгебраические уравнения (49), (50) для неизвестных функций $a_{11}(\lambda)$, $a_{12}(\lambda)$ и линейные алгебраические уравнения (51), (52) для неизвестных функций $a_{21}(\lambda)$, $a_{22}(\lambda)$ не могут быть линейно-зависимыми, за исключением вырожденного случая

$$c_{11} = c_{12} = c_{21} = c_{22} = 0,$$

не представляющего практический интерес.

Действительно, функции $\lambda^{p} \cos(\omega \ln \lambda)$ и $\lambda^{p} \sin(\omega \ln \lambda)$ являются линейно-независимыми, при этом соотношения пропорциональности

$$c_{11}:c_{12} = c_{12}: (-c_{11}),$$

 $c_{21}:c_{22} = c_{22}: (-c_{21})$

для правых частей уравнений (49) — (52) не могут быть удовлетворены при ненулевых значениях $c_{11}, c_{12}, c_{21}, c_{22}$.

Следовательно, без ограничения общности можно считать, что

$$\Delta = c_{11} c_{22} - c_{12} c_{21} \neq 0.$$

В таком случае

$$a_{11}(\lambda) = \lambda^p \cos(\omega \ln \lambda) +$$

+
$$\lambda^{p} \sin(\omega \ln \lambda) ((c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})/\Delta),$$
 (53)

$$a_{12}(\lambda) = -\lambda^{p} \sin(\omega \ln \lambda) ((c_{11}^{2} + c_{12}^{2})/\Delta),$$
 (54)

$$a_{21}(\lambda) = + \lambda^{p} \sin(\omega \ln \lambda) \left((c_{21}^{2} + c_{22}^{2}) / \Delta \right), \quad (55)$$
$$a_{22}(\lambda) = \lambda^{p} \cos(\omega \ln \lambda) - \lambda^{p} \cos(\omega \ln \lambda) + \lambda^{p} \sin(\omega \ln \lambda) + \lambda^{p} \cos(\omega \ln \lambda) + \lambda^{$$

$$-\lambda^{p}\sin(\omega \ln \lambda) ((c_{11}c_{21} + c_{12}c_{22})/\Delta).$$
 (56)

Поскольку функции $a_{11}(\lambda)$, $a_{12}(\lambda)$, $a_{21}(\lambda)$ и $a_{22}(\lambda)$ не должны зависеть от набора переменных $x_1, x_2, ..., x_n$, а функции

$$c_{11}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$c_{12}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$c_{21}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$

$$c_{22}(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1)$$

не должны зависеть от λ, то множители

$$(c_{11}c_{21}+c_{12}c_{22})/\Delta, (c_{11}^{2}+c_{12}^{2})/\Delta, (c_{21}^{2}+c_{22}^{2})/\Delta$$

 – это константы, не зависящие ни от указанного набора переменных, ни от λ.

После замены

$$c_{11}(x_2/x_1, x_3/x_1, ...) =$$

$$= h_a(x_2/x_1, x_3/x_1, ...) \cos h_b(x_2/x_1, x_3/x_1, ...),$$

$$c_{12}(x_2/x_1, x_3/x_1, ...) \sin h_b(x_2/x_1, x_3/x_1, ...),$$

$$c_{21}(x_2/x_1, x_3/x_1, ...) \sin h_b(x_2/x_1, x_3/x_1, ...),$$

$$c_{21}(x_2/x_1, x_3/x_1, ...) \sin h_d(x_2/x_1, x_3/x_1, ...),$$

$$c_{22}(x_2/x_1, x_3/x_1, ...) \cos h_d(x_2/x_1, x_3/x_1, ...)$$

получим, что константами должны быть величины

tg
$$(h_b(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots) + h_d(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots));$$

 $h_a(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots)/h_c(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots).$

Поэтому после подстановок

$$h_{a}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \ldots) = s_{a}h(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \ldots),$$

$$h_{c}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \ldots) = s_{c}h(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \ldots),$$

$$h_{b}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \ldots) = f(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \ldots) + s_{b},$$

$$h_{d}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \ldots) = -f(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \ldots) + s_{d},$$

где s_a, s_c, s_b, s_d — константы; $h(x_2/x_1, x_3/x_1, ...), f(x_2/x_1, x_3/x_1, ...)$, — вспомогательные функции, а также некоторых дополнительных эквивалентных преобразований приходим к формулам

$$c_{11}(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) =$$

+ $s_{11}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) -$
- $s_{12}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \sin f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots);$

$$\begin{aligned} c_{12}(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) &= \\ &= + s_{11}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \sin f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) + \\ &+ s_{12}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots); \\ &c_{21}(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) &= \\ &= -s_{22}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \sin f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) + \\ &+ s_{21}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots); \\ &c_{22}(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) &\cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots); \\ &c_{22}(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) &\cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) + \\ &+ s_{21}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) + \\ &+ s_{21}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) + \\ &+ s_{21}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) + \\ &+ s_{21}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) + \\ &+ s_{21}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) + \\ &+ s_{21}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) + \\ &+ s_{21}h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \sin f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots), \end{aligned}$$

где $s_{11}, s_{12}, s_{21}, s_{22}$ – константы, не зависящие ни от указанного набора переменных, ни от λ .

Такой выбор параметризации для c_{11} , c_{12} , c_{21} , c_{22} является избыточным (очевидным образом), поскольку, например, практически без ограничения общности можно установить $s_a = 1$ и $s_b = 0$, что означает, что $s_{11} = 1$ и $s_{12} = 0$).

Кроме того, удобно заменить

$$h(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots) \cos f(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots)$$

Ha
$$h_1(x_2/x_1, x_3/x_1, ...)$$
, a
 $h(x_2/x_1, x_3/x_1, ...) \operatorname{sinf}(x_2/x_1, x_3/x_1, ...)$

на $h_2(x_2/x_1, x_3/x_1, \ldots).$

В окончательном виде общее решение для функциональных уравнений (9) и (10) приобретает вид

$$a_{11}(\lambda) = \lambda^{p} \cos(\omega \ln \lambda) + \lambda^{p} \sin(\omega \ln \lambda) \times ((s_{11}s_{21} + s_{12}s_{22})/\Delta^{*}),$$
(57)

$$a_{12}(\lambda) = -\lambda^p \sin(\omega \ln \lambda) ((s_{11}^2 + s_{12}^2)/\Delta^*),$$
 (58)

$$a_{21}(\lambda) = +\lambda^{p} \sin(\omega \ln \lambda) ((s_{21}^{2} + s_{22}^{2})/\Delta^{*}),$$
 (59)

$$a_{22}(\lambda) = \lambda^{p} \cos(\omega \ln \lambda) - \lambda^{p} \sin(\omega \ln \lambda) \times \\ \times ((s_{11}s_{21} + s_{12}s_{22})/\Delta^{*}),$$
(60)

$$f_{1}(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{n}) = x_{1}^{p} (s_{11}\cos(\omega \ln x_{1}) + s_{12} x_{1}^{p} \sin(\omega \ln x_{1})) h_{1}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots) + s_{12} x_{1}^{p} (-s_{12}\cos(\omega \ln x_{1}) + (61)) + s_{11}\sin(\omega \ln x_{1})) h_{2}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots),$$

$$f_{2}(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{n}) = x_{1}^{p} (s_{21}\cos(\omega \ln x_{1}) + s_{22} x_{1}^{p} \sin(\omega \ln x_{1})) h_{1}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots) + s_{11}^{p} (-s_{22}\cos(\omega \ln x_{1}) + s_{21}^{p} (-s_{22}\cos(\omega \ln x_{1}) + s_{21}^{p} \sin(\omega \ln x_{1})) h_{2}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots),$$

$$f_{2}(x_{1}, x_{2}, \dots, x_{n}) = x_{1}^{p} (s_{21}\cos(\omega \ln x_{1}) + s_{21}^{p} \sin(\omega \ln x_{1})) h_{2}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots) + s_{21}^{p} (-s_{22}\cos(\omega \ln x_{1}) + s_{21}^{p} \sin(\omega \ln x_{1})) h_{2}(x_{2}/x_{1}, x_{3}/x_{1}, \dots),$$

где

$$\Delta^* = s_{11}s_{22} - s_{12}s_{21} \neq 0,$$

а величины s_{11} , s_{12} , s_{21} , s_{22} – произвольные константы (отчасти избыточные); $h_1(t_2, t_3, \ldots, t_n), h_2(t_2, t_3, \ldots, t_n)$ – произвольные функции от (n-1) переменных.

Дальнейшие шаги

По аналогичной схеме можно проанализировать и другие системы функциональных уравнений вида (8) с матрицами конечного размера. В результате анализа, однако, появятся сложные формулы со многими вариантными ветвлениями, вдобавок не имеющие (на взгляд авторов) большого практического смысла.

С учетом приведенного в данной статье анализа для дифференцируемых функций, все решения функциональных уравнений вида (8) будут линейными комбинациями функций вида

$$f_{k,p}(x_1, x_2, \dots, x_n) =$$

$$= x_1^{p}(\ln x_1)^k h(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$
(63)

которые соответствуют вещественным собственным значениям p кратности k, и функций вида

$$f_{k,p}^{(c)}(x_1, x_2, ..., x_n) = x_1^{(p)}(\ln x_1)^k \cos(\omega \ln x_1) \times h(x_2/x_1, x_3/x_1, ..., x_n/x_1),$$
(64)

$$f^{(s)}_{k,p}(x_1, x_2, \dots, x_n) = x_1^{p}(\ln x_1)^k \sin(\omega \ln x_1) \times h(x_2/x_1, x_3/x_1, \dots, x_n/x_1),$$
(65)

которые соответствуют комплексно-сопряженным собственным значениям вида $p \pm i\omega$ кратности k, где $h(t_2, t_3, ..., t_n)$ – некоторые функции от (n-1) переменных.

Представляется целесообразным при построении теории взаимно-однородных функций вместо анализа систем функциональных соотношений общего вида ограничиться анализом систем функциональных соотношений, соответствующих изолированным фундаментальным цепочкам функций вида (63) и (64), (65).

Анализу получаемых в результате подобного анализа систем взаимно-однородных функций с бесконечными цепочками функциональных уравнений вида (8)планируется посвятитьследующие публикации.

Вычисления, представленные в данной работе, выполнялись с помощью программы WolframMathematica [29].

Благодарности

Авторы выражают искреннюю благодарность доктору физико-математических наук Антону Леонидовичу Булянице, профессору кафедры высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, за активное участие в обсуждении проблемы.

Работа частично выполнена в рамках НИР 0074-2019-0009, входящей в состав гос. задания № 075-01073-20-00 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бердников А.С., Галль Л.Н., Галль Р.Н., Соловьев К.В. Обобщение формулы Томсона для гармонических функций общего вида // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 2. С. 32–48.

2. Бердников А.С., Галль Л.Н., Галль Р.Н.,

Соловьев К.В. Обобщение формулы Томсона для гармонических однородных функций // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 2. С. 49–62.

3. Бердников А.С., Галль Л.Н., Галль Н.Р., Соловьев К.В. Дифференциальные операторы Донкина для однородных гармонических функций // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 3. С. 45–62.

4. Бердников А.С., Галль Л.Н., Галль Н.Р., Соловьев К.В. Базисные дифференциальные операторы Донкина для однородных гармонических функций // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 3. С. 26–44.

5. Голиков Ю.К., Краснова Н.К. Теория синтеза электростатических энергоанализаторов. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2010. 409 с.

6. Голиков Ю.К., Краснова Н.К. Электрические поля, однородные по Эйлеру, для электронной спектрографии // Журнал технической физики. 2011. Т. 81. № 2. С. 9–15.

7. Голиков Ю.К., Краснова Н.К. Обобщенный принцип подобия и его применение в электронной спектрографии // Прикладная физика. 2007. № 2. С. 5–11.

8. Аверин И.А., Бердников А.С., Галль Н.Р. Принцип подобия траекторий при движении заряженных частиц с разными массами в однородных по Эйлеру электрических и магнитных полях // Письма в Журнал технической физики. 2017. Т. 43. № 3. С. 39–43.

9. Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 1. М.: Физматлит, 2001. 616 с.

10. Гельфанд И.М., Шапиро З.Я. Однородные функции и их приложения // Успехи математических наук. 1955. Т. 10. Вып. 3. С. 3–70.

11. Гельфанд И.М., Шилов Г.Е. Обобщенные функции и действия над ними. Серия «Обобщенные функции». Вып. 1. 2-е изд. М.: Физматгиз, 1959. 470 с.

12. Khursheed A., Dinnis A.R., Smart P.D. Micro-extraction fields to improve electron beam test measurements // Microelectronic Engineering. 1991. Vol. 14. No. 3–4. Pp. 197–205.

13. **Khursheed A.** Multi-channel vs. conventional retarding field spectrometers for voltage contrast // Microelectronic Engineering. 1992. Vol. 16. No. 1–4. Pp. 43–50.

14. **Khursheed A., Phang J.C., Thong J.T.L.** A portable scanning electron microscope column design based on the use of permanent magnets // Scanning. 1998. Vol. 20. No. 2. Pp. 87–91.

15. **Khursheed A.** Magnetic axial field measurements on a high resolution miniature scanning electron microscope // Review of Scientific Instruments. 2000. Vol. 71. No. 4. Pp. 1712 –1715.

16. **Khursheed A.** A low voltage time of flight electron emission microscope // Optik (Jena). 2002. Vol. 113. No. 11. Pp. 505–509.

17. **Khursheed A.** Aberration characteristics of immersion lenses for LVSEM // Ultramicroscopy. 2002. Vol. 93. No. 3–4. Pp. 331–338.

18. Khursheed A., Karuppiah N., Osterberg M., Thong J.T.L. Add-on transmission attachments for the scanning electron microscope // Review of Scientific Instruments. 2003. Vol. 74. No. 1. Pp. 134–140.

19. **Khursheed A., Osterberg M.** A spectroscopic scanning electron microscope design // Scanning. 2004. Vol. 26. No. 6. Pp. 296–306.

20. Osterberg M., Khursheed A. Simulation of magnetic sector deflector aberration properties for low-energy electron microscopy // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A. 2005. Vol. 555. No. 1–2. Pp. 20–30.

21. **Khursheed A., Osterberg M.** Developments in the design of a spectroscopic scanning electron microscope // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A. 2006. Vol. 556. No. 2. Pp. 437–444.

22. Luo T., Khursheed A. Imaging with surface sensitive backscattered electrons // Journal of Vacuum Science and Technology. B. 2007. Vol. 25. No. 6. Pp. 2017–2019.

23. Khursheed A., Hoang H.Q. A second-order focusing electrostatic toroidal electron spectrometer with 2π radian collection // Ultramicroscopy. 2008. Vol. 109. No. 1. Pp. 104–110.

24. **Khursheed A.** Scanning electron microscope optics and spectrometers. Singapore: World Scientific, 2010. 403 p.

25. Hoang H.Q., Khursheed A. A radial mirror analyzer for scanning electron/ion microscopes // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A. 2011. Vol. 635. No. 1. Pp. 64–68.

26. Hoang H.Q., Osterberg M., Khursheed A. A high signal-to-noise ratio toroidal electron spectrometer for the SEM // Ultramicroscopy. 2011. Vol. 111. No. 8. Pp. 1093–1100.

27. **Khursheed A., Hoang H.Q., Srinivasan A.** A wide-range parallel radial mirror analyzer for scanning electron/ion microscopes // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2012. Vol. 184. No. 11–12. Pp. 525–532.

28. Shao X., Srinivasan A., Ang W.K., Khursheed A. A high-brightness large-diameter graphene coated point cathode field emission electron source // Nature Communications. 2018. Vol. 9. No. 1. P. 1288.

29. Wolfram Mathematica // URL: http:// wolfram.com/mathematica/ Статья поступила в редакцию 21.01.2020, принята к публикации 02.03.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕРДНИКОВ Александр Сергеевич — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института аналитического приборостроения Российской академии наук, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

СОЛОВЬЕВ Константин Вячеславович — кандидат физико-математических наук, доцент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, младший научный сотрудник Института аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

КРАСНОВА Надежда Константиновна — доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 n.k.krasnova@mail.ru

REFERENCES

1. Berdnikov A.S., Gall L.N., Gall N.R., Solovyev K.V., Generalization of the Thomson formula for harmonic functions of a general type, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (2) (2019) 32–48.

2. Berdnikov A.S., Gall L.N., Gall N.R., Solovyev K.V., Generalization of the Thomson formula for homogeneous harmonic functions, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (2) (2019) 49–62.

3. Berdnikov A.S., Gall L.N., Gall N.R., Solovyev K.V., Donkin's differential operators for homogeneous harmonic functions, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (3) (2019) 45–62.

4. Berdnikov A.S., Gall L.N., Gall N.R., Solovyev K.V., Basic Donkin's differential operators for homogeneous harmonic functions, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 12 (3) (2019) 26–44.

5. Golikov Yu.K., Krasnova N.K., Teoriya synteza elektrostaticheskikh energoanalizatorov [Theory of designing of electrostatic energy analyzers], Saint-Petersburg Polytechnic University Publishing, Saint-Petersburg, 2010.

6. **Golikov Yu.K., Krasnova N.K.,** Application of electric fields uniform in the Euler sense in electron spectrography, Technical Physics. 56 (2) (2011) 164–170.

7. **Golikov Yu.K., Krasnova N.K.,** Generalized similarity principle of similarity in electron spectrography, Prikladnaya Fizika (Applied Physics). (2) (2007) 5–11.

8. Averin I.A., Berdnikov A.S., Gall N.R., The principle of similarity of trajectories for the motion of charged particles with different masses in electric and magnetic fields that are homogeneous in Euler terms, Technical Physics Letters. 43 (2) (2017) 156–158.

9. **Fikhtengol'ts G.M.**, The fundamentals of mathematical analysis, Vol.1, Oxford, New York, Pergamon Press, 1965.

10. **Gel'fand I.M., Shapiro Z.Ya.,** Generalized functions and their applications, Uspekhi Mat. Nauk.10 (3) (1955) 3–70.

11. **Gel'fand I.M., Shilov G.E.,** Generalized Functions, Vol. 1: Properties and Operations, AMS Chelsea Publishing, 1964.

12. **Khursheed A., Dinnis A.R., Smart P.D.,** Micro-extraction fields to improve electron beam test measurements, Microelectronic Engineering. 14 (3–4) (1991) 197–205.

13. **Khursheed A.**, Multi-channel vs. conventional retarding field spectrometers for voltage contrast, Microelectronic Engineering. 16 (1-4) (1992) 43–50.

14. **Khursheed A., Phang J.C., Thong J.T.L.,** A portable scanning electron microscope column design based on the use of permanent magnets, Scanning. 20 (2) (1998) 87–91.

15. **Khursheed A.,** Magnetic axial field measurements on a high resolution miniature scanning electron microscope, Review of Scientific Instruments. 71 (4) (2000) 1712–1715.

16. **Khursheed A.**, A low voltage time of flight electron emission microscope, Optik (Jena). 113 (11) (2002) 505–509.

17. **Khursheed A.,** Aberration characteristics of immersion lenses for LVSEM, Ultramicroscopy. 93 (3-4) (2002) 331–338.

18. **Khursheed A., Karuppiah N., Osterberg M., Thong J.T.L.,** Add-on transmission attachments for the scanning electron microscope, Review of Scientific Instruments. 74(1) (2003) 134–140.

19. **Khursheed A., Osterberg M.,** A spectroscopic scanning electron microscope design, Scanning. 26 (6) (2004) 296–306.

20. Osterberg M., Khursheed A., Simulation of magnetic sector deflector aberration properties for low-energy electron microscopy, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A. 555 (1–2) (2005) 20-30.

21. **Khursheed A., Osterberg M.,** Developments in the design of a spectroscopic scanning electron microscope, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A. 556 (2) (2006) 437–444.

22. Luo T., Khursheed A., Imaging with surface sensitive backscattered electrons, Journal of Vacuum Science and Technology B. 25 (6) (2007) 2017–2019.

Received 21.01.2020, accepted 02.03.2020.

23. **Khursheed A., Hoang H.Q.,** A secondorder focusing electrostatic toroidal electron spectrometer with 2π radian collection, Ultramicroscopy. 109 (1) (2008) 104–110.

24. **Khursheed A.,** Scanning electron microscope optics and spectrometers, World Scientific, Singapore, 2010.

25. Hoang H.Q., Khursheed A., A radial mirror analyzer for scanning electron/ion microscopes, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A. 635 (1) (2011) 64–68.

26. Hoang H.Q., Osterberg M., Khursheed A., A high signal-to-noise ratio toroidal electron spectrometer for the SEM, Ultramicroscopy. 11 (8) (2011) 1093–1100.

27. **Khursheed A., Hoang H.Q., Srinivasan A.,** A wide-range parallel Radial Mirror analyzer for scanning electron/ion microscopes, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 184 (11–12) (2012) 525–532.

28. Shao X., Srinivasan A., Ang W.K., Khursheed A., A high-brightness large-diameter graphene coated point cathode field emission electron source, Nature Communications. 9 (1) (2018) 1288.

29. Wolfram Mathematica, URL : http:// wolfram.com/mathematica/N.K.,Teoriyasyntezae lektrostaticheskikhenergoanalizatorov [Theory of designing of electrostatic energy analyzers], Saint-Petersburg Polytechnic University Publishing, Saint-Petersburg , 2010.

THE AUTHORS

BERDNIKOV Alexander S.

Institute for Analytical Instrumentation of the Russian Academy of Sciences 26RizhskyAve., St. Petersburg, 190103, Russian Federation asberd@yandex.ru

SOLOVYEV Konstantin V.

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

KRASNOVA Nadezhda K.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation n.k.krasnova@mail.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2020

Приборы и техника физического эксперимента

DOI: 10.18721/JPM.13105 UDC 621.391:681.142

A TRIANGULATION SENSOR FOR MEASURING THE DISPLACEMENTS AND HIGH-PRECISION MONITORING OF THE PRODUCTION PERFORMANCE

V.A. Stepanov, E.N. Moos, M.V. Shadrin, V.N. Savin, A.V. Umnyashkin, N.V. Umnyashkin

Ryazan State University named for S. Yesenin, Ryazan, Russian Federation

Using the method of laser triangulation as the base, a mobile high-precision sensor has been created for measuring displacements and monitoring of the geometric parameters of workpieces in production. Both the process of signal processing and the operation of the triangulation sensor were accelerated many times owing to the architecture of processes, which was based on a reduced set of commands using simple and effective instructions of the stm32f407vet6 microcontroller. The measurement procedure was carried out by searching for a laser spot, calculating the center of the spot using the center of mass method, converting the centroid into the metric and applying calibration tables. Sensor scan speed amounted to $(3 - 5) \cdot 10^3$ s⁻¹.

Keywords: triangulation sensor, microprocessor, laser diode, spot center, interface, control module

Citation: Stepanov V.A., Moos E.N., Shadrin M.V., Savin V.N., Umnyashkin A.V., Umnyashkin N.V., A triangulation sensor for measuring the displacements and high-precision monitoring of the production performance, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 54–65. DOI: 10.18721/JPM.13105

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

ТРИАНГУЛЯЦИОННЫЙ ДАТЧИК ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ПЕРЕМЕЩЕНИЙ И ВЫСОКОТОЧНОГО КОНТРОЛЯ ПАРАМЕТРОВ ИЗДЕЛИЯ НА ПРОИЗВОДСТВЕ

В.А. Степанов, Е.Н. Моос, М.В. Шадрин, В.Н. Савин, А.В. Умняшкин, Н.В. Умняшкин

Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина,

г. Рязань, Российская Федерация

На основе метода лазерной триангуляции создан мобильный высокоточный датчик для измерения перемещений и контроля геометрических параметров изделий на производстве. Архитектура процессов, построенная на сокращенном наборе команд, использующих простые и эффективные инструкции микроконтроллера stm32f407vet6, обеспечивает многократное ускорение не только процесса обработки сигнала, но и работы триангуляционного датчика. Процедура измерения осуществляется путем поиска лазерного пятна, расчета расположения центра пятна методом центра масс, перевода центроиды в метрику и применения калибровочных таблиц. Достигнутая скорость сканирования датчика составляет (3 – 5)·10³ измерений в секунду.

Ключевые слова: триангуляционный датчик, микропроцессор, лазерный диод, центр пятна, интерфейс, модуль управления

Ссылка при цитировании: Степанов В.А., Моос Е.Н., Шадрин М.В., Савин В.Н., Умняшкин А.В., Умняшкин А.В., Умняшкин Н.В. Триангуляционный датчик для измерения перемещений и высокоточного контроля параметров изделия на производстве // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 54–65. DOI: 10.18721/JPM.13105

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

Introduction

The significance of this study stems from the need for high-precision monitoring of the movements of working bodies in machining centers in production and development of workpieces in such industries as engineering, aerospace industry, military production, as well as in other branches where precise control of geometric parameters or positions of the objects is required.

The triangulation method for measuring the displacements, geometric dimensions and roughness of workpieces with complex surfaces [1 - 6] was used to develop a sensor for measuring displacements and monitoring the geometric parameters of workpieces in dynamics, for example, on a conveyor, without slowing down production. The sensor must provide high accuracy for operation (control) in various industries and a high scanning speed; be compact and have a degree of protection appropriate to the needs of enterprises. The software can process signals from the measuring channel of the sensor transferring the main aspect in the development of applications from hardware to software.

The principle of triangulation distance measurement

The triangulation method of control is based on calculating the required distance in terms of the ratios in the triangle using known system parameters. This allows to measure both the relative change in the distance from the sensor to the controlled object and its absolute value.

The triangulation scheme (Fig. 1) can conditionally be divided into three parts: a radiating (or lighting) channel, a controlled surface, and a receiving channel.

The first part of the meter is a channel consisting of a radiation source and an objective lens, where a probe beam is formed on a controlled surface. A laser diode with a Gaussian distribution is typically used as such a source. The objective lens consists of one or more optical lenses. Its relative position and the position of the laser diode determine the setting of the emitting channel. To set up the laser module (for getting the maximum intensity value), it is necessary to set the constriction to the center of the measuring range and to center the probe beam. The result of good adjustment is a centered beam, whose width and intensity vary symmetrically relative to the center of the measurement range.

The second integral part of the triangulation meter is the controlled surface. Any surface reflects or scatters incident radiation. Scattering of radiation by the surface of a controlled object is used in triangulation as the basis for obtaining information about the distance to this surface.

The triangulation sensor is intended for measuring the distance from the selected point on the probe beam axis to the physical point on the surface with high accuracy. Any controlled surface is characterized by roughness, corresponding to the degree to which the surface is smooth or uneven. The required measurement accuracy is usually inversely proportional to the roughness of the surface monitored. In particular, the surface roughness of microelectronic crystals and



Fig. 1. Schematic diagram of a triangulation meter:

the radiating and receiving channels *I* and *3*, respectively; the controlled surface (2); the displacements of the controlled surface (Δz) and a laser spot (Δx); the distances from the controlled surface to the projection lens (*r*) and from the lens to the photo detector (*r*') therefore the measured distance to them have a scale of several micrometers. For example, the accuracy required in the surveying industry is of the order of hundreds of meters.

Industrial dimensional control consists in determining the parameters of metal surfaces, the required control accuracy ranging from a few micrometers (in the nuclear industry) to hundreds of micrometers (in the railway industry).

Each surface also has the property of reflecting or scattering incident radiation. Radiation scattering by the surface of a controlled object is used in triangulation as a physical basis for obtaining information about the distance to this surface. Therefore, the controlled surface is an integral part of the triangulation measuring system.

The third part of the triangulation meter is the receiving channel, consisting of a projection lens and a photodetector. The projection lens generates an image of the probe spot in the plane of the photodetector. The larger the lens diameter D, the higher its aperture. In other words, the larger the lens diameter D, the more intense the spot image, and the higher its quality. Depending on the specific implementation, either a photodiode array or a position-sensitive receiver is used for capturing the generated image.

The triangulation meter shown in Fig. 2 operates as follows. Emitting channel 1 forms an image of the light spot on controlled surface 2 (6-6). Next, the light scattered by the controlled surface enters receiving channel 3. Thus, an image of the illuminated portion of the controlled surface (light spot) is generated in the



Fig. 2. Principle of operation of the triangulation meter:

the laser (1); the lenses of the radiating (2) and the receiving (3) channels; the dividing plate (4); the supply system (5); the images of a light spot on the controlled surface (6-6)

plane of the photodetector. If the controlled surface is displaced by Δz (see Fig. 1), the light spot in the plane of the photodetector shifts by Δx . Dependence of the displacement Δz of the controlled surface on the displacement Δx of the light spot in the plane of the photodetector has the following form:

 $\Delta z = r \cdot \sin \varphi / \sin (\alpha - \varphi)$

where

$$\varphi = \operatorname{arctg} \left(A \cdot \Delta x / (1 + B \cdot \Delta x) \right),$$
$$A = \sin \beta / r', B = -\cos \beta / r',$$

r and r' are the distance from controlled surface 2 to the projecting lens of receiving channel 3, and that from the lens to the photodetector, despite the fact that the controlled surface is in the center of the range of displacement measurements, respectively.

Software architecture of microcontrollers with ARM core

The ARM core is based on RISC (Reduced Instruction Set Computing) architecture, a processor architecture built on the basis of a reduced set of instructions), using simple and efficient processor instructions that can be executed in a single cycle. The basic concepts of RISC involve shifting the main emphasis in developing applications from hardware to software, since it is much easier to increase application performance by software methods rather than using complex hardware solutions. As a result, programming of RISC processors imposes more stringent requirements for compiler performance compared to CISC architecture (Complete Instruction Set Computing, processor architecture with a wide range of different machine instructions of variable length and different execution times). Microprocessors with CISC architecture (for example, Intel x86) are not so demanding on development software: here the main emphasis is on hardware performance. Fig. 3 shows these differences.

Considering RISC architecture in more detail, we can see that it is based on the following basic principles.

The system of instructions (commands) of the processor. A standard RISC processor has a limited set of instruction types, with each of these instructions executing in a single processor cycle. Individual software algorithms, for example, division, are compiled entirely via software development tools (compilers) or by actual developers. Each processor instruction



Fig. 3. Architecture of RISC and CISC processes

has a fixed length, which allows to successfully use the pipeline principle to select the next instruction while the previous one is decoded. In contrast, CISC processors have different lengths and can be executed in several machine cycles. Comparing two code snippets for CISC and RISC processors, we can see that the RISC processor needs more instructions. On the other hand, a large number of registers in ARM processors allows computing operations with several variables to be performed very efficiently, since intermediate results of calculations can be placed in registers. In addition, ARM processors can use multiple access instructions for multiple memory locations, which improves the performance of data read/write operations. Additional opportunities for increasing the performance of ARM microprocessors are achieved by using conditional execution instructions, when the next instruction is executed only if the previous instruction set certain flags in the program status register.

Instruction pipeline. Each processor instruction is processed in several stages, which are performed simultaneously. Ideally, in order to achieve maximum performance, the instruction pipeline should move one step in each machine cycle, and decoding of the instruction can be carried out in one step of the pipeline. This approach is different from that adopted for CISC architectures where special microprograms have to be executed to decode instructions.

Using processor registers. RISC processors have many common registers. Each of the registers may contain data or a data address in memory; therefore, registers are local data storages during all operations in the processor. For comparison: CISC processors have a limited set of registers, each with a separate functional purpose, which is why many CISC instructions use a memory cell as one of the operands. For example, the ADD instruction where one of the operands was a memory cell was used for adding two numbers for CISC Intel × 86 processors. Such an instruction requires a lot of machine cycles, reducing the performance of the application, especially if such instructions are used in cyclic calculations. Despite significant differences in architectures, the RISC and CISC architectures are gradually becoming similar. For example, CISC microprocessors are implemented according to RISC principles at the microprogram level. That increases the speed of microinstructions.

The microcontroller stm32f407VET6 and the electrical circuit of the receiving channel

Microcontroller stm32f407VET6. General characteristics of the microcontroller used for operations with the ARM7 core are presented below.

ARM 32-bit Cortex-M4 CPU;

Clock frequency 168 MHz, 210 DMIPS / 1.25 DMIPS / MHz (Dhrystone 2.1);

Support for DSP instructions;

New high-performance AHB-matrix tires;

Up to 1 MB of Flash memory;

Up to 192 + 4 kB SRAM-memory;

Supply voltage of 1.8 - 3.6 V (POR, PDR, PVD and BOR);

Internal RC-generators at 16 MHz and 32 kHz (for RTC);

External clock source of 4–26 MHz and of 32.768 kHz for RTC;

SWD/JTAG debugging modules, ETM module;

Three 12-bit ADCs on 24 input channels (speed up to 7.2 megasamples, temperature sensor);

Two 12-bit DAC;

DMA controller for 16 streams with support for packet transmission;

17 timers (16 and 32 categories);

Two watchdog timers (WDG and IWDG); Communication interfaces: I2C, USART

(ISO 7816, LIN, IrDA), SPI, I2S;

CAN (2.0 B Active);

USB 2.0 FS/HS OTG;

10/100 Ethernet MAC (IEEE 1588v2, MII / RMII);

SDIO controller (SD, SDIO, MMC, CE-ATA cards);

Digital camera interface (8/10/12/14-bit modes);

FSMC-controller (Compact Flash, SRAM, PSRAM, NOR, NAND and LCD 8080/6800);

hardware random number generator; Hardware CRC calculation, 96-bit unique ID:

AES 128, 192, 256, Triple DES, HASH (MD5, SHA-1), HMAC encryption module;

Extended temperature range of 40 - 105 °C.

This controller is selected based on the following parameters:

(i) High performance. High performance is necessary for fast operation of the algorithm for calculating the position of an object.

(ii) High frequency of the core and periphery. The operating frequency of the microcontroller is 168 MHz, which makes it possible to interrogate a linear image sensor with a high frequency, and also allows peripheral data transmission modules to operate at high speeds. The core and peripheral frequencies can be flexibly tuned in this family of controllers, which affects the power consumption of the controller.

(iii) Large number of peripherals. We are primarily concerned with the periphery for data transmission in this study. At the same time, the controller has a large set of different data transfer interfaces, which makes the sensor universal.

Ethernet. The unit is made strictly according to the IEEE802.3 standard. It is possible to transfer data at a speed of 10/100 Mbit/s. Clock synchronization is available: the IEEE1588 v2 protocol is implemented in hardware for this purpose. A fiber optic or copper line requires a third-party transceiver. The PHY transceiver

connects directly to the MII or RMII port.

USB (Universal Serial Bus). The system has two separate USB blocks. The first one is USB OTG full-speed, which is fully hardware-implemented and compatible with USB 2.0 standards, as well as OTG 1.0. The USB operates at speeds up to 12 Mbit/s. It is supported in Host/Device/OTG mode. Session Request Protocol (SRP) and Host Negotiation Protocol (HNP) are included.

The second block, USB OTG high-speed, operates in Host/Device/OTG mode with a high speed of 480 Mbps; a transceiver unit operating at high speed through a special ULPI interface is required for this purpose.

USART (Universal Synchronous Asynchronous Receiver Transmitter). Four USART units and two UART (Universal Asynchronous Receiver Transmitter) are integrated in the microcontroller. USART1 and USART6 units allow high-speed data exchange at speeds up to 10.5 Mbit/s. Others support a speed of no more than 5.25 Mbit/s. Thanks to USART, standards such as RS323 and RS485 can be used in the sensor.

Linear Image Sensor ELIS-1024. The ELIS-1024 linear image sensor from Dynamax imaging is used as a photosensitive sensor in the system. This sensor is selected due to its high speed, sufficient resolution with simple controls and low cost.

Its main features are low cost; programmable resolutions of 1024, 512, 256, 128 pixels; high sensitivity; low noise level; clock frequency from 1 kHz to 30 MHz; low dark current; fully customizable clock frequency and frame rate; electrical characteristics: supply voltage of 2.80 - 5.50 V; current consumption of 25 mA; supply voltage of the digital part of 5 V; minimum voltage of the upper logic level of 0.6 V; maximum clock frequency of 30 MHz; saturation output voltage of 4.8 V; output dark voltage of 2.1 V.

This sensor has a resolution control function. The resolution of the sensor can be at 1024, 512, 256, 128 pixels. This is convenient when a high measurement speed is needed.

Eight digital signal lines were created from the microcontroller to operate the sensor:

M1 and M2, controlling the resolution of the sensor and the frame rate and controlled by the table;

Pin PCO-PC5 for operating the image sensor ELIS-1024;

RST (Reset) resets the pixel values and translates the origin of the pixels to the zero pixel;

SHT (Shutter) is a shutter used to control the exposure of the image sensor;

DATA triggers the image sensor to issue pixels;

RM-pin controls the operation mode of the image sensor, it is directly connected to the total equipment.

Pin CLK are clocking the image sensor; all processes, including laser modulation, occur in the sensor by the clock cycles of this pin; analog signal is used to synchronize with the AD9203 ADC and the microcontroller.

Analog-to-digital converter ADC (AD9203). Data transfer interface (RS485) and receive channel circuit. ADC is an important part of the sensor, the accuracy of measurement directly depends on its conversion accuracy [7, 8]; moreover, it must be fast enough to be able to convert all the signals. We have selected the AD9203 of ADC architecture from Analog Devices. This ADC has a sampling rate of 40 megabytes per second and an accuracy of 10 bits. The ADC transmits data through a parallel interface, which provides greater speed and ease of communication with the microcontroller.

The sensor has several data transfer interfaces for communication with other devices. One of them is UART with the RS485 standard of logical levels. RS485 is a half-duplex multipoint serial data interface. Data transfer is carried out via one pair of conductors using differential signals. The voltage difference between the conductors of one polarity means a logical unit; the difference of the other polarity is zero. RS485 is implemented using the MAX485 chip.

A block diagram for the connection (Fig. 4) and a printed circuit board (Fig. 5) were developed to combine all MCs and other elements of the receiving channel, including the ADC (AD9203) and the data transfer interface (RS485).

Figs. 4 and 5 show the functional and electrical connections between the main blocks and nodes of the electrical circuit of the receiving channel of the triangulation displacement sensor. Evidently, all the electrical connections between the units, including the laser control modules and the ELIS-1024 linear image sensor, are subordinated to the stm32f407VET6 microcontroller.

The electrical circuit was developed in P-CAD (software for Computer Aided Design of electronics by Personal CAD Systems Inc) intended for design of multilayer printed circuit boards, computing and electronic devices. P-CAD includes two main modules: P-CAD Schematic (graphic editor of circuit diagrams) and P-CAD PCB (graphic editor of printed circuit boards), as well as a number of auxiliary programs.

Software STM32Cube TX program.

The STM32Cube TX program is used to configure and further operate the MCs (microcontrollers) and initialize the code of different elements in the circuit board circuit of the receiving channel of the triangulation displacement meter. The program allows to select the necessary MC, specify the clock sources of different buses, initialize the pins, including timers, configure the interrupt. All this is done in graphical mode. The STM32Cube TX program does not allow for errors for operations with hardware. The programmer needs to concentrate directly on solving applied problems: measuring displacements.

The stm32f407vet6 microcontroller is used in the sensor, so ARM Cortex M4 is selected in the Core tab, stm32f4 is in the Series one, stm32f407/417 is in the Line one, LQFP100 is in the Package one. The clock system is configured in the Clock-Configuration tab. The clock of the microcontroller is fully configurable in the STM32Cube TX program. The source of clock signals in this study is an external quartz (8 MHz) generator. At the same time, the system clock frequency (SYSLK) is set to 168 MHz, which is the maximum for our microcontroller.

Asynchronous operation mode is selected to connect the USART serial interface (Universal Asynchronous Receiver-Transmitter) in the USART1 tab; data transfer at a speed of 11500 Bit/s and a data library are connected via USB Full Speed; the integrity of bit parity data is automatically controlled and the parity control is different. When the sum of the number of unit bits in a packet is an even number, and when this sum is odd, USB interruptions are cleared automatically.

Operation of the linear image sensor ELIS-1024. The ELIS-1024 linear image sensor operates in frame-by-frame synchronization mode, when new exposure is set for each new frame.

Data is written to an 8-bit data array with a dimension of 1024 mass-elements [9].

One important point should be noted. The microcontroller operates on 3.3 V, respectively, and the logical unit (high level) will be 3.3 V, and the ELIS-1024 image sensor needs 5 V logic levels for normal, fast operation. Therefore,



Fig. 4. The electrical block diagram of the receiving channel:

1 is the supply system; *2* is the analog-to-digital converter; *3* is the microcontroller stm32f407vet6; *4* is the interface logic levels RS485 (the main elements of one); *5* is the operational amplifier; *6* is the linear image sensor; *7* is the laser control module; *8* is the data transfer interface



Fig. 5. Appearance of the receiving channel (the face (*a*) and the back (*b*) of the finished printed circuit board with elements); *1* to *4* positions correspond to Fig. 4

a new level converter should be used. The 74VHCT04AMTCX chip from Fairchild Semiconductor was chosen. In fact, this is not just a converter but also an inverter of levels (6 inverters). This microcircuit was used in the study because it can operate with the required frequencies and voltages. Since the applied microcircuit is an inverter, this is taken into account in the image sensor control function: all signals are inverted. While unity was first supplied earlier for the DATA signal, followed by zero, first zero and then unity is supplied after inversion from the microcontroller.

Processing data from a linear image sensor and calculating distance. After a data array is obtained, it should be processed. According to the triangulation method for finding distance, the beam reflected from the surface of the object passes through the optical system to a linear image sensor. The position of the laser point on the image sensor depends on the distance from the object to the sensor, which is how distance to the object is determined. Therefore, the distance to the object can be calculated after obtaining data from the image sensor. A graph constructed of data from the linear image sensor clearly shows the laser spot, provided that there is an object in the range visible by the sensor (Fig. 6). The spot has the form of a normal (Gaussian) distribution.

Distribution of the spot can be analyzed to find its exact position on the matrix, which is then translated into the distance to the object. There are several ways to do this.

We used the method for finding the center of mass for a system of material points to calculate the center of the spot in this study. This method allows to calculate the center of the spot with great accuracy that is higher than the resolution of the matrix pixels. The formula for the calculation is as follows:

$$x_{C} = \frac{\sum m_{i} \cdot x_{i}}{\sum m_{i}}$$

where x_c is the center of the laser spot on the linear image sensor, m_i is the value of the *i*-th pixel of the spot, x_i is the coordinate of the *i*-th pixel of the spot.

The center value is calculated only for a region of the spot on the data array with a linear image matrix. The numerator in the function calculating the centroid (the center of the laser spot) is multiplied by 10 because the microcontroller takes longer to perform calculations with fractional numbers.

Application of such a solution allows to perform calculations with larger numbers, it does not matter for the microcontroller how big the number is, allowing to maintain the accuracy of the calculations as a result.

The next steps are to convert the centroid into the metric and convert the position of the



Fig. 6. Laser spot graph (plots of the light intensity versus the *x* coordinate)

laser spot in pixels on the linear matrix into the distance in mm to the sensor. The dependence of the laser spot position (pixels) on the spot - object distance (mm) (it was found from the

general optical scheme (see Fig. 7). Calibration tables are introduced to convert distances from subpixels to millimeters.

The accuracy of conversion in millimeters depends on the number of elements in the calibration table. The number of table elements in this study was 32.

The bisection method (half division method) was used to search for the range. The half division method allows to exclude half the interval after the each iteration. It is assumed within this method that the function is continuous and has a different sign at the ends of the interval. After the value of the function is calculated in the middle of the interval, one part of the interval is discarded so that the function has a different sign at the ends of the remaining part. Iterations of the bisection method stop if the interval becomes sufficiently small. Since there are 32 values in the calibration table, the method allows to find the interval in just 5 iterations, regardless of the centroid value.

The code of this function consists of about 250 lines, so only part of the code is given. Despite the large code size, the program runs very quickly.

The optical scheme of the displacement sensor

The optical scheme [10] is shown in Fig. 8.

According to Fig. 8, the distance D from the laser (L) to the subject of inquiry (SI) can be found as follows:

$$D = \frac{h}{\tan\theta},$$

where *h* is the distance between the image sensor (LIS) and the laser (L), θ is the angle between the laser beam and the laser point.

The angle between the laser beam and the returned laser point can be calculated from this formula:

$$\theta = pfc \cdot rpc + ro,$$

where *pfc* is the number of pixels from the center of the focal plane, *rpc* is the radian per pixel pitch, *ro* is the radius offset.

A high reading speed allows to track the position of moving objects, and the resulting accuracy can reach an error of one thousandth of the distance.

An interference filter of 650 nm is installed in front of the lens, which does not transmit



Fig. 7. Plots of the spot position versus the distance from the laser to the measured object (calibration chart)



Fig. 8. Optical design of the displacement sensor: SI – subject of inquiry, L– laser, LF – light filter, LIS – linear image sensor. Geometric parameters are shown

light of unnecessary wavelengths, to reduce the influence of external factors and increase accuracy.

Conclusion

The result of the study is a compact triangulation displacement measurement sensor that we have created.

The accuracy of the sensor is $15 - 20 \ \mu m$, this accuracy is achieved only through cor-

rect selection of optics, high-quality filter, accurate calibration on precision equipment, such as CNC machines with digital linear encoders.

The scanning speed is from 3 to 5 thousand measurements per second, which meets most of the needs in the industry. Scanning can be carried out directly on the conveyor without slowing down production.

REFERENCES

1. **Demkin V.N., Stepanov V.A.,** Laser methods and means of monitoring the geometric dimensions of products, Measuring Equipment. 69 (2) (2008) 32–35.

2. **Demkin V.N., Stepanov V.A.,** Possibilities of a triangulation laser method for measuring the surface of a complex relief, Metrology. (8) (2007) 32–35.

3. **DemkinV.N., StepanovV.A.,** Measurement of the roughness profile of materials by the triangulation method, Metrology. (6) (2008) 60–65.

4. **Hausler G.**, Three-dimensional sensors – potentials and limitations, Handbook of computer vision and application, Vol. 1, Academic Press, San Diego, (1999) 485–506.

5. Crags G., Meuret Y., Danckaert J., Verschaffelt G., Characterization of a lowspeckle laser line generator, Applied Optics. 51 (20) (2012) 4818-4826.

6. Tusting R.F., Davis D.L., Laser systems and structured illumination for quantitative

Received 16.01.2020, accepted 27.01.2020.

THE AUTHORS

STEPANOV Vladimir A.

Ryazan State University named for S. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation vl.stepanov@365.rsu.edu.ru

MOOS Evgueniy N.

Ryazan State University named for S. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation e.moos@rsu.edu.ru

SHADRIN Maksim V.

Ryazan State University named for S. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation addressworken m.shadrin@russia.ru

SAVIN Vladislav N.

Ryazan State University named for S. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation savin-vladislav@mail.ru

UMNYASHKIN Andrew V.

Ryazan State University named for S. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation a.umniashkin@kvantron.com

undersea imaging, Marine Technology Society Journal. 26 (4) (1992) 5-12.

7. Voisin S., Foufou S., Truchetet F., et al., Study of ambient light influence for threedimensional scanners based on structured light, Optical Engineering. 46 (3) (2007) 030502.

8. Voegtle T., Schwab I., Landes T., Influences of different materials on the measurements of a terrestrial laserscanner (TLS), Int. Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Science. 37, Part B5 (2008) 1061–1066.

9. Skvortsov A.V., Mirza N.S., Algoritmy postroyeniya i analiza triangulatsiy [Algorithms for constructing and analyzing triangulation], Tomsk State University, Tomsk, 2006.

10. Demkin V.N., Demkin A.V., Shadrin M.V., Device for laser scanning, Patent of Russian Federation, IPC G 01 B 11/24, 2012110279/28; declared 03/16/2012; publ. 11/20/2012. Bull. No. 32, 2012.

UMNYASHKIN Nicholas V. *Ryazan State University named for S. Yesenin* 46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation n.umniashkin@kvantron.com

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Demkin V.N., Stepanov V.A.** Laser methods and means of monitoring the geometric dimensions of products // Measuring Equipment. 2008. Vol. 69. No. 2. Pp. 32–35.

2. Демкин В.Н., Степанов В.А. Возможности триангуляционного лазерного метода измерения поверхности сложного рельефа // Метрология. 2007. № 8. С. 32–36.

3. Демкин В.Н., Степанов В.А. Измерение профиля шероховатости поверхности триангуляционным способом // Метрология. 2008. № 6. С. 60-65.

4. **Hausler G.** Three-dimensional sensors – potentials and limitations. Handbook of computer vision and application. Vol. 1. San Diego: Academic Press, 1999. Pp. 485–506.

5. Crags G., Meuret Y., Danckaert J., Verschaffelt G. Characterization of a low-speckle laser line generator // Applied Optics. 2012. Vol. 51. No. 20. Pp. 4818–4826.

6. Tusting R.F., Davis D.L. Laser systems and structured illumination for quantitative undersea

imaging // Marine Technology Society Journal. 1992. Vol. 26. No. 4. Pp. 5–12.

7. Voisin S., Foufou S., Truchetet F., Page D., Abidi M. Study of ambient light influence for three-dimensional scanners based on structured light // Optical Engineering. 2007. Vol. 46. No. 3. P. 030502.

8. Voegtle T., Schwab I., Landes T. Influences of different materials on the measurements of a terrestrial laser scanner (TLS) // Int. Archives of the Photogrammetry. Remote Sensing and Spatial Information Science. 2008. Vol. 37. Part B5. Pp. 1061–1066.

9. Скворцов А.В., Мирза Н.С. Алгоритмы построения и анализа триангуляции. Томск: Изд-во Томского университета, 2006. 160 с.

10. Демкин В.Н., Демкин А.В., Шадрин М.В. Устройство для лазерного сканирования. Патент Российской Федерации. МПК G 01 В 11/24. 2012110279/28; заявлено 03/16/2012; опубликовано 11/20/2012. Бюлл. № 32. 2012.

Статья поступила в редакцию 16.01.2020, принята к публикации 27.01.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СТЕПАНОВ Владимир Анатольевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46

vl.stepanov@365.rsu.edu.ru

МООС Евгений Николаевич — доктор технических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46 e.moos@365.rsu.edu.ru

ШАДРИН Максим Владимирович — аспирант кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46 m.shadrin@russia.ru

САВИН Владислав Николаевич — инженер кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46 savin-vladislav@mail.ru

УМНЯШКИН Андрей Владимирович — аспирант кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46 a.umniashkin@kvantron.com

УМНЯШКИН Николай Владимирович — аспирант кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, г. Рязань, Российская Федерация.

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46 n.umniashkin@kvantron.com

DOI: 10.18721/JPM.13106 УДК 532.526.4, 533.6.08

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ В ЗОНЕ ВЛИЯНИЯ ЦИЛИНДРА, ПОГРУЖЕННОГО В СВОБОДНОКОНВЕКТИВНЫЙ ПОГРАНИЧНЫЙ СЛОЙ НА ВЕРТИКАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Ю.С. Чумаков, А.М. Левченя, Е.Ф. Храпунов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Российская Федерация

Представлены новые экспериментальные данные, количественно характеризующие поля осредненной по времени скорости, осредненной температуры, интенсивности пульсаций скорости и температуры, а также корреляции пульсаций скорости и температуры в окрестности круглого цилиндра, установленного на вертикальной нагретой поверхности, на высоте, соответствующей развитому турбулентному режиму течения. Систематические измерения в средней вертикальной (проходящей через ось цилиндра) плоскости выполнены методами термоанемометрии и термометра сопротивления. Проведено сравнение измеренных профилей осредненной скорости и температуры с результатами численного моделирования на основе уравнений Рейнольдса. Достигнуто хорошее соответствие опытных и расчетных данных, которые в целом указывают на кардинальную перестройку течения как перед цилиндром в области формирования подковообразных вихревых структур, так и за препятствием, в ближней отрывной зоне и зоне восстановления свободноконвективного пристенного течения.

Ключевые слова: круглый цилиндр, свободноконвективный теплообмен, пограничный слой, термоанемометрия, зона влияния

Ссылка при цитировании: Чумаков Ю.С., Левченя А.М., Храпунов Е.Ф. Экспериментальное исследование течения в зоне влияния цилиндра, погруженного в свободноконвективный пограничный слой на вертикальной поверхности // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 66–77. DOI: 10.18721/JPM.13106

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

AN EXPERIMENTAL STUDY OF THE FLOW IN THE AREA OF INFLUENCE OF A CYLINDER IMMERSED IN THE FREE CONVECTIVE BOUNDARY LAYER ON A VERTICAL SURFACE

Yu.S. Chumakov, A.M. Levchenya, E.F. Khrapunov

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

New experimental data that quantitatively characterize fields of the mean velocity and temperature, the intensity of temperature and velocity pulsations, and also velocity-temperature correlations in the near zone of a circular cylinder placed on the vertical heated surface at the height corresponding to the fully turbulent flow regime have been presented. Systematic measurements in the middle vertical plane (the plane that contains the cylinder axis) were performed using constant temperature anemometer and resistance temperature detectors. The experimental data was compared with numerical simulation one obtained through solving the RANS equations. The overall data were in good agreement and indicated the cardinal restructuring of the flows both before the cylinder (where the horseshoe-shaped vortex formed) and behind the obstacle (in the near separated area and the recovery one of the natural convective near-wall layer). Keywords: circular cylinder, free-convective heat exchange, hot wire anemometry, area of influence

Citation: Chumakov Yu.S., Levchenya A.M., Khrapunov E.F., An experimental study of the flow in the area of influence of a cylinder immersed in the free convective boundary layer on a vertical surface, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 66–77. DOI: 10.18721/JPM.13106

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

Введение

Характерные особенности теплообмена в случае турбулентного режима свободной конвекции, развивающейся у вертикальных нагретых поверхностей, весьма важны в различных приложениях, таких как охлаждение протяженных поверхностей теплообменников, строительство высотных зданий и сооружений, пожарная безопасность, энергетика, безопасность атомных реакторов и т.п. В качестве упрощенной модели подобных течений, во многих работах рассматривается задача о развитии турбулентного свободноконвективного пограничного слоя вдоль вертикальной нагретой пластины.

В большинстве экспериментальных исследований развития пограничного слоя при свободной конвекции, анализировалось течение воздуха при сравнительно небольших перепадах абсолютной температуры (не превышающих 30 % от температуры окружающей среды). Измерения основных характеристик течения и теплообмена, таких как профили средней температуры и средней скорости, напряжение сдвига на стенке, были выполнены Ч. Уорнером и В. Арпачи [1], Р. Чизрайтом [2], А. Пировано и др. [3], Р. Смитом [4], Т. Цудзи и Я. Нагано [5], Ю.С. Чумаковым [6, 7]. Эксперименты, охватывающие измерения различных характеристик турбулентности, были проведены Р. Смитом [4], Р. Чизрайтом и К. Доуном [8], М. Миямото и др. [9], Р. Чизрайтом и Э. Иерокипиотисом [10], Т. Цудзи и Я. Нагано [5, 11], С.Б. Никольской и Ю.С. Чумаковым [12], О.А. Кузьмицким и др. [13]. Обобщение накопленных экспериментальных результатов способствует более глубокому пониманию основных свойств течения и особенностей развития турбулентного режима для этого общего случая.

Во многих практических приложениях свободноконвективный пограничный слой, образующийся на нагретой вертикальной поверхности, может быть существенно возмущен одиночным препятствием или совокупностью нескольких препятствий. Такими «макрошероховатостями» могут быть конструкции промышленных устройств или жилых зданий (крупногабаритные контейнеры для хранения отработанного ядерного топлива, здания с солнечными панелями и т.п.). В ряде случаев препятствия преднамеренно вводят в свободноконвективный пограничный слой, чтобы управлять или контролировать его поведение и тем самым интенсифицировать теплообмен. Примерами подобных исследований могут служить работы [14 - 16, 17]. Как правило, для улучшения теплообмена в режиме свободной конвекции, на нагреваемой поверхности устанавливается система вертикальных ребер. В последнее время особое внимание уделяется использованию V-образных ребер, которые способствуют существенной интенсификации теплоотдачи [18 - 20]. Большое внимание уделяется исследованию проблем управления потоком и интенсификации теплообмена в пограничном слое, возникающем на протяженной вертикальной нагретой пластине, при турбулентном режиме свободной конвекции. Некоторые вопросы увеличения теплопередачи с помощью ребер различной высоты изучены на экспериментальных установках в работах [21, 22]. Авторы работы [23] сравнили эффективность интенсификаторов теплообмена в виде одной длинной пластины и ряда коротких, расположенных на одинаковом расстоянии друг от друга и установленных поперек направления развития пограничного слоя. Проведенные эксперименты показали, что в случае использования поперечного ряда коротких пластин можно добиться большего возмущения течения в следе за этими препятствиями и тем самым существенно увеличить интенсивность теплообмена.

В работах [24, 25] рассматривались особенности формирования структуры течения и теплообмен перед полубесконечным цилиндром, пронизывающим турбулентный свободноконвективный пограничный слой, формирующийся на вертикальной нагретой поверхности. Особое внимание уделялось изучению эффектов, вызванных образованием подковообразных вихревых структур, с помощью трехмерных расчетов на основе RANS. Результаты расширенного исследования, проведенного на основе RANS для случая цилиндра конечной высоты, возмущающего пограничный слой, были изложены в работе [26]. Авторы анализировали влияние высоты цилиндра, а также тепловых условий на его поверхности, преобразующих структуру течения и теплообмен в передней и тыльной частях этого цилиндра.

В настоящей работе представлены результаты измерений средних и пульсационных характеристик полей скорости и температуры в окрестности круглого цилиндра, установленного на вертикальной нагретой поверхности, на высоте, соответствующей развитому турбулентному режиму течения. Проведен также анализ полученных данных.

Экспериментальная установка

Экспериментальные исследования проведены на стенде, созданном в лаборатории гидроаэродинамики Институ-

та прикладной математики и механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого в 1990-х годах [6, 7] и модернизированном в последние три года (рис. 1). Генератором свободноконвективного воздушного потока является вертикальная алюминиевая пластина 4 шириной 90 см и высотой 495 см. С обратной стороны пластины находятся 25 нагревателей (на рис. 1 не показаны), работой которых управляет электронная система, способная поддерживать заданный тепловой режим длительное время.

Если задавать определенный режим каждой из 25 секций, то можно моделировать различные законы нагрева поверхности по ее высоте и, в частности, режим постоянной температуры поверхности. Благодаря большой высоте пластины удается реализовать все три режима воздушного течения: ламинарный, переходный и развитый турбулентный, вплоть до значений числа Грасгофа 4,5·10¹¹.

Для передвижения измерительного датчика 13 в пространстве образующегося течения, используется координатное устройство, обеспечивающее точность перемещения около 0,5 мм по вертикальной координате X, а по нормальной к поверх-



Рис.1. Схема стенда с нагреваемой вертикальной пластиной и координатным устройством: 1 – верхнее крепление; 2 – вертикальные опоры; 3 – кабели датчиков температуры;
4 – нагреваемая пластина; 5 – боковые шторки; 6 – фундамент; 7 – нижнее шарнирное крепление;
8 – задняя шторка; 9, 15 – электродвигатели; 10 – трос; 11 – направляющие стойки; 12 – система фиксации державки датчика; 13 – зонд; 14 – шаговый двигатель; 16 – подвижная каретка

ности координате Y (поперек пограничного слоя), – порядка 0,001 мм; при этом перемещение по нормальной координате осуществляется с помощью шагового двигателя 14 по заданной программе. Измерение параметров потока в одном сечении пограничного слоя выполняется полностью автоматически.

Необходимо отметить, что столь высокая точность перемещения датчика 13 поперек пограничного слоя возможна только при движении в одном направлении, например, от поверхности. Алгоритм перемещения датчика в первую точку у поверхности использует реверсивную форму движения, что существенно снижает точность определения координаты этой точки. В данной работе точность определения нормальной координаты первой точки измерения была не хуже 0,1 мм. Далее движение датчика происходит в одном направлении и точность перемещения соответствует заявленной выше (0,001 мм).

Процедура измерения скорости и температуры в заданной точке пространства одинакова и заключается в следующем. Аналоговый сигнал, соответствующий температуре (или скорости), с помощью аналого-цифрового преобразователя оцифровывается согласно заданным параметрам: количество (N) и частота (Hr) выборок. В данной работе N = 2000, а Hr = 100 Гц; таким образом, время обработки сигнала в заданной точке составляет 20 с. Далее определяются среднее и среднеквадратичное значения (RMS) пульсаций данной величины.

Рабочий участок и методика измерений

Изучалась зона взаимодействия развитого турбулентного свободноконвективного пограничного слоя с трехмерным препятствием в виде низкотеплопроводного (адиабатического) цилиндра диаметром 40 мм, с такой же высотой (рис. 2, *a*). Цилиндр устанавливался на высоте 1800 мм, отсчитываемой от передней кромки пластины, что, при реализованном нагреве пластины до 60 °С и температуре внешнего воздуха около 26 °С, соответствует значению числа Грасгофа (традиционно определяемого), равному приблизительно 2·10¹⁰. При данном числе Грасгофа натекающий на цилиндр слой является турбулентным, а его толщина примерно в четыре раза превосходит высоту установленного цилиндра.

Методом термоанемометрии (ТА) и с помощью термометра сопротивления выполнены систематические совместные измерения полей осредненных скорости и температуры в средней вертикальной (проходящей через ось цилиндра) плоскости, интенсивности пульсаций скорости и температуры, а также корреляции последних.

Известно, что при использовании метода ТА для измерения скорости в неизотермическом потоке необходимо учитывать влияние температуры при расшифровке показаний термоанемометра. Для рассматриваемого течения, которое характеризуется небольшими средними скоростями и большим уровнем пульсаций, обычно используемый метод термокомпенсации по средней температуре может приводить к весьма неточным измерениям актуальной скорости. В настоящей работе для измерений применялся оригинальный метод термокомпенсации, описанный в статье [27]. Согласно указанному методу, показание термоанемометра, соответствующее актуальной скорости в данной точке пространства, расшифровывается с учетом актуальной температуры в той же точке. Для реализации метода используется специальная калибровочная установка [27], основным принципом работы которой является равномерное движение датчика по неравномерно нагретому неподвижному воздуху. Установка позволяет калибровать датчики при скоростях от 1 до 50 см/с при температуре воздуха от 20 до



Рис.2. Фрагменты экспериментальной установки: *а* — пластина с установленным на ней цилиндром (в его окрестности виден измерительный зонд); *b* — двухниточный зонд для одновременного измерения актуальных значений скорости течения и температуры воздуха

80 °C. Результаты калибровки представляются в виде зависимости напряжения с термоанемометра от скорости потока, а коэффициенты в этой зависимости являются функциями температуры.

Таким образом, для измерения скорости в неизотермическом потоке зонд должен состоять, как минимум, из двух датчиков. Один датчик (холодная нить) используется для измерения температуры, а другой (горячая нить) — для измерения напряжения, зависящего от скорости потока и его температуры. По измеренной температуре определяются коэффициенты калибровки и вычисляется скорость в данной точке потока.

На рис. 2, *b* представлена фотография двухниточного зонда, использованного в настоящей работе для измерения актуальных значений температуры и скорости. Чувствительными элементами служат вольфрамовые проволочки диаметром 5 мкм и длиной 3,5 мм. В процессе измерений зонд ориентируется так, чтобы холодная нить находилась вверх по потоку относительно горячей нити: это уменьшает влияние теплового «микропотока» от горячей нити. При этом обе нити располагаются горизонтально и параллельно поверхности пластины, что позволяет очень близко придвинуть зонд к ней. Следует иметь в виду, что указанное расположение датчика скорости (горячей нити) соответствует измерению модуля вектора актуальной скорости, лежащего в средней вертикальной плоскости.

Результаты измерений и их обсуждение

Результаты измерений характеристик потока в нескольких нормальных сечениях перед и за цилиндром приведены на рис. 3 - 5. Здесь следует заметить, что «температурная» и «скоростная» нити датчика разнесены в пространстве на 2 мм; при этом, как отмечалось выше, скоростная нить располагается над температурной. Данное обстоятельство определяет небольшие сдвиги в значениях вертикальной координаты Х на легендах приводимых графиков, которые идентифицируют положение представляемых профилей различных измеряемых величин. Профили здесь и далее обозначены на легендах графиков указанием расстояния dX от соответствующей измерительной нити до ближайшей кромки цилиндра (передней или кормовой). Расстояние до пластины, по нормали к ней, нормировано на высоту цилиндра h = 40 мм.

На рис. 3 представлены профили средней скорости и ее пульсаций. Вертикальной линией на этих и следующих графиках с экспериментальными данными отмечено положение торца цилиндра. Развившийся на пластине статистически двумерный свободноконвективный пограничный слой, с максимумом скорости в нем около 0,4 м/с, тормозится по мере приближения к передней кромке цилиндра (рис. 3, *a*), а в ближайших к ней трех сечениях заметно возрастание модуля скорости в области y/h > 1, что соответствует зоне ускорения потока, перетекающего через торец цилиндра. В ближнем следе за цилиндром (рис. 3, b) область ускоренного течения над торцом сохраняет свое присутствие в первых сечениях после задней кромки, а вблизи поверхности, в аэродинамической тени цилиндра, так же как и перед ним, наблюдается существенное снижение модуля скорости, особенно в области рециркуляции. При дальнейшем продвижении вниз по потоку происходит постепенное восстановление свободноконвективного пограничного слоя. На рис. 3, с, *d* показаны отдельные измеренные профили среднеквадратичных значений (RMS) пульсаций скорости. К сожалению, метод ТА не позволяет проводить надежные измерения скорости в непосредственной близости от высокотеплопроводной стенки. В нашем случае толщина «запретной зоны» составляет около 2 мм, что соответствует 5% от высоты препятствия.

На рис. 4, аналогичном рис. 3, представлены профили средней температуры и ее пульсаций в сечениях перед и за цилиндром. Профили температуры в большинстве сечений перед цилиндром и вдали от него весьма схожи. У передней кромки препятствия монотонность профилей температуры несколько нарушается, и на расстоянии в несколько миллиметров перед кромкой (в области менее 10% от высоты тела) наблюдается существенное локальное снижение температуры. Обращение к приведенным в работе [26] результатам численного моделирования позволяет заключить, что это снижение отвечает области образования подковообразной вихревой структуры, где относительно холодный поток из внешней части пограничного слоя подсасывается к поверхности пластины под действием подковообразного вихря. В следе за цилиндром (рис. 4, b) наблюдается большее расслоение между профилями в разных сечениях.



Рис. 3. Результаты измерения поля скорости течения: средняя скорость перед (*a*) и за (*b*) цилиндром; пульсации скорости перед (*c*) и за (*d*) цилиндром; *dX*-расстояния от соответствующей измерительной нити до ближайшей кромки цилиндра; вертикальными линиями отмечено положение торца цилиндра



Рис. 4. Результаты измерения температурных полей: средняя температура воздуха перед (*a*) и за (*b*) цилиндром; пульсации температуры перед (*c*) и за (*d*) цилиндром; *dX*-расстояния от соответствующей измерительной нити до ближайшей кромки цилиндра; вертикальными





Рис. 5. Распределения корреляции $\langle U'T' \rangle$ перед (*a*) и за (*b*) цилиндром по результатам измерений;

dX— расстояния от соответствующей измерительной нити до ближайшей кромки цилиндра; вертикальными линиями отмечено положение торца цилиндра

В области рециркуляции, близко к задней кромке препятствия, поток хорошо перемешан и прогрет теплом от горячей поверхности пластины. Ниже по потоку, за точкой обратного присоединения пограничного слоя, оторвавшегося перед препятствием недалеко от пластины (например, на расстоянии по нормали порядка 10% от высоты цилиндра), наблюдаются значения температуры, которые существенно (на 10°) меньше таковых, характерных для невозмущенного пограничного слоя на этом расстоянии от пластины. Дальше по потоку происходит постепенное восстановление профиля температуры, соответствующее случаю невозмущенного препятствием пограничного слоя.

Профили среднеквадратичных значений пульсаций температуры, показанные на рис. 4, *с* и *d*, а также профили нормированной корреляции пульсаций скорости и температуры, приведенные на рис. 5, дают возможность сопоставить положение максимумов пульсацией перед и за цилиндром, а также оценить общий уровень значений данных величин.

Сопоставление экспериментальных результатов с данными численного моделирования

Представляет интерес сопоставить полученные опытные данные с опубликованными недавно результатами численного моделирования течения при аналогичных условиях [26]. В этой работе приведены результаты численного исследования структуры трехмерного течения и теплообмена в окрестности кругового цилиндра, возмущающего развитый турбулентный свободноконвективный пограничный слой. Расчеты выполнены с использованием осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье – Стокса (RANS) по SST-модели турбулентности Ментера. Геометрическая конфигурация и условия, принятые в расчетах для одного из вариантов (размеры цилиндра, тепловые условия на его поверхности, параметры набегающего на него пограничного слоя), близки к условиям описанных выше экспериментов. По сути дела, расчеты, представленные в статье [26], выступили в роли вспомогательных по отношению к постановке приведенных здесь экспериментов и позволили предсказать ряд особенностей реального течения, развивающегося в окрестности выбранного нами цилиндра. На рис. 6 дается сопоставление результатов измерений средних величин с данными, которые получены численным моделированием. Здесь скорость U нормирована на ее максимальное значение U_{max} на расстоянии 72.5 мм перед цилиндром, а безразмерная температура θ определена по традиционной для подобных задач формуле

$$\theta = \frac{T - T_a}{T_w - T_a},$$

где T_w , T_a — значения температуры нагретой поверхности и внешнего пространства, соответственно.

Следует также заметить, что результаты расчетного определения составляющих вектора средней скорости были пересчитаны для получения «эффективных» значений U, получаемых при измерениях посредством датчика с одной «скоростной» нитью, который не чувствителен к направлению вектора скорости, а реагирует лишь на актуальное значение модуля скорости, поперечной к нити. Пересчет основан на простых соотношениях, использующих расчетную информацию о локальном направлении вектора осредненной скорости в точке измерения. Анализ информации, представленной на рис. 6, позволяет заключить, что наблюдается весьма удовлетворительное, а по отдельным сопоставляемым профилям и очень хорошее согласие между опытными и расчетными данными, которые в целом указывают на кардинальную перестройку течения как в области перед цилиндром, где формируются подковообразные вихревые структуры, так и в области за цилиндром, включающей ближнюю отрывную зону и зону восстановления свободноконвективного пристенного течения. Отметим, что в отношении последней имеется, однако, заметное различие между результатами экспериментов и RANS-расчетов. Как можно видеть на рис. 6, b, в расчетной модели явно замедлен процесс восстановления свободноконвективного слоя.

Заключение

Для области взаимодействия развитого турбулентного свободноконвективного пограничного слоя с погруженным в него круговым низкотеплопроводным цилиндром получены новые экспериментальные данные, количественно характеризующие поля осредненной по времени скорости воздушного течения, осредненной температуры воздуха, интенсивности пульсаций


Рис. 6. Сопоставление экспериментальных данных (символы) с результатами численного моделирования RANS (сплошные линии): представлены средняя нормированная скорость течения перед (*a*) и за (*b*) цилиндром, а также средняя безразмерная температура воздуха перед (*c*) и за (*d*) цилиндром;

dX – расстояния от соответствующей измерительной нити до ближайшей кромки цилиндра

скорости и температуры, а также корреляции пульсаций скорости и температуры.

Семейство измеренных профилей осредненной скорости и температуры использовано для сравнения результатов, полученных экспериментально и путем численного моделирования на основе RANS-приближения. Достигнуто весьма удовлетворительное, а по отдельным сопоставляемым профилям и очень хорошее согласие между опытными и расчетными данными, которые в целом указывают на кардинальную перестройку течения как в области перед цилиндром, где формируются подковообразные вихревые структуры, так и в области за препятствием, включающей ближнюю отрывную зону и зону восстановления свободноконвективного пристенного течения. Вместе с тем, результаты RANS-расчетов демонстрируют несколько замедленное

восстановление свободноконвективного пограничного слоя в дальнем следе за цилиндром, по сравнению с экспериментальными данными.

В настоящее время измерения выполнены только для средней вертикальной плоскости, проходящей через ось цилиндра; планируется продолжить работу по исследованию трехмерной структуры течения посредством измерений и для других сечений рабочего участка.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №18-19-00082). Результаты RANS-расчетов получены с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (www.scc.spbstu.ru).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Warner C.Y., Arpaci V.S. An experimental investigation of turbulent natural convection in air at low pressure along a vertical heated flat plate // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1968. Vol. 11. No. 3. Pp. 397–406.

2. Cheesewright R. Turbulent natural convection from a vertical plane surface // Journal of Heat Transfer. 1968. Vol. 90. No. 1. Pp. 1–8.

3. Pirovano A., Viannay S., Jannot M.

Convection naturelle en régime turbulent le long d'une plaque plane vertical // Proceedings of the 9th International Heat Transfer Conference, Paris, Amsterdam: Elsevier, 1970. Vol. 4.1.8. Pp. 1-12.

4. **Smith R.R.** Characteristics of turbulence in free convection flow past a vertical plate. Ph.D. Thesis, University of London, 1972.

5. Tsuji T., Nagano Y. Characteristics of a

turbulent natural convection boundary layer along a vertical flat plate // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1988. Vol. 31. No. 8. Pp. 1723–1734.

6. Chumakov Yu.S., Kuzmitsky V.A. Surface shear stress and heat flux measurements at a vertical heated plate under free convection heat transfer // Russian Journal of Engineering Thermophysics. 1998. Vol. 8. No. 1–4. Pp. 1–15.

7. **Чумаков Ю.С.** Распределение температуры и скорости в свободноконвективном пограничном слое на вертикальной изотермической поверхности // Теплофизика высоких температур. 1999. Т. 37. № 5. С. 744–749.

8. Cheesewright R., Doan K.S. Space-time correlation measurements in a turbulent natural convection boundary layer // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1978. Vol. 21. No. 7. Pp. 911–921.

9. Miyamoto M., Kajino H., Kurima J., Takanami I. Development of turbulence characteristics in a vertical free convection boundary layer // Proceedings of the 7th International Heat Transfer Conference. Munich, FRG. Vol. 2. 1982. Pp. 323–328.

10. Cheesewright R., Ierokipiotis E. Velocity measurements in a turbulent natural convection boundary layer // Proceedings of the 7th International Heat Transfer Conference. Munich, FRG. Vol. 2. 1982. Pp. 305–309.

11. **Tsuji T., Nagano Y.** Turbulence measurements in a natural convection boundary layer along a vertical flat plate // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1988. Vol. 31. No. 10. Pp. 2101–2111.

12. Никольская С.Б., Чумаков Ю.С. Экспериментальное исследование пульсационного движения в свободноконвективном пограничном слое // Теплофизика высоких температур. 2000. Т. 38. № 2. С. 249–256.

13. Kuzmitskiy O.A., Nikolskaya S.B., Chumakov Yu.S. Spectral and correlation characteristics of velocity and temperature fluctuations in a free-convection boundary layer // Heat Transfer Research. 2002. Vol. 33. No. 3–4. Pp. 144–147.

14. **Bhavnani S.H., Bergles A.E.** Effect of surface geometry and orientation on laminar natural convection heat transfer from a vertical flat plate with transverse roughness elements // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1990. Vol. 13. No. 5. Pp. 965–981.

15. Burak V.S., Volkov S.V., Martynenko O.G., Khramtsov P.P., Shikh I.A. Experimental study of free-convection flow on a vertical plate with constant heat flux in the presence of one or more steps // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1995. Vol. 38. No. 1. Pp. 147-154.

16. Aydin M. Dependence of the natural convection over a vertical flat plate in the presence of the ribs // International Communications in Heat and Mass Transfer. 1997. Vol. 24. No. 4. Pp. 521–531.

17. **Polidori G., Padet J.** Transient free convection flow on a vertical surface with an array of large scale roughness elements // Experimental Thermal and Fluid Science. 2003. Vol. 27. No. 3. Pp. 251–260.

18. Misumi T., Kitamura K. Enhancement techniques for natural convection heat transfer from vertical finned plate // Heat transfer – Japanese Research. 1994. Vol. 23. No. 16. Pp. 513–524.

19. Fujii M. Enhancement of natural convection heat transfer from a vertical heated plate using inclined fins // Heat Transfer – Asian Research. 2007. Vol. 36. No. 6. Pp. 334–344.

20. Naserian M., Fahiminia M., Goshayeshi H.R. Experimental and numerical analysis of natural convection heat transfer coefficient of V-type fin configurations // Journal of Mechanical Science and Technology. 2013. Vol. 27. No. 7. Pp. 2191–2197.

21. **Misumi T., Kitamura K.** Enhancement of natural convective heat transfer from tall vertical heated plates // JSME B. (in Japanese). 1999. Vol. 65. No. 640. Pp. 4041–4048.

22. Komori K., Inagaki T., Kito S., Mizoguchi N. Natural convection heat transfer along a vertical flat plate with a projection in the turbulent region // Heat Transfer – Asian Research. 2001. Vol. 30. No. 3. Pp. 222–233.

23. **Tsuji T., Kajitani T., Nishino T.** Heat transfer enhancement in a turbulent natural convection boundary layer along a vertical flat plate // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2007. Vol. 28. No. 6. Pp. 1472–1483.

24. Levchenya A.M., Smirnov E.M., Zhukovskaya V.D., Ivanov N.G. Numerical study of 3D turbulent flow and local heat transfer near a cylinder introduced into the free-convection boundary layer on a vertical plate // Proceedings of the 16th International Heat Transfer Conference (IHTC-16), August 10–15, 2018. Beijing, China. Paper IHTC16-22916. DOI: 10.1615/IHTC16. hte.022916 (2018) 5493–5500.

25. Levchenya A.M., Smirnov E.M., Zhukovskaya V.D. Numerical study of 3D flow structure near a cylinder piercing turbulent freeconvection boundary layer on a vertical plate // AIP Conf. Proc. 2018. Vol. 1959. P. 050017.

26. Smirnov E.M., Levchenya A.M., Zhukovskaya V.D. RANS-based numerical

simulation of the turbulent free convection vertical-plate boundary layer disturbed by a normal-to-plate circular cylinder // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2019. Vol. 144. December. P. 118573. 27. Кузьмицкий В.А., Чумаков Ю.С. Установка для статической калибровки термоанемометра при малых скоростях в неизотермической воздушной среде // Теплофизика высоких температур. 1995. Т. 33. № 1. С. 116–120.

Статья поступила в редакцию 17.01.2020, принята к публикации 31.01.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЧУМАКОВ Юрий Сергеевич — доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 chymakov@yahoo.com

ЛЕВЧЕНЯ Александр Михайлович — кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

ХРАПУНОВ Евгений Федорович — аспирант Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

REFERENCES

1. Warner C.Y., Arpaci V.S., An experimental investigation of turbulent natural convection in air at low pressure along a vertical heated flat plate, International Journal of Heat and Mass Transfer. 11 (3) (1968) 397–406.

2. Cheesewright R., Turbulent natural convection from a vertical plane surface, Journal of Heat Transfer. 90 (1) (1968) 1–8.

3. **Pirovano A., Viannay S., Jannot M.,** Convection naturelle en régime turbulent le long d'une plaque plane verticale, Proceedings of the 9th International Heat Transfer Conference, Elsevier, Paris, Amsterdam. 4 (1.8) (1970) 1–12.

4. **Smith R.R.,** Characteristics of turbulence in free convection flow past a vertical plate, Ph.D. Thesis, University of London, 1972.

5. **Tsuji T., Nagano Y.,** Characteristics of a turbulent natural convection boundary layer along a vertical flat plate, International Journal of Heat and Mass Transfer. 31 (8) (1988) 1723–1734.

6. Chumakov Yu.S., Kuzmitsky V.A., Surface shear stress and heat flux measurements at a vertical heated plate under free convection heat transfer, Russian Journal of Engineering Thermophysics. 8 (1-4) (1998) 1-15.

7. **Chumakov Yu.S.**, Temperature and velocity distributions in a free-convection boundary layer on a vertical isothermal surface, High Temperature. 37 (5) (1999) 714–719.

8. Cheesewright R., Doan K.S., Space-time correlation measurements in a turbulent natural convection boundary layer, International Journal of Heat and Mass Transfer. 21(91) (1978) 911–921.

9. **Miyamoto M., Kajino H., Kurima J., Takanami I.**, Development of turbulence characteristics in a vertical free convection boundary layer, Proceedings of the 7th International Heat Transfer Conference, Munich, FRG. 2 (1982) 323–328.

10. Cheesewright R., Ierokipiotis E., Velocity measurements in a turbulent natural convection boundary layer, Proceedings of the 7th International Heat Transfer Conference, Munich, FRG. 2 (1982) 305–309.

11. **Tsuji T., Nagano Y.,** Turbulence measurements in a natural convection boundary layer along a vertical flat plate, International Journal of Heat and Mass Transfer. 31 (10) (1988)

2101-2111.

12. Nikolskaya S.B., Chumakov Yu.S., Experimental investigation of pulsation motion in a free-convection boundary layer, High Temperature. 38 (2) (2000) 231–237.

13. O.A. Kuzmitskiy, Nikolskaya S.B., Chumakov Yu.S., Spectral and correlation characteristics of velocity and temperature fluctuations in a free-convection boundary layer, Heat Transfer Research. 33 (3–4) (2002) 144–147.

14. **Bhavnani S.H., Bergles A.E.,** Effect of surface geometry and orientation on laminar natural convection heat transfer from a vertical flat plate with transverse roughness elements, International Journal of Heat and Mass Transfer. 13 (5) (1990) 965–981.

15. Burak V.S., Volkov S.V., Martynenko O.G., et al., Experimental study of free-convection flow on a vertical plate with constant heat flux in the presence of one or more steps, International Journal of Heat and Mass Transfer. 38 (1) (1995) 147–154.

16. Aydin M., Dependence of the natural convection over a vertical flat plate in the presence of the ribs, International Communications in Heat and Mass Transfer. 24 (4) (1997) 521–531.

17. **Polidori G., Padet J.,** Transient free convection flow on a vertical surface with an array of large scale roughness elements, Experimental Thermal and Fluid Science. 27 (3) (2003) 251–260.

18. **Misumi T., Kitamura K.,** Enhancement techniques for natural convection heat transfer from vertical finned plate, Heat transfer – Japanese Research. 23 (16) (1994) 513–524.

19. **Fujii M.,** Enhancement of natural convection heat transfer from a vertical heated plate using inclined fins, Heat Transfer – Asian Research. 36 (6) (2007) 334–344.

20. Naserian M., Fahiminia M., Goshayeshi H.R., Experimental and numerical analysis of natural convection heat transfer coefficient of

V-type fin configurations, Journal of Mechanical Science and Technoljgy. 27 (7) (2013) 2191–2197.

21. **Misumi T., Kitamura K.,** Enhancement of natural convective heat transfer from tall vertical heated plates, JSME B (in Japanese), 65 (640) (1999) 4041–4048.

22. Komori K., Inagaki T., Kito S., Mizoguchi N., Natural convection heat transfer along a vertical flat plate with a projection in the turbulent region, Heat Transfer – Asian Research. 30 (3) (2001) 222–233.

23. **Tsuji T., Kajitani T., Nishino T.,** Heat transfer enhancement in a turbulent natural convection boundary layer along a vertical flat plate, International Journal of Heat and Fluid Flow. 28 (6) (2007) 1472–1483.

24. Levchenya A.M., Smirnov E.M., Zhukovskaya V.D., Ivanov N.G., Numerical study of 3D turbulent flow and local heat transfer near a cylinder introduced into the free-convection boundary layer on a vertical plate, Proceedings of the 16th International Heat Transfer Conference, IHTC-16, August 10–15, 2018, Beijing, China, Paper IHTC16-22916. DOI: 10.1615/IHTC16. hte.022916, (2018) 5493–5500.

25. Levchenya A.M., Smirnov E.M., Zhukovskaya V.D., Numerical study of 3D flow structure near a cylinder piercing turbulent freeconvection boundary layer on a vertical plate, AIP Conference Proceedings. 1959 (2018) 050017.

26. Smirnov E.M., Levchenya A.M., Zhukovskaya V.D., RANS-based numerical simulation of the turbulent free convection vertical-plate boundary layer disturbed by a normal-to-plate circular cylinder, International Journal of Heat and Mass Transfer. 144 (December) (2019) 118573.

27. **Kuzmitskii V.A., Chumakov Yu.S.,** Facility for static calibration of a hot-wire anemometer at low velocities in a nonisothermal air medium, High Temperature. 33 (1) (1995) 109–113.

Received 17.01.2020, accepted 31.01.2020.

THE AUTHORS

CHUMAKOV Yuriy S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation chymakov@yahoo.com

LEVCHENYA Alexander M.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation levchenya am@spbstu.ru

KHRAPUNOV Evgeniy F.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation hrapunov.evgenii@yandex.ru

Физическая электроника

DOI: 10.18721/JPM.13107 УДК 621.455.4; 621.455.34

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ УСКОРИТЕЛЯ ИОНОВ С КОНТАКТНОЙ ИОНИЗАЦИЕЙ ДЛЯ ЭЛЕКТРОРАКЕТНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ КОСМИЧЕСКИХ ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ

Д.Б. Дюбо, О.Ю. Цыбин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Российская Федерация

С целью исследования физических процессов и расчета механических сил в ускорителе ионов, построен аналитический электродинамический алгоритм, объединенный с компьютерным моделированием электромагнитного поля и траекторий заряженных частиц. В качестве примера рассмотрены компьютерные модели ускорителей ионов с поверхностной или контактной ионизацией в области инжекции. Созданный теоретический аппарат позволит оценивать предполагаемые конструкторские решения и параметры разрабатываемых электроракетных двигателей космических летательных аппаратов, сравнивать применение в них различных рабочих веществ.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, ионизация, ионный поток, ионный ускоритель, электроракетный двигатель

Ссылка при цитировании: Дюбо Д.Б., Цыбин О.Ю. Компьютерная модель ускорителя ионов с контактной ионизацией для электроракетных двигателей космических летательных аппаратов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 78–91. DOI: 10.18721/JPM.13107

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

THE CONTACT IONIZATION ION ACCELERATOR FOR THE ELECTRICALLY POWERED SPACECRAFT PROPULSION: A COMPUTER MODEL

D.B. Dyubo, O.Yu. Tsybin

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

An analytical electrodynamic algorithm has been developed in order to study physical processes and calculate mechanical forces in an ion accelerator. This algorithm is combined with computer simulation of the electromagnetic field and charged particles' trajectories. Computer models of ion accelerators with surface or contact ionization in the injection region were considered as an example. Ultimately, the created theoretical apparatus makes it possible to evaluate the proposed engineering solutions and diagnostic parameters of electric spacecraft propulsions as well as to compare the applicability of various working agents inside.

Keywords: computer modeling, ionization, ion beam, ion accelerator, electrically powered spacecraft propulsion

Citation: Dyubo D.B., Tsybin O.Yu., The contact ionization ion accelerator for the electrically powered spacecraft propulsion: a computer model, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 78–91. DOI: 10.18721/JPM.13107

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

Введение

Ускоренные потоки ионов в вакууме широко используются в научных исследованиях, медицине, материаловедении, микроэлектронике, а также в технологии нанесения тонких пленок, очистке поверхности деталей и т. п. [1 – 5]. Большое значение ускорители ионов приобрели в космической технике, особенно для использования в электрических ракетных двигателях (ЭРД) космических летательных аппаратов [6 – 9]. В этом направлении накоплены значительные результаты фундаментальных научно-технических исследований [10 – 14], развита соответствующая теория [15 – 19], реализованыметоды компьютерного моделирования [17 – 19].

Типичные ЭРД – это вакуумные ионные и ионно-плазменные устройства, в которых электромагнитная энергия на этапе ускорения ионов рабочего тела (РТ) преобразуется в механическую энергию ускоренного движения космического аппарата. Преимущественно используют два типа конструкций ускорителей ЭРД: ионные и ионно-плазменные [6, 10, 11]. Физику ЭРД представляет сложный комплекс явлений, включающий преобразование рабочего тела в парогазовую фазу, процессы ионизации, характеристики плазмы в камере ионизации, инжекцию плазмы и ионов в ускоритель и их ускорение, возникновение и параметры механических сил, процессы нейтрализации и перезарядки, экстракции и формирования диаграммы направленности факела. При выходе из ускорителя быстрые ионы должны быть нейтрализованы, что необходимо для предотвращения зарядки корпуса летательного аппарата и связанных с этим падения силы тяги и вторичных разрядных явлений. Факел нейтрализованных частиц выбрасывается в окружающее пространство с высокой скоростью – до десятков км/с, т. е. много выше, чем в химических реактивных двигателях. В практически значимых современных ЭРД в качестве РТ в основном используют сжатые газы, преимущественно ксенон. Однако ксенон относится к дефицитным и дорогим веществам, что требует его замены в перспективных массовых разработках двигателей. Новые ЭРД должны сочетать простую, надежную и долговечную конструкцию с более приемлемой стоимостью, работать на альтернативных видах РТ, эффективно создавать требуемую тягу, экономно расходовать запасенное рабочее

вещество, а также использовать новые технологии и материалы [8, 12 – 14]. Для разработки новых ЭРД необходимы развитие теории и методов изучения ионно-механических процессов в ускорителях, а также стендовые и полетные экспериментальные исследования. Стендовые осуществляются в наземных лабораториях и, как правило, в дорогостоящих вакуумных установках большого объема, а это требует больших затрат времени и расхода рабочих веществ.

Аналитические методы в теории ЭРД применяют в основном для наиболее простых ионно-оптических и электродинамических задач [10 -15]. Эффективные решения для плазменных состояний получают методом численного моделирования динамики укрупненных частиц по временным шагам (так называемым методом Монте-Карло) [17 – 19]. Для вычисления электромагнитных полей и траекторий частиц в этих полях, применяют дифференциальные уравнения в конечно-разностной форме, сеточные методы и преобразование Фурье. Этот ставший классическим метод является довольно сложным и громоздким, требует больших затрат компьютерного времени. Программный пакет трехмерного моделирования, разработанный компанией "Computer Simulation Technology" (CST, www.cst.com), позволяет эффективно осушествлять траекторный анализ различных электронных и ионных устройств с учетом собственного электрического поля объемного заряда [20, 21]. Однако в известных источниках не представлено применение CST-кодов для исследования и проектирования ионных и ионно-плазменных ЭРД. Несмотря на большое значение комплекса микроскопических силовых характеристик, электродинамические модели и расчеты механических процессов в ускорителях недостаточно развиты, что сдерживает проектирование новых устройств. В известных источниках не представлено описания зависимостей силы тяги от координат, от формы электродов и режимов работы ускорителя, а также от других параметров. Обычно принимают упрощенно, безотносительно к элементам конструкции, что сила тяги может быть выражена через параметры факела в виде

$$F_f = v_{in}(dm_w/dt),$$

где dm_w/dt — поток массы рабочего тела m_w в нейтрализованном факеле, t — время; v_{in} — скорость нейтральной частицы в факеле.

При этом значения величин dm_w/dt не являются измеряемыми. Результирующую силу тяги F_f электростатического ионного и ионно-плазменного двигателя записывают через ток I и напряжение U_d для ионов массой µ и зарядом q в ускорительном зазоре (см., например, работы [10, 11]):

$$F_f = I[2U_d(\mu/q)]^{1/2}.$$

Принимается, что поле ионов на выходе из ускорителя равно нулю, поток и скорость частиц в факеле равны таким же величинам в ускорителе и не изменяются в нейтрализаторе; принимается, что нейтрализация имеет 100%-ю эффективность, в камере ускорения отсутствуют частицы с зарядом противоположного знака, ионы не имеют поперечных компонент скоростей, отсутствуют потери ионов, столкновения и перезарядка и т. п.

При таком упрощении неточно учитываются ионно-оптические свойства инжектора, ускорителя и нейтрализатора, а также связанные с ними микроскопические процессы генерации механических сил. В общем, точность приведенных выше формул требует изучения и оценок.

Подобнометоду Монте-Карло и некоторым другим аналогичным пакетам компьютерных программ, в пакете CST не могут быть выявлены связи механических сил, действующих в ионных ускорителях, с внутренними микроскопическими процессами.

Цель данной работы — построить электродинамический алгоритм,определяющий механические параметры и объединенный с компьютерным моделированием в пакете CST, для установления указанных выше связей. Кроме того, стояла задача применения разработанного аппарата для исследований физических процессов в ионных и ионно-плазменных ЭРД.

Электродинамический алгоритм для определения механических параметров ионных и ионно-плазменных ускорителей

В компьютерной CST-модели, объединенной с электродинамическим алгоритмом, мы прежде всего проанализировали ионные траектории в однокаскадных и многокаскадных ускорителях прямого действия в неоднородных полях, с учетом зарядов поляризации и объемного заряда, который образуется в ходе движения потока заряженных частиц. В результате проведенного анализа нами предложен электродинамический алгоритм, который учитывает связи механических свойств с особенностями конструкций и режимов, характеристики основных процессов и рабочих веществ. Алгоритм представлен взаимосвязанными модулями различной сложности, что позволило производить расчеты как простых элементов ускорителя, так и их совокупности.

Основные принципы алгоритма для определения механических параметров электростатического ускорения ионов состоят, в частности, в следующих положениях.

Приложенное ускоряющее напряжение и объемные заряды в ускорителе совместно индуцируют определенные заряды поляризации. Это поверхностные заряды, связанные на электродах и распределенные по их поверхностям; распределение задается геометрической формой, размерами и расположением электродов.

Генерация механического импульса тяги двигателя происходит в камере ускорения ионов. Сила тяги, приложенная к электродам, возникает за счет кулоновского притяжения поверхностных зарядов поляризации к ускоряемым ионам. Основным условием и процессом получения механической тяги является ускорение ионов электрическим полем в ускорителе, их дальнейшая нейтрализация и выброс факела нейтральных частиц в пространство. Необходимость нейтрализации ускоренных ионов обусловлена тем, что уход ионов создает избыточный заряд противоположного знака. Такой заряд тормозит уходящие ионы, снижая силу тяги, а также создает разрушительные разрядные явления на конструктивных деталях устройства. На испытательном стенде действие силы FTM создает механическое напряжение в конструкции крепления неподвижного устройства, а в полетном режиме это действие обеспечивает ускорение летательного аппарата.

Упрощенная схема типичного однокаскадного ускорителя ионов прямого действия для электроракетного космического двигателя представлена на рис.1.

На рис. 1. показан объемный заряд 3 «внутренних» ионов с полной массой mи скоростью v(z) в ускорителе; факел 5 нейтрализованных частиц выбрасывается



Рис.1. Упрощенная схема однокаскадного ускорителя ионов:

l — входной электрод в плоскости инжекции ионов (z = 0); 2 — связанные заряды на выходном электроде в плоскости экстракции ионов (z = d); 3 — объемный заряд Q; 4 — область нейтрализации ионов; 5 — факел нейтрализованных частиц, выбрасываемый в пространство; F_{TM} , F_{TI} — силы, действующие на выходной электрод со стороны ионного потока и на ионный поток со стороны связанных зарядов, соответственно

в пространство со скоростью v_{f} . Сила F_{n} , действующая на ионный поток со стороны связанных поверхностных зарядов 2, равна силе инерции ионов массой *m*:

$$F_{T} = m (dv/dt).$$

Сила F_{TM} , действующая на выходной электрод со стороны ионного потока 3, выражается как

$$F_{TM} = -v(dm/dt).$$

Ускорение ионов вызывает сила притяжения к поверхностным зарядам, которая вычисляется как сила Лоренца, действующая на заряженные частицы со стороны электрического поля в ускорителе с учетом зарядов поляризации электродов. Отметим, что параметры ионного потока в приведенных двух формулах относятся не к факелу, а к частицам в ускорителе.

Дрейф ионов в ускорительном зазоре направлен вдоль оси z от плоскости инжекции l при z = 0 до плоскости нейтрализации 4. Мгновенные «внутренние» заряд и масса в ускорительном зазоре равны Q и m, ширина зазора равна d.

В созданных современных ионно-плазменных или холловских двигателях создают плазму РТ в непосредственно в ускорительном зазоре, объединенном с камерой ионизации, а в ионных двигателях на начальном этапе получают плазму РТ в объемной камере левее плоскости инжекции (см. рис.1), после чего вытягивают ионы электрическим полем в ускорительный зазор.

Процессы в ионном ускорительном зазо**ре.** Ускорение ионов силой F_{τ_i} вдоль оси z уравновешивает в центре масс силу инерции ускоряемого аппаратаи завершается выбросом факела. Ионы притягивают электрод со связанными на нем индуцированными зарядамис силой F_{TM} , что вызывает встречное ускорение центра масс аппарата в направлении против оси z (см. рис.1). Соответственно, ускоряющая аппарат сила тяги, равная F_{TM} , создается только ионами, находящимися в зазоре, и должна становиться нулевой в момент прохождения ионом плоскости выходного зазора иобласти нейтрализации, если последняя совпадает с данной плоскостью 4 (см. рис. 1).

Если использовать кинетический (механический) подход, то силу F_{π} получаем через интегрирование силы инерции вдоль пути ускорения ионов:

$$F_{Ti}(z) = \int_0^z \frac{dv(z)}{dt} dm(z), \qquad (1)$$

где dm(z) — масса каждого слоя dz, v(z) — скорость движения этого слоя.

Электродинамическим способом эту силуможно вычислить как совокупность сил Лоренца, действующих со стороны электрического поля Е на заряд dQ(z) в каждом слое dz:

$$F_{Ti}(z) = \int_0^z E(z) dQ(z)$$
 (2)

Естественно, что вычисленные значения величины силы по формулам (1) и (2) должны совпадать при заданном значении координаты z, в том числе при z = d.

Для начального тестирования алгоритма и компьютерной программы, значения физических величин, входящих в формулы (1) и (2), мы определяли через простые модели, используя, например, плоскопараллельный зазор сосплошными электродами. В таком ускорительном зазоре ионный ток аналитически задается формулой Чайльда-Ленгмюра в режиме насыщения, т. е.ограничения тока пространственным зарядом (ОТПЗ). Соответственно, инжекция ионов в ускоритель осуществляется при нулевом электрическом поле и с нулевой начальной скоростью. Поскольку поле равно нулю, то и заряд на входной поверхности равен нулю, а поляризационный заряд Q_p , равный внутреннему дрейфующему заряду Q по величине и противоположный по знаку, сосредоточен на внутренней поверхности сплошного выходного электрода. Известные формулы включают зависимость тока I от напряжения U_d по закону «3/2», распределение потенциала U(z), скорости ионов v(z), электрического поля E(z), а также полные величины силы тяги, заряда и массы ионов в зазоре [1, 2, 10, 15, 16]:

$$I = \frac{4}{9} \sqrt{2 \frac{q}{\mu}} \varepsilon_0 S U_d^{\frac{3}{2}} d^{-2},$$

$$E(z) = \frac{4}{3} U_d d^{-\frac{4}{3}} z^{\frac{1}{3}},$$

$$E_0 = \frac{U_d}{d}, E_d = \frac{4}{3} E_0,$$

$$F_{TM} = \frac{1}{2} \varepsilon_0 S E_d^2 = \frac{8}{9} \varepsilon_0 S E_0^2,$$

$$Q = \frac{4}{3} \varepsilon_0 S E_0, m = \frac{\mu}{a} Q.$$

Здесь использованы следующие обозначения: S — площадь поперечного сечения зазора; μ — масса иона; q — заряд иона; ε_0 — электрическая постоянная ($\varepsilon_0 \approx 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$).

Развивая указанную известную модель, получим новые распределения по координате z значений физических величин, в том числе силы, заряда и массы тонкого слоя dz внутри ускорительного зазора:

$$dF_{Ti}(z) = \frac{16}{27} \varepsilon_0 S E_0^2 d^{-\frac{2}{3}} z^{-\frac{1}{3}} dz, \qquad (3)$$

$$dQ(z) = \frac{4}{9} \varepsilon_0 S U_d d^{-\frac{4}{3}} z^{-\frac{2}{3}} dz.$$
 (3)

Соотношения (3) дают описание механического поля скоростей и распределение масс РТ в ускорителе. Значения физических величин удовлетворяют системе уравнений Пуассона, движения и непрерывности (при заданных граничных и начальных условиях) в объеме ускорителя, причем в квазистатическом, нерелятивистском, недиамагнитном бесстолкновительном гидродинамических приближениях. Описания сил Лоренца и Кулона в ускорителе связаны между собой законом Гаусса. Например, распределение заряда (см. формулу (3)) и электрического поля E(z) согласуется с теоремой Гаусса для каждого тонкого слоя dz и для всего зазора в целом. Из формул (2) и (3) следует зависимость силы, действующей на ионы в режиме ОТПЗ, на участке от нуля до координаты z в зазоре:

$$F_{Ti}(z) = \frac{8}{9} \varepsilon_0 S E_0^2 \left(\frac{z}{d}\right)^{\frac{2}{3}}.$$
 (4)

Соответственно, кинетическая мощность W_i ионного потока (в собственной системе отсчета аппарата) равна подводимой к ускорителю электрической мощности (без учета тепловых потерь):

$$W_{i} = \int_{0}^{d} v(z) E(z) dQ(z) =$$

$$= \frac{4}{9} \varepsilon_{0} SE_{0}^{2} v(d) = IU_{d}$$
(5)

Следовательно, в модели сплошного выходного электрода отношение силы тяги к подводимой мощности достигает наибольшего значения и определяется формулой

$$F_{TM}/W_i = \beta/\nu(d); \ \beta = 2.$$
 (6)

Однако в зависимости от формы частично открытого выходного электрода (сетка, диафрагма, вырез и другие), электрическое поле в зазоре уменьшается, в результате чего значение коэффициента $\beta < 2$. Согласно выражениям (1) – (6), для вычисления механических параметров сложного многокаскадного электростатического ускорителя прямого действия требуются пространственные распределения электрического поля E(z), заряда Q(z) и скорости v(z) ионов с учетом зарядов поляризации и объемного заряда, которые можно получить путем компьютерного моделирования. Для этого в области потоков ионов и электронов устанавливали компьютерные «мониторы» для съема данных о микроскопических процессах.

Впервые получали микроскопические параметры траекторий и характеристики физических процессов, включая распределения от координаты z вдоль оси устройства: скоростей частиц, полей E(z) и потенциалов, зарядов dQ(z) и токов, с учетом собственного электрического поля объемного заряда ионов и электронов.

На следующем этапе усложнения исследуемого физического процесса производили анализ нейтрализации ионного потока путем инжекции в этот поток пучка электронов.

Тестирование двух-, трех- и многоэлектродных конструкций ионных ускорителей

Для определения корректности и точности вычислений на начальном этапе осуществляли моделирование и тестирование простой плоской двухэлектродной модели, характеристики которой за счет выбора размеров и режимов были близки к одномерной модели в режиме ОТПЗ. Верификация методики производилась путем сопоставления с аналитическими вычислениями по формулам (1) — (6). Кроме того, тестировали известные конструкции на основе алгоритмов пушки Пирса [5, 16].

На втором этапе были реализованы трехэлектродная и затем четырех-, пяти- и шестиэлектродная модели. С помощью секционированного набора неплоских электродов задавали неоднородные граничные условия, компенсирующие рассогласование полей Лапласа и Пуассона на границах. Поверхности инжекции в ускорительный зазор задавали как гладкими плоскими, так и гладкими параболическими. В такой конфигурации мы реализовывали эмиссию различных по удельному заряду ионов в режиме ОТПЗ. На практике это означало реализацию поверхностной (контактной) ионизации [22 - 25], перспективы применения которой в ионных и ионно-плазменных ускорителях оцениваются выше, чем применяемой объемной [26, 27].

Для всех исследованных моделей были построены траектории ионов (частично показаны далее в качестве примеров), для которых с помощью компьютерных мониторов были собраны микроскопические параметры. Поверхности граничного параллелепипеда, окружающего всю конструкцию,были достаточно удалены от ускорительных зазоров и поддерживались под фиксированным нулевым потенциалом.

Примеры результатов вычислений. Типичные зависимости электронно-физических и механических параметров от координат и режимов работы для моделей ионных ускорителей с использованием ионов ксенона представлены на рис. 2–6.

Для приведенных примеров были выбраны следующие параметры двухэлектродных моделей:

напряжение U_d между пластинами — до 2 кВ,

диаметр ионного потока – 20 мм,

расстояние между пластинами d = 4 мм, площадь эмиссии S = 314 мм².

Расчеты проведены для трех конструкций:

модель A – с двумя сплошными электродами;

модель G (grid) – с одним сплошным и вторым сетчатым электродом;

модели D5 и D10 – с одним сплошнымэлектродом и вторым сетчатым, с диафрагмами диаметрами 5 мм (D5) и 10 мм (D10).

На рисунках показаны расчетные характеристики аналитических (для режима ОТПЗ ионов) и численных расчетов.

Численные результаты близки к теоретическим аналитическим кривым с наибольшим отклонением около 10%. Такое расхождение можно объяснить, во-первых, действием краевых эффектов из-за конечных размеров и открытых границ ускорительного зазора, и во-вторых, погрешностями вычисления поля и скорости частиц вблизи границы z = 0 в компьютерной модели. Внесение определенных корректировок уменьшало расхождение аналитических и компьютерных параметров до 1% и менее. Полученные результаты позволили перейти к исследованию более сложных многоэлектродных конструкций ионных двигателей.

Тестируемые простые трехэлектродные двумерные модели по своему устройству были принципиально близки к реально созданным конструкциям ионных ЭРД космических аппаратов. В типичных ионных ЭРД используют объемную ионизацию в камере, ограниченной сеткой в виде полидиафраг-



Рис. 2. Результаты численных (1) и аналитических (2) расчетов тока (a) и результирующей механической силы (b) от напряжения U_d между пластинами. Использована двухэлектродная модель A с ионами ксенона (d = 4 мм)

мированной маски [6, 10, 11]. В тестируемых трехэлектродных моделях между двумя сплошными электродами помещали сетку или сплошной электрод с диафрагмой, представляющий собой электростатическую фокусирующую линзу. На рис. 4 приведены типичные зависимости электронно-физических и механических параметров от координат и режимов работы в трехэлектродной модели с центральным электродом, установленном посередине. Для модели со сплошными электродами рассчитывались значения поля и плотности заряда вдоль оси z (см. рис. 2 и 3), для моделей с сеткой и диафрагмой вычисляли средние в поперечной плоскости поле и плотность заряда (см. рис. 4). На рис. 4 и 5 представлены функции E(z), $\rho(z)$ и F_{TM} , вычисленные на оси z без усреднения по сечениям (это не приводило к существенным ошибкам).

Сравнение данных на рис. 2, 3 и 4 показывает, что преимущества формирования ионного потока и достижения наибольшей механической силы тяги имеет двухкаскадная схема с промежуточной сеткой, подобная практическим ионным ЭРД. В этих ЭРД используют объемную ионизацию в камере, ограниченной сеткой в виде полидиафрагмированной маски [6, 10, 11].

На основе полученных данных, на следующем этапе работымы выполняли компьютерное моделирование трехмерных многоэлектродных секционированных ионных ускорителей, конструктивно нацеленных нахолловские ионно-плазменные ЭРД [6, 10, 11]. В программном пакете CST была задана предварительно выбранная многоэлектродная конструкция ионного ускорителя, типичного для конструкций холловских ионно-плазменных ЭРД. В отличие от двух- и трехэлектродных конструкций, где все поверхности наружного граничного параллелепипеда находились под заданным нулевым потенциалом, здесь была использована открытая верхняя граница (рис. 5), параметры модели приведены в подписи к рисунку. В ее основе – секционированный ионный электронно-механический ускоритель с оптимизированным формированием силы тяги и процессов нейтрализации. Как



Рис. 3. Результаты численных (1) и аналитических (2) расчетов распределений потенциала (a), плотности объемного заряда (b), электрического поля (c) и результирующей механической силы $F_{TM}(d)$ по координате z вдоль центральной оси ускорителя ионов. Использована двухэлектродная модель A с ионами ксенона (d = 4 мм); U_d = 945,74 B



Рис. 4. Результаты численных расчетов распределений плотности объемного заряда (a), электрического поля (b), результирующей механической силы F_{TM} от z и U(d) по координате z вдоль центральной оси ускорителя ионов.

Получены зависимости для моделей G (1), D5 (2) и D10 (3).

Радиус пятна эмиссии — 10 мм; потенциалы первого (φ_1 при z = 0), второго (φ_2) и третьего (φ_3) электродов φ_i , кВ: +1,0; -0,2; + 0,2, соответственно

и в основных используемых современных двигателях, нейтрализация в исследуемых устройствах осуществлялась электронным потоком. Форма и размеры электродов, прикладываемые к ним потенциалы, размер области эмиссии и величина тока заряженных частиц выбирались на основе полученных данных (см. рис. 2 и 3).

Подобные конструкции обсчитывалась при разных размерах и напряжениях внешних источников, удельной массе ионов, токовых режимах. Определялись характеристики ионных и электронных траекторий, совмещенных в ускорителе и нейтрализаторе. Оценивались возможности совмещения и выполнения заданных функций, реализации комплекса ионно-электронных процессов в едином процессе, создание виртуального электронного катода.

На рис. 5 приведено изображение одной из рассмотренных многоэлектродных конструкцийс совмещенными ионными и электронными траекториями в них. В данном примере электронный нейтрализатор ускоренных катионов был построен по принципу вложенных пучков и виртуального катода, что принципиально подобно ионно-плазменным холловским ЭРД, однако не требует применения источников магнитного поля. Это должно привести к уменьшению массы, габаритов и энергопотребления.

На рис. 6 приведены типичные зависимости электронно-физических и механических параметров от координат и режимов работы в многоэлектродной модели, показанной на рис. 5.

Изменяя в небольших пределах геометрические параметры и потенциалы электродов конструкции, представленной на рис. 5, мы производили оптимизацию ионного потока, электронно-физических и силовых характеристик. В частности, определяли условия, при которых электронный поток создает эффективную потенциальную яму для ускорения и захвата ионов. Варьирование тока электронов приводило к изменению глубины потенциальной ямы, в которую захватывались ионы. График на рис. 6, *d* демонстрирует возможность ускорения и нейтрализации ионного потока объемным зарядом электронов. Изменение тока электронов в широких пределах (17,5 мА, 1,0 и 2,0 A) приводило к изменению потенциала в области *z* > 13мм, улучшению фокусировки и нейтрализации ионного потока.

Заключение

С помощью пакета CST построен аналитический электродинамический алгоритм, объединенный с компьютерным моделированием электромагнитного поля и траекторий заряженных частиц. В алгоритме реализован принцип создания механической силы тяги в ионных ускорителях, обусловленный силовым кулоновским взаимодействием движущихся в вакууме ионов со связанными зарядами на поляризованных поверхностях элементов конструкции ускорительной камеры.



Рис. 5. Схематическое изображение модели многоэлектродной конструкции с совмещенными в ней ионными и электронными траекториями.

Источник ионов находится в нижней части конструкции, источник электронов – в средней ее части. Тоновая шкала отображает энергии частиц. Пересечение пучков происходит на уровне и выше четвертого электрода. Потенциалы электродов (в последовательности от нижнего электрода вверх) φ_i, кB: +5,0; -0,5; -1,0; +0,5; 0,0; 0,0. Значения тока ионов и электронов были равны 17,5 мА



Рис. 6. Результаты численных расчетов распределений плотности объемного заряда (a), электрического поля (b), механической силы $F_{TM}(c)$ и потенциала (d) по координате z вдоль центральной оси ускорителя ионов, а также зависимости результирующей механической силы

 $F_{_{TM}}$ от потенциала нижнего электрода (e); d-ток электронов $I_{_e},$ A: 0,0175 (I), 1,0 (2), 2,0 (3); a, b, c, e-ток ионов $I_{_i}=17,5$ мА

Методами аналитических вычислений и компьютерного моделирования (с помощью указанного пакета) рассмотрен ряд моделей электростатических ионных ускорителей. Получены зависимости численных параметров от координат, в том числе распределение механических сил, потенциала и поля, плотности заряда и тока, скорости частиц в ускорительном зазоре. Анализ полученных данных показал удовлетворительную точность, адекватность и непротиворечивость предложенных подходов.

Разработанный аппарат предоставляет широкие возможностидля исследования физических явлений и процессовв ионных и ионно-плазменных источниках, ускорителях и нейтрализаторах ЭРД, позволяет оценивать предполагаемые конструкторские решения и параметры разрабатываемых устройств, сравнивать применение в них различных рабочих тел.

Предложенный подход и разработка алгоритма на его основе позволит и в дальнейшем находить пути оптимизации реально созданных устройств, в том числе сравнивать характер физических процессов при использовании различных рабочих веществ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Форрестер Т.А.** Интенсивные ионные пучки. М.: Мир, 1992. 354с.

2. Aston G. High efficiency ion beam accelerator system // Review of Scientific Instruments.1981. Vol. 52. No. 9. Pp. 1325–1327.

3. Лебедев А.Н., Шальнов А.В. Основы физики и техники ускорителей.2-е изд., перераб. и доп. М.: Энергоатомиздат, 1991.528с.

4. **Chao A.W., Tigner M.** Handbook of accelerator physics and engineering. London: World Scientific Publishing, 1999. 650 p.

5. Морозов А.И. Плазменные ускорители и ионные инжекторы. М.: Наука, 1984. 269 с.

6. Горшков О.А., Муравлев В.А., Шагайда А.А. Холловские и ионные плазменные двигатели для космических аппаратов. Под ред. акад. РАН А.С. Коротеева. М.: Машиностроение, 2008. 280 с.

7. Гусев Ю.Г., Пильников А.В. Роль и место электроракетных двигателей в Российской космической программе // Труды МАИ (электронный журнал). 2012.Вып. № 60. С. 1–20. Режимдоступа: www.mai.ru/science/trudy/.

8. **Mazouffre S.** Electric propulsion for satellites and spacecraft: established technologies and novel approaches // Plasma Sources Sci. Technol. 2016. Vol. 25. No. 3. P. 033002.

9. Levchenko I., Xu S., Teel G., Mariotti D., Walker M.L.R., Keidar M. Recent progress and perspectives of space electric propulsion systems based on smart nanomaterials //Nature Communications. 2018. Vol. 9. No. 4. P. 879.

10. **Goebel D.M., Katz I.** Fundamentals of electric propulsion ion and Hall thrusters. Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley & Sons, 2008. Ch. 1, 6 and 7. Pp. 1–13, 243–389.

11. **Kaufman H.R.** Technology of electronbombardment ion thrusters // Advances in Electronics and Electron Physics. Vol. 36. Ed. by L. Marton, New York: Academic Press, 1975.Pp. 265–373.

12. Charles C. Plasmas for spacecraft propulsion // J. Phys. D: Applied Phys. 2009. Vol. 42. No. 16. P. 163001.

13. Cusson S.E., Dale E.T., Jorns B.A., Gallimore A.D. Acceleration region dynamics in a magnetically shielded Hall thruster // Physics of Plasmas. 2019. Vol. 26. No. 2. P. 023506.

14. Гопанчук В.В., Потапенко М.Ю. Элек-

трореактивные двигатели для малых космических аппаратов// Вестник Балтийского федерального университета им. И. Канта. 2012. Вып. 4. С. 60–67.

15. Фаворский О.Н., Фишгойт В.В., Янтовский Е.И. Основы теории космических электрореактивных двигательных установок. М.: Высшая школа, 1978. 384 с.

16. Hassan A., Elsaftawy A., Zakhary S.G. Analytical studies of the plasma extraction electrodes and ion beam formation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A. 2008. Vol. 586. No. 2. Pp. 148–152.

17. Kalentev O., Matyash K., Duras J., Lüskow K.F., Schneider R., Koch N., Schirra M. Electrostatic ion thrusters – towards predictive modeling // Contributions to Plasma Physics. 2014. Vol. 54. No. 2. Pp. 235–248.

18. Lovtsov A.S., Kravchenko D.A. Kinetic simulation of plasma in ion thruster discharge chamber. Comparison with experimental data // Procedia Engineering. 2017. Vol. 185. Pp. 326-331.

19. **Peng X., Keefert D., Ruytent W.M.** Plasma particle simulation of electrostatic ion thrusters // Journal of Propulsion and Power. 1992. Vol. 8. No. 2.Pp. 361–366.

20. **Kurushin A.** Basic course of design of microwave devices using CST Studio Suite. Moscow: One-Book, 2014.433 p.

21. **Курушин А.А., Пластиков А.Н.** Проектирование СВЧ устройств в среде CST Microwave Studio. М.: Изд-во МЭИ, 2011. 155 с.

22. Зандберг Э.Я. Поверхностно-ионизационное детектирование частиц (Обзор) // Журнал технической физики. 1995. Т.65. № 9. С. 1–38.

23. Блашенков Н.М., Лаврентьев Г.Я. Исследование неравновесной поверхностной ионизации методом полевой поверхностно-ионизационной масс-спектрометрии // Успехи физических наук. 2007. Т. 177. № 1. С. 59-85.

24. Tsybin O.Yu., Tsybin Yu.O., Hakansson P. Laser or/and electron beam activated desorption of ions: a comparative study // Desorption 2004.Papers of 10th International Conference. Saint Petersburg, 2004. P.61.

25. Tsybin O.Y., Makarov S.B., Ostapenko

O.N. Jet engine with electromagnetic field Acta Astronautica. 2016. Vol. 129. December. excitation of expendable solid-state material // Pp. 211–213.

Статья поступила в редакцию 20.01.2020, принята к публикации 08.03.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ДЮБО Дмитрий Борисович — аспирант Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 doobinator@rambler.ru

ЦЫБИН Олег Юрьевич — доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

REFERENCES

1. **Forrester T.A.,** Large ion beams: fundamentals of generation and propagation, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 1988.

2. Aston G., High efficiency ion beam accelerator system, Review of Scientific Instruments. 52 (9) (1981) 1325–1327.

3. Lebedev A.H., Shalnov A.V., Osnovy fiziki i tekhniki uskoriteley [Basic foundations of accelerators, Physics and techniques], Energoatomizdat Publisher, Moscow, 1991 (in Russian).

4. **Chao A.W., Tigner M.,** Handbook of accelerator physics and engineering, World Scientific Publishing, London, 1999.

5. **Morozov A.I.,** Plazmennyye uskoriteli i ionnyye inzhektory [Plasma accelerators and ion injectors], Nauka, Moscow, 1984 (in Russian).

6. Gorshkov O.A., Muravlev V.A., Shagayda A.A., Khollovskiye i ionnyye plazmennyye dvigateli dlya kosmicheskikh apparatov [Hall and ion plasma thrusters for spacecrafts], Ed. by Koroteyev A.S., Mashinostroyeniye, Moscow, 2008 (in Russian).

7. **Gusev Yu.G., Pilnikov A.V.,** The electric propulsion role and place within the Russian Space Program, Trudy MAI (Network scientific periodic publication) (60) (2012) 1–20. Access Mode:www.mai.ru/science/trudy/.

8. **Mazouffre S.**, Electric propulsion for satellites and spacecraft: established technologies and novel approaches, Plasma Sources Sci. Technol. 25 (3) (2016) 033002.

9. Levchenko I., Xu S., Teel G., et al., Recent progress and perspectives of space electric propulsion systems based on smart nanomaterials,

Nature Communications. 9 (4) (2018) 879.

10. **Goebel D.M., Katz I.,** Fundamentals of electric propulsion ion and Hall thrusters, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, USA Ch. 1, 6 and 7(2008) 1–13, 243–389.

11. **Kaufman H.R.,** Technology of electronbombardment ion thrusters, In the book: Advances in electronics and electron physics. Vol. 36. Ed. by L. Marton, Academic Press, New York (1975) 265–373.

12. Charles C., Plasmas for spacecraft propulsion, J. Phys. D: Applied Phys. 42 (16) (2009) 163001.

13. Cusson S.E., Dale E.T., Jorns B.A., Gallimore A.D., Acceleration region dynamics in a magnetically shielded Hall thruster, Physics of Plasmas, 26 (2) (2019) 023506.

14. **Gopanchuk V.V., Potapenko M.Yu.,** Hall effect thrusters for small-sized spacecrafts, IKBFU's Vestnik. (4) (2012) 60–67.

O.N., 15. Favorskiy Fishgoyt **V.V.**, Yantovskiy E.I., Osnovy teorii kosmicheskikh elektroreaktivnykh dvigatelnykh ustanovok Hall [Foundations of effect thrusters for Vysshaya spacecrafts], Shkola Publishing, Moscow, 1978 (in Russian).

16. Hassan A., Elsaftawy A., Zakhary S.G., Analytical studies of the plasma extraction electrodes and ion beam formation, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A. 586 (2) (2008) 148–152.

17. Kalentev O., Matyash K., Duras J., et al., Electrostatic ion thrusters – towards predictive modeling, Contributions to Plasma Physics. 54(2) (2014) 235–248. 18. Lovtsov A.S., Kravchenko D.A., Kinetic simulation of plasma in ion thruster discharge chamber. Comparison with experimental data, Procedia Engineering. 185 (2017) 326–331.

19. **Peng X., Keefert D., Ruytent W.M.,** Plasma particle simulation of electrostatic ion thrusters, Journal of Propulsion and Power. 8 (2) (1992) 361–366.

20. Kurushin A., Basic course of design of microwave devices using CST Studio Suite, One-Book, Moscow, 2014. 433 p.

21. **Kurushin A.A., Plastikov A.N.,** Proyektirovaniye SVCh ustroystv v srede CST Microwave Studio [Design of microwave devices in CST Microwave Studio], MEI Press, 2011.

22. Zandberg E.Ya., Surface-ionization

Received 20.01.2020, accepted 08.03.2020.

detection of particles (Review), Technical Physics. 40 (1995) 865–890.

23. Blashenkov N.M., Lavrent'ev G.Ya., Surface-ionization field mass-spectrometry studies of nonequilibrium surface ionization, Phys. Usp. 50 (1) (2007) 53–78.

24. **Tsybin O.Yu., Tsybin Yu.O., Hakansson P.,** Laser or/and electron beam activated desorption of ions: a comparative study, In: Desorption 2004, Papers of 10th International Conference, Saint Petersburg (2004) 61.

25. Tsybin O.Y., Makarov S.B., Ostapenko O.N., Jet engine with electromagnetic field excitation of expendable solid-state material, Acta Astronautica. 129 (December) (2016) 211–213.

THE AUTHORS

DYUBO Dmitry B.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation doobinator@rambler.ru

TSYBIN Oleg Yu.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation Federationotsybin@rphf.spbstu.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2020

Физическое материаловедение

DOI: 10.18721/JPM.13108 УДК 536.7:536.1:544.341.2:661.487.1:519.6

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТЕТРАФТОРИДА КРЕМНИЯ И ГЕКСАФТОРСИЛИКАТОВ С ВОДОРОД-И КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИМИ ВЕЩЕСТВАМИ

А.Р. Зимин¹, Д.С. Пашкевич¹, А.С. Маслова¹, В.В. Капустин¹, Ю.И. Алексеев²

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² ООО «Новые химические продукты», Санкт-Петербург, Российская Федерация

Термодинамическими расчетами показано, что в системе элементов Si-F-H-O при температуре выше 1300 К основным кремнийсодержащим веществом является диоксид кремния, а основным фторсодержащим — фторид водорода. Указанная температура реализуется при проведении реакций взаимодействия тетрафторида кремния и фторсиликатов с водородсодержащими и кислородсодержащими веществами в режиме горения. Высокотемпературная обработка тетрафторида кремния и фторсиликатов в режиме горения может стать основой промышленной технологии производства фторида водорода.

Ключевые слова: тетрафторид кремния, фторид водорода, диоксид кремния, термодинамическое равновесие, энергия Гиббса

Ссылка при цитировании: Зимин А.Р., Пашкевич Д.С., Маслова А.С., Капустин В.В., Алексеев Ю.И. Термодинамический анализ процессов взаимодействия тетрафторида кремния и гексафторсиликатов с водород- и кислородсодержащими веществами // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 92–105. DOI: 10.18721/JPM.13108

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

THE INTERACTION PROCESSES OF SILICON TETRAFLUORIDE AND HEXAFLUOROSILICATES WITH HYDROGEN-CONTAINING AND OXYGENATED SUBSTANCES: A THERMODYNAMIC ANALYSIS

A.R. Zimin¹, D.S. Pashkevich¹, A.S. Maslova¹, V.V. Kapustin¹, Yu.I. Alexeev²

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

² LTD "New Chemical Products", St. Petersburg, Russian Federation

In the paper, the thermodynamic calculations have shown that at the temperatures above 1300 K, the main silicon-containing substance is silicon dioxide in the Si-F-H-O element system, and the main fluorine-containing one is hydrogen fluoride in the same system. The mentioned temperature was realized during the interaction reactions between silicon tetrafluoride, fluorosilicates and hydrogen-containing, oxygen-containing substances in the combustion mode. The high-temperature treatment of silicon tetrafluoride and fluorosilicates in the combustion mode can become the basis of industrial technology for hydrogen fluoride production.

Keywords: silicon tetrafluoride, hydrogen fluoride, silicon dioxide, thermodynamic equilibrium, Gibbs energy

Citation: Zimin A.R., Pashkevich D.S., Maslova A.S., Kapustin V.V., Alexeev Yu.I., The interaction processes of silicon tetrafluoride and hexafluorosilicates with hydrogen-containing and oxygenated substances: a thermodynamic analysis, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 92–105. DOI: 10.18721/JPM.13108

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

Введение

Фторид водорода НF является основным фторирующим агентом при производстве фторидов урана в ядерном топливном цикле, хладонов, электронных газов и др. Производство безводного HF достигает 1,5 млн. тонн в год [1, 2].

Фторид водорода получают из плавикового шпата (природный CaF₂) методом сернокислотного разложения [1]:

$$CaF_{2 \, sol} + H_2SO_{4 \, liq} \rightarrow CaSO_{4 \, sol} + 2HF_{gas}.$$
(1)

Здесь нижние буквенные индексы выражают агрегатные состояния веществ: твердое (*sol*), жидкое (*liq*) и газообразное (*gas*).

Для производства HF используют только высококачественный плавиковый шпат с содержанием основного вещества не менее 95 % и примесью диоксида кремния не более 1,5 % [1, 2].

Ежегодное мировое производство плавикового шпата превышает 4 млн. тонн. Основными его производителями являются Китай (свыше 50% всего мирового выпуска), Мексика, Монголия, ЮАР [1, 2].

В Российской Федерации запасы плавикового шпата, необходимого для получения фторида водорода, истощены, и его приходится импортировать. Поэтому разработка альтернативных способов получения фторида водорода является актуальной задачей.

При производстве экстракционной фосфорной кислоты из фторапатита, где используют реакцию

$$Ca_{5}(PO_{4})_{3}F_{sol} + 5H_{2}SO_{4liq}$$
(2)
$$\rightarrow 3H_{3}PO_{4liq} + 5CaSO_{4sol} + HF_{gas}$$

образуется значительное количество фторида водорода, который при взаимодействии с диоксидом кремния SiO₂ (примесь во фторапатите) образует тетрафторид кремния SiF₄:

$$\text{SiO}_{2 \text{ sol}} + 4\text{HF}_{gas} \leftrightarrow \text{SiF}_{4 \text{ gas}} + 2\text{H}_{2}\text{O}_{gas}.$$
 (3)

Указанный тетрафторид затем гидролизуют, и полученную гексафторкремниевую кислоту H_2SiF_6 нейтрализуют, а твердые фторсодержащие отходы размещают на шламовых полях.

Количество этих отходов, обращающихся при переработке фторапатита, в пересчете на фтор, составляет около 2 млн. тонн в год. Поэтому данные отходы переработки фторапатита могут стать основным промышленным источником фтора.

В системе химических элементов Si-F-H-O существует большое количество соединений. Часть из них и сведения о взаимодействии этих веществ с водой, водородом и кислородом представлены в табл. 1 [3 - 13]. Из приведенных данных следует, что наиболее стабильными веществами в системе элементов Si-F-H-O являются SiO₂, HF, SiF₄, H₂O; кроме того, видно, что фторид водорода можно получить гидролизом тетрафторида кремния.

Определение температурной области

Для того чтобы определить область температуры, в которой целесообразно проводить гидролиз фторида кремния, необходимо провести расчет зависимости изменения энергии Гиббса от температуры для следующего процесса:

$$SiF_{4 gas} + 2H_2O_{gas} \leftrightarrow SiO_{2 sol} + 4HF_{gas}$$
. (4)

Известно более десяти кристаллических модификаций SiO₂. Наиболее устойчивыми из них являются β-кварц, β-тридимит и β-кристобалит, температуры плавления которых составляют 1550, 1680 и 1720 °С соответственно [4]. Теплоемкости и другие термодинамические параметры указанных кристаллических модификаций различаются незначительно (на единицы процентов), поэтому дальнейшие расчеты мы проводили для одной модификации — β-тридимита.

Методика расчета изменения энергии Гиббса приведена в работе [14]. График

Таблица 1

Соединение	Взаимодействие с водой	Характерная реакция
$\begin{array}{c} {\rm SiF_4}\\ {\rm Si_2F_6} \end{array}$	$\begin{array}{c} 3\mathrm{SiF}_{4}+2\mathrm{H_{2}O}\rightarrow\mathrm{SiO}_{2}+2\mathrm{H_{2}[SiF}_{6}]\\ (T=100\ ^{\circ}\mathrm{C}),\\ \mathrm{SiF}_{4}+2\mathrm{H_{2}O}\rightarrow\mathrm{SiO}_{2}+4\mathrm{HF}\\ (T>800\ ^{\circ}\mathrm{C}) \end{array}$	$\operatorname{Si}_{2}F_{6} \rightarrow \operatorname{SiF}_{2} + \operatorname{SiF}_{4}(700 \ ^{\circ}\mathrm{C})$
H_2SiF_6	Существует только в водном растворе	$\mathrm{H_2SiF_6} \rightarrow \mathrm{SiF_4} + \mathrm{HF}$
$\begin{array}{c} H_{3}SiF\\ H_{2}SiF_{2}\\ HSiF_{3}\end{array}$	$H_3SiF + H_2O \rightarrow 2HF + (SiH_3)_2O$	$2H_{3}SiF \rightarrow SiH_{4} + H_{2}SiF_{2},$ $4HSiF_{3} \rightarrow 3SiF_{4} + Si + 2H_{2}$ (20 °C)
$SiH_4, Si_2H_6, Si_3H_8, (SiH_x)_4$	$\begin{array}{c} \mathrm{SiH}_{4}+2\mathrm{H}_{2}\mathrm{O} \rightarrow \mathrm{SiO}_{2}+4\mathrm{H}_{2},\\ \mathrm{Si}_{2}\mathrm{H}_{6}^{}+4\mathrm{H}_{2}^{}\mathrm{O} \rightarrow 2\mathrm{SiO}_{2}+7\mathrm{H}_{2} \end{array}$	$\begin{array}{c} \mathrm{SiH_4^{+}2O_2 \rightarrow SiO_2^{+}2H_2O,}\\ \mathrm{SiH_4 \rightarrow Si+2H_2}\\ (400-1000\ ^\circ\mathrm{C}) \end{array}$
H ₂ SiO ₃ , H ₄ SiO ₄	Малорастворимы	$H_2SiO_3 \rightarrow H_2O + SiO_2$
SiO, SiO ₂	$\frac{\text{SiO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{SiO}_2 + \text{H}_2}{(T \ge 500 \text{ °C})^2}$	$SiO_2 + 2H_2 \rightarrow Si + 2H_2O$ (800 °C)

Физико-химические свойства соединений кремния



Рис. 1. График температурной зависимости изменения энергии Гиббса для реакции гидролиза тетрафторида кремния (4)

температурной зависимости теплоемкости мы аппроксимировали полиномом первой степени. Результаты расчета представлены на рис. 1.

Реакция (4) является обратимой (↔); скорость прямой реакции равна скорости обратной при температуре 1170 К (для удобства изложения далее она именуется критической T_{cr}). Следовательно, чтобы получать фторид водорода из фторида кремния, нужно проводить гидролиз последнего при температуре выше T_{cr} и быстро охлаждать продукты при температуре ниже T_{cr} .

Для реализации высокотемпературного гидролиза предлагается проводить обработку SiF₄ в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя:

$$SiF_{4 gas} + x_{1}C_{m}H_{n}O_{k}N_{1 gas} + x_{2}O_{2 gas} \rightarrow$$

$$\rightarrow SiO_{2 sol/liq} + 4HF_{gas} +$$

$$+ y_{1}CO_{y gas} + y_{2}N_{2 gas} - Q,$$
(5)

где С_{*m*} H_{*n*}O_{*k*}N_{*l*} – летучее водородсодержащее вещество, $m \ge 0$, n > 0, $k \ge 0$, $l \ge 0$; $nx_1 \ge 4$, $2x_2 > 2$, y = 1; 2; тепловой эффект реакции $Q \sim 10^2 - 10^3$ кДж; адиабатическая температура продуктов реакции $T_{ad} > 10^3$ К.

В качестве водородсодержащего топлива предложено рассмотреть водород, метан и аммиак, а кислородсодержащего окислителя — кислород и воздух.

Продукты процесса в данном случае представляют собой слабо запыленный газопылевой поток, т.е.

$$V_{sol}/V \sim 10^{-5}$$
,

где V_{sol} , V – объемы твердой фазы и всех продуктов процесса соответственно.

В связи с этим охлаждение потока целесообразно проводить в конвективном теплообменнике типа «труба в трубе».

В табл. 2 приведены значения теплового эффекта реакции и адиабатической темпе-

ратуры продуктов T_{ad} для процесса (5). Гетерогенный факел теряет до 40 % выделяющейся энергии за счет теплового излучения [15]. Поэтому в табл. 2 приведены значения температуры продуктов реакции T_{rad} , рассчитанные с учетом этой потери.

В табл. 3 приведены зависимости T_{ad} и T_{rad} от начальной температуры реагентов для трех кристаллических модификаций SiO₂ для процесса, протекающего по реакции

$$SiF_{4 gas} + 2H_{2 gas} + O_{2 gas} \rightarrow \rightarrow SiO_{2 sol/liq} + 4HF_{gas}.$$
(6)

Из данных табл. З следует, что для всех случаев значения T_{ad} и T_{rad} существенно выше значения T_{cr} , и, следовательно, целесообразно реализовывать процесс получения фторида водорода из тетрафторида кремния по схеме (5). Кроме того, видно, что значения T_{ad} и T_{rad} слабо зависят от структуры кристаллической формы SiO₂.

На рис. 2 представлена за́висимость изменения энергии Гиббса ΔG от температуры в диапазоне 300 — 1800 К для реакций (6) — (8) при соотношении исходных компонентов, которые соответствуют получению SiO₂ и HF:

Таблица 2

Реакция		T _{ad}	T _{rad}
г сакция	кДж	K	-
$\mathrm{SiF}_{4gas} + 2\mathrm{H}_{2gas} + \mathrm{O}_{2gas} \rightarrow \mathrm{SiO}_{2sol/liq} + 4\mathrm{HF}_{gas}$	384	2491	1843
$3SiF_{4 gas} + 4NH_{3 gas} + 3O_{2 gas} \rightarrow \rightarrow 3SiO_{2 sol/liq} + 12HF_{gas} + 2N_{2 gas}$	969	2083	1562
$SiF_{4 gas} + CH_{4 gas} + 2O_{2 gas} \rightarrow \rightarrow SiO_{2 sol/liq} + 4HF_{gas} + CO_{2 gas}$	703	3020	2214
$\begin{array}{c} \mathrm{SiF}_{4gas} + 2\mathrm{H}_{2gas} + \mathrm{O}_{2gas} + 4\mathrm{N}_{2gas} \rightarrow \\ \rightarrow \mathrm{SiO}_{2sol/liq} + 4\mathrm{HF}_{gas} + 4\mathrm{N}_{2gas} \end{array}$	384	1836	1407
$3\mathrm{SiF}_{4gas} + 4\mathrm{NH}_{3gas} + 3\mathrm{O}_{2gas} + 12\mathrm{N}_{2gas} \rightarrow \\ \rightarrow 3\mathrm{SiO}_{2sol/liq} + 12\mathrm{HF}_{gas} + 14\mathrm{N}_{2gas}$	969	1598	1248
$SiF_{4 gas} + CH_{4 gas} + 2O_{2 gas} + 8N_{2 gas} \rightarrow \rightarrow SiO_{2 sol/liq} + 4HF_{gas} + CO_{2 gas} + 8N_{2 gas}$	703	1982	1501

Значения основных тепловых параметров для реакций взаимодействия тетрафторида кремния с рядом веществ ($T_0 = 500$ K)

Обозначения: Q – тепловой эффект; T_{ad} , T_{rad} – адиабатическая и радиационная температуры; T_0 – температура исходных реактивов.

Таблица 3

T_0	T_{ad}	T_{rad}	T_{ad}	T_{rad}	T_{ad}	T_{rad}
	β-кварц		β-тридимит		β-кристобалит	
400	_	_	2544	1760	_	_
600	_	_	2886	2120	2812	2055
800	_	_	3226	2476	3161	2415
1000	3547	2803	3563	2829	3508	2773

Зависимость температурных параметров реакции (6) от начальной температуры реагентов для различных кристаллических форм диоксида кремния

Примечание. Все значения температуры приведены в градусах Кельвина (К).

$$3\mathrm{SiF}_{4\,gas} + 4\mathrm{NH}_{3\,gas} + 3\mathrm{O}_{2\,gas} \rightarrow (7)$$

$$\rightarrow 3\mathrm{SiO}_{2\,sol} + 12\mathrm{HF}_{aas} + 2\mathrm{N}_{2\,gas}, \qquad (7)$$

$$\operatorname{SiF}_{4\,gas} + \operatorname{CH}_{4\,gas} + 2\operatorname{O}_{2\,gas} \rightarrow$$

$$\rightarrow \text{SiO}_{2 \text{ sol}} + 4\text{HF}_{gas} + \text{CO}_{2 \text{ gas}}.$$
(8)

Как видно из графика на рис. 2, значения ΔG отрицательны для рассмотренных процессов, следовательно, проведение процессов (6) — (8) термодинамически не запрещено для указанного температурного диапазона.

На рис. 3 представлены зависимости

изменения энергии Гиббса ΔG от температуры для β -кварца, β -тридимита и β -кристобалита для процесса (6).

Изменение энергии Гиббса в реакции (8) слабо зависит от структуры кристаллической модификации SiO₂ — различие значений ΔG не превышает 5%.

Как отмечено ранее, в системе элементов Si-F-H-O наиболее термостабильными являются SiO₂, SiF₄, H₂O и HF. Расчет термодинамически равновесного состава веществ в этой системе элементов осуществляли методом минимизации энергии Гиббса для смеси, варьируя концентрации компонентов при заданном соотношении количества атомов [16]:



Рис. 2. Температурные зависимости изменения энергии Гиббса для реакций (6) (1), (7) (2) и (8) (3)



Рис. 3. Температурные зависимости изменения энергии Гиббса для процесса (6) при использовании трех кристаллических модификаций диоксида кремния: β-кварца (1), β-тридимита (2) и β-кристобалита (3)

$$x_{1}\mathrm{SiF}_{4 gas} + x_{2}\mathrm{H}_{2 gas} + x_{3}\mathrm{O}_{2 gas} \rightarrow$$

$$\rightarrow y_{1}\mathrm{SiO}_{2 sol} + y_{2}\mathrm{SiF}_{4 gas} +$$

$$+ y_{3}\mathrm{HF}_{gas} + y_{4}\mathrm{H}_{2}\mathrm{O}_{gas},$$
(9)

где x_i, y_i — стехиометрические коэффициенты.

Уравнения баланса атомов имеют следующий вид:

Si:
$$y_1 + y_2 = x_1$$
; H: $4y_2 + y_3 = 4x_1$; (10)
F: $y_3 + 2y_4 = 2x_2$; O: $2y_1 + y_4 = 2x_3$.

Если выразить y_2 , y_3 , y_4 через x_1 , x_2 , x_3 и y_1 , т. е.

$$y_2 = x_1 - y_1; y_3 = 4y_1; y_4 = x_2 - 4y_1,$$

то получаем:

$$\sum G(x_1, x_2, y_1) = y_1 G(\text{SiO}_{2 \text{ sol}}) + (x_1 - y_1) G(\text{SiF}_{4 \text{ gas}}) + 4y_1 G(\text{HF}_{\text{gas}}) + (11) + (x_2 - 4y_1) G(\text{H}_2\text{O}_{\text{gas}}).$$

При зафиксированных значениях x_1 , x_2 , x_3 мы варьировали значение y_1 с шагом 0,001, строили матрицу, а затем методом сравнения выбирали ее минимум.

На рис. 4 приведены температурные зависимости концентрации продуктов процесса (6) в термодинамически равновесной смеси, рассчитанные с использованием созданной модели [16].

При температуре выше 1300 К основным кремнийсодержащим веществом в системе элементов Si-F-H-O является SiO₂. а основным фторсодержащим – HF; при

этом концентрация SiF_4 не превышает 3%, а $H_2O - 8$ %.

Расчеты в программном комплексе «АСТРА»

Авторами данной статьи была проведена верификация модели с использованием программного комплекса «АСТРА», который позволяет рассчитать термодинамически равновесный состав методом максимизации энтропии [17]. Результаты расчета для системы элементов Si-4F-4H-2O приведены в табл. 4.

Таблица 4

Термодинамически равновесные составы веществ (мол.%) в системе элементов Si-4F-4H-2O в зависимости от температуры

<i>Т</i> , К	H ₂ O	HF	SiO ₂	SiF ₄
500	64,5	2,2	0,5	32,5
700	57,3	10,8	2,7	28,9
900	46,1	24,3	6,1	23,3
1100	35,3	37,3	9,3	17,8
1300	26,9	47,4	11,9	13,6
1500	20,8	54,6	13,7	10,6
1700	16,7	59,6	14,9	8,5
1900	13,7	63,1	15,8	7,1

Примечания. 1. Приведенные данные рассчитаны с использованием программного комплекса «АСТРА». 2. Содержание кислорода О₂ при всех значениях температуры было менее 0,2 мол.%.



Рис. 4. Температурные зависимости концентрации SiO₂ (1), SiF₄ (2), H₂O (3) и HF (4) в системе элементов Si-F-H-O

(термодинамически равновесная смесь SiF₄-2H₂-O₂, т. е. $x_1 = x_3 = 1, x_2 = 2$)

Результаты расчета в программном пакете «АСТРА» качественно совпадают с соответствующими расчетными данными по термодинамически равновесным составам, полученными с помощью метода, который был разработан и использован авторами данного исследования.

Кроме того, с использованием «АСТРЫ» были проведены расчеты термодинамически равновесных составов веществ в системе элементов Si-4F-C-4H-4O. Результаты расчета представлены в табл. 5.

Т	а	б	Л	И	П	а	- 5
	÷	~		**		~	-

Термодинамически равновесные составы веществ (мол.%) в системе элементов Si-4F-4H-1C-4O в зависимости от температуры

<i>Т</i> , К	H ₂ O	HF	CO ₂	SiO ₂	SiF ₄
500	48,6	1,7	24,7	0,4	24,4
700	43,3	8,8	23,9	2,2	21,7
900	35,1	19,8	22,5	5,0	17,6
1100	27,0	30,6	21,1	7,6	13,5
1300	20,7	39,0	20,1	9,8	10,4
1500	16,1	45,1	19,3	11,3	8,1
1700	12,9	49,3	18,8	12,3	6,5
1900	10,6	52,3	18,2	13,1	5,4

Примечание. Приведенные данные рассчитаны с использованием программного комплекса «ACTPA».

В системе элементов Si-4F-4H-1C-4O при температуре выше 1100 К основным фторсодержащим веществом является фтористый водород. При достижении температуры в 1900 К содержание фтористого водорода в термодинамически равновесной смеси составило около 50 мол.%, а содержание тетрафторида кремния — примерно 5 мол.%.

Таким образом, из анализа результатов расчета термодинамически равновесного состава веществ в системах элементов Si-F-H-O и Si-F-H-C-O, можно предположить, что при обработке SiF₄ в пламени водород-содержащего топлива и кислородсодержащего окислителя при температуре выше 1300 К основным фторсодержащим веществом может быть HF, а основным кремнийсодержащим — SiO₂. Из водного раствора H₂SiF₆ и SiF₄ могут

Из водного раствора H_2SiF_6 и SiF_4 могут быть получены гексафторосиликаты металлов и аммония [18, 19]:

$$H_{2}SiF_{6 liq} + 2NaCl_{liq} \rightarrow$$

$$\rightarrow Na_{2}SiF_{6 sol} + 2HCl_{liq}, \qquad (12)$$

$$\begin{array}{l} \mathrm{H}_{2}\mathrm{SiF}_{6\,liq} + 2\mathrm{NH}_{4}\mathrm{OH}_{liq} \rightarrow \\ \rightarrow (\mathrm{NH}_{4})_{2}\mathrm{SiF}_{6\,liq}, \end{array}$$
(13)

$$2\mathrm{NH}_{4}\mathrm{F}_{liq} + \mathrm{SiF}_{4\,liq} \rightarrow$$

$$\rightarrow (\mathrm{NH}_{4})_{2}\mathrm{SiF}_{6\,liq}, \qquad (14)$$

$$H_{2}SiF_{6liq} + CaCO_{3} \rightarrow$$

$$CaSiF_{6sol} + H_{2}CO_{3liq}.$$
(15)

Поэтому целесообразно исследовать термодинамическую возможность получения фторида водорода из гексафторсиликатов в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя.

В литературных источниках не обнаружено данных по термодинамическим функциям гексафторсиликатов CaSiF₆, $(NH_4)_2SiF_6$, Na_2SiF_6 , однако эти соли термически нестабильны при температуре выше 370, 250 и 600 °C соответственно [7]:

$$\operatorname{CaSiF}_{6 \, sol} \to \operatorname{CaF}_{2 \, sol} + \operatorname{SiF}_{4 \, gas}, \quad (16)$$

$$(\mathrm{NH}_{4})_{2}\mathrm{SiF}_{6\,sol} \rightarrow$$

$$\rightarrow 2\mathrm{NH}_{3\,sol} + \mathrm{SiF}_{4\,gas} + 2\mathrm{HF}_{gas}, \qquad (17)$$

$$\operatorname{Na}_{2}\operatorname{SiF}_{6 \, sol} \rightarrow 2\operatorname{NaF}_{sol} + \operatorname{SiF}_{4 \, gas}.$$
 (18)

Поэтому дальнейшие расчеты мы проводили для продуктов их разложения.

Для реакций гидролиза фторидов натрия и кальция уравнения имеют вид

$$NaF_{sol} + H_2O_{gas} \rightarrow$$
 (19)

$$\rightarrow$$
 NaOH _{sol/liq} + HF_{gas},

$$CaF_{2 sol} + H_2O_{gas} \rightarrow$$

$$\rightarrow CaO_{sol} + 2HF_{gas}.$$
(20)

Для них были рассчитаны значения изменения энергии Гиббса в зависимости от температуры. Установлено (рис. 5), что для этих реакций изменение энергии Гиббса следует неравенству $\Delta G > 0$ во всем изученном температурном диапазоне. Следовательно, протекание реакций (19) и (20) термодинамически запрещено в интервале температур T = 300 - 2000 К.

Наличие локального максимума на кривой 2 (см. рис. 5) связано с тем, что при температуре 1424 К происходит изменение кристаллической решетки фторида кальция, а при 1691 К это соединение плавится [5].

В табл. 6 приведены результаты расчетов теплового эффекта реакций, температур T_{ad} и T_{rad} для процессов взаимодействия продуктов термического разложения гексафторосиликатов в пламени водородсодержащего топлива и кислорода при соотношении исходных компонентов, соответствующих получению SiO₂ и HF при исходной температуре $T_0 = 500$ К. В случае гексафторосиликата аммония водородсодержащее топливо содержится в самой молекуле гексафторосиликата.

Значения T_{rad} в табл. 6 существенно превышают значение T_{cr} , полученное для SiF₄ (см. рис. 1), и, следовательно, гидролиз SiF₄ в рассмотренных процессах (см. табл. 6) термодинамически возможен. Следует отметить, что фториды натрия и кальция не гидролизуются в интервале температур T = 300 - 2000 K, поэтому регенерация фтора из гексафторосиликатов этих элементов возможна лишь на 67%.

На рис. 6 приведена зависимость изменения энергии Гиббса ΔG от температуры в диапазоне 300 — 1800 К для реакций взаимодействия продуктов термического разложения гексафторосиликатов с водородсодержащими веществами и кислородом (все реакции в табл. 6).



Рис. 5. Температурные зависимости изменения энергии Гиббса для реакций гидролиза фторидов натрия (1) и кальция (2)

Таблица б

Реакция	-ОкЛж	T _{ad}	T_{rad}
i curdin	2, 174m	Κ	
$ \begin{array}{ c c c c c c c c } \hline SiF_{4 gas} + 2NH_{3 gas} + 2HF_{gas} + 1,5O_{2 gas} \rightarrow \\ \rightarrow N_{2 gas} + SiO_{2 sol/liq} + 6HF_{gas} + H_{2}O_{gas} \end{array} $	539	2211	1643
$2\text{NaF}_{sol} + \text{SiF}_{4gas} + \text{CH}_{4gas} + 2\text{O}_{2gas} \rightarrow 2\text{NaF}_{sol} + \text{SiO}_{2sol/liq} + 4\text{HF}_{gas} + \text{CO}_{2gas}$	708	2354	1763
$ \begin{array}{ c c c c c } \hline CaF_{2 sol} + SiF_{4 gas} + CH_{4 gas} + 2O_{2 gas} \rightarrow \\ \rightarrow CaF_{2 sol} + SiO_{2 sol/liq} + 4HF_{gas} + CO_{2 gas} \end{array} $	708	2687	1978

Значения основных тепловых параметров для реакций
взаимодействия продуктов термического разложения
гексафторосиликатов с рядом вешеств (T = 500 K)

Обозначения параметров приведены в подписи к табл. 2



 $\Delta G, kJ$

Рис. 6. Температурные зависимости изменения энергии Гиббса для реакций взаимодействия продуктов термического разложения гексафторосиликатов с водородсодержащими веществами и кислородом.

Номера кривых соответствуют последовательности реакций, представленных в табл. 6

Значения изменения энергии Гиббса отрицательны в исследованном диапазоне температуры, следовательно, все реакции, сведенные в табл. 6, термодинамически не запрещены.

При охлаждении газопылевого потока, который формируется при соединении реагентов

$$\operatorname{SiO}_{2 \operatorname{sol}} + 4\operatorname{HF}_{\operatorname{aas}},$$
 (21)

при температуре ниже 1170 К будет протекать реакция фторирования SiO₂:

$$\text{SiO}_{2 \text{ sol}} + 4\text{HF}_{gas} \rightarrow \text{SiF}_{4 \text{ gas}} + 2\text{H}_2\text{O}_{gas}.$$
 (22)

Поэтому поток (21) нужно охлаждать с возможно более высокой скоростью.

Расчет параметров теплообмена

В литературе не встречается описания кинетических моделей для реакции (22). Поэтому количественно оценить необходимую скорость охлаждения не представляется возможным.

Были сделаны оценки характерного времени охлаждения газопылевого потока (21) и параметров конвективного теплообменника типа «труба в трубе» с термостатированной стенкой для расходов SiF₄, соответствующих пилотному и промышленному масштабам установок, на основании данных работы [20].

Число Нуссельта для газопылевого потока мы вычисляли по следующим соотношениям:

$$Nu_{n} = 0,023 \operatorname{Re}_{n}^{0,8} \operatorname{Pr}_{n}^{0,4} =$$

$$= \operatorname{Nu}(1+\mu)^{0,8}(1-\beta)^{1,12} \left(\frac{1+C_{sol}\mu C_{gas}^{-1}}{1+\mu}\right)^{0,4}, \quad (23)$$

$$\mu = \frac{G_{sol}}{G_{gas}} = \frac{\beta}{1-\beta} \frac{\rho_{sol} V_{sol}}{\rho_{gas} V_{gas}},$$

$$\beta = \frac{F_{sol}}{1-\beta} = \frac{\mu}{1-\beta} \frac{\mu}{\rho_{gas}} \left(\frac{24}{\beta}\right)$$

$$\beta = \frac{T_{sol}}{F_s} = \frac{T_{sol}}{F_{sol} + F_{gas}} = \frac{\mu}{\left(\frac{\rho_{sol}V_{sol}}{\rho_{gas}V_{gas}}\right) + \mu},$$

где G_{sol} , V_{sol} – расход и скорость движения порошка; G_{gas} , V_{gas} – расход и скорость движения газа; C_{sol} , C_{gas} – теплоемкости твердой компоненты и газа; ρ_{sol} , ρ_{gas} – плотности твердой фазы и газа, соответственно; μ – расходная концентрация; β – истинная объемная концентрация твердого компонента; F_{sol} , F_{gas} – объемы твердой компоненты и газа, соответственно; F_{s} – объем системы.

В табл. 7 приведены характеристики охлаждения слабозапыленного ($\beta = 2 \cdot 10^{-5}$ при T = 1100 K) потока (21) при температурах от 1100 до 500 K и теплообменника в зависимости от расхода SiF₄ и диаметра цилиндрического теплообменника.

Из результатов, приведенных в табл. 7, следует, что характерное время охлаждения

потока от 1170 до 500 К составляет величину порядка 10^{-2} с при диаметре теплообменника порядка десятков миллиметров и его длине порядка единиц метров, а также при перепаде давления в теплообменнике на уровне 1,5 кПа. При диаметре теплообменника 20 мм время охлаждения составляет 0,02 секунды, поэтому такой диаметр считается более предпочтительным.

Основные результаты работы и выводы

С целью регенерации фтора из фторсодержащего сырья проведен анализ существующих методов получения фтористого водорода. Проведены термодинамические расчеты адиабатической температуры, изменения энергии Гиббса и равновесного состава продуктов реакции взаимодействия тетрафторида кремния с водород- и кислородсодержащими веществами.

Анализ полученных данных термодинамических расчетов позволил сделать следующие выводы.

Гидролиз SiF_4 с целью получить SiO_2 и HF целесообразно проводить при температуре выше 1170 К с последующим охлаждением продуктов с высокой скоростью.

При обработке SiF₄ в пламени водородсодержащего топлива (H₂, CH₄, NH₃) и кислородсодержащего окислителя (кислород, воздух) температура продуктов реакции с учетом теплового излучения гетерогенного пламени оказывается существенно выше 1170 К. Структура кристаллической формы SiO₂ практически не влияет на значения адиабатической (T_{ad}) и радиационной (T_{rad}) температур, которые превышают 1500

Таблица 7

Характеристики теплообменника и слабозапыленного потока (21) в зависимости от диаметра теплообменника

<i>D</i> , мм	$\alpha, Bt \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$	<i>L</i> , м	и, м/с	ΔP , кПа	<i>t</i> , c	Re	Re _f
20	382	0,68	81	1,47	0,02	16280	24635
30	184	0,94	36	0,29	0,05	10847	16413

Обозначения: D, L – диаметр и длина теплообменника, α – коэффициент теплоотдачи; u – скорость газопылевого потока; $\Delta P, t$ – перепад давления в теплообменнике и время охлаждения газопылевого потока при снижении температуры от 1170 до 500 К; Re, Re_f – числа Рейнольдса для газового и газопылевого потоков.

Примечание. Представлены расчетные данные для расхода фторида кремния 10 г/с (промышленное значение – 300 т/год); температура стенки теплообменника $T_{wall} = 100$ °C.

и 1200 К соответственно.

При температуре выше 1300 К в термодинамически равновесной смеси веществ в системе элементов Si-4F-4H-2O основным кремнийсодержащим веществом является SiO₂, а основным фторсодержащим – HF. Содержание SiF₄ составляет не более 3%, воды – не более 8% (оценка по методу минимизации энергии Гиббса).

Расчетные результаты в программном пакете «АСТРА» указывают на то, что содержание SiF₄ и H₂O в термодинамически равновесной смеси при температуре 1900 К составляют 7 и 14 % соответственно. Для системы элементов Si-4F-1C-4H-4O расчет с помощью данного программного пакета показал, что при температуре 1900 К основным фторсодержащим веществом является фтористый водород, содержание SiF₄ в термодинамически равновесной смеси — около 5%, содержание углекислого газа — 18% и воды — 10%.

Получить HF и SiO₂ в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя можно при использовании в качестве сырья соединений CaSiF₆, Na₂SiF₆, (NH₄)₂SiF₆ и др. – термодинамически эти процессы не запрещены, а температура их продуктов $T_{rad} > 1170$ К. При этом гидролиз фторидов кальция и натрия термодинамически запрещен в интервале температур T = 300 - 2000 К. Поэтому регенерация фтора из гексафторосиликатов натрия и кальция возможна лишь на 67 %.

Поток (SiO_{sol} + 4HF_{gas}) классифицируется как слабозапыленный, поэтому его охлаждение целесообразно осуществлять в конвективном теплообменнике типа «труба в трубе». Время охлаждения в температурном интервале от 1170 до 500 К может составить величину порядка 10^{-2} с.

Переработка SiF₄ или фторосиликатов в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя может стать основой метода получения фторида водорода.

Разработка технологии получения фторида водорода из фторсодержащих побочных продуктов и отходов производства фосфатных удобрений проведена их обработкой в пламени метана и кислорода на экспериментальной установке № 05.608.21.0277. Идентификационный: RFMEFI60819X0277

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hydrogen fluoride. The essential chemical industry – online. University of York, UK. URL: http://www.essentialchemicalindustry.org/chemicals/hydrogen-fluoride.html.

2. Обзор рынка флюорита (плавикового шпата) в СНГ. М.: Исследовательская группа Информайн. Изд. 8-е, 2016. 87 с.

3. Глушко В.П. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание (3-е изд.). В 4-х тт. М.: Наука, 1979.

4. Лидин Р.А., Молочко В.А., Андреева Л.Л. Химические свойства неорганических веществ. 3-е изд., испр. Под ред. Р.А. Лидина. М.: Химия, 2000. 480 с.

5. Химическая энциклопедия. В 5 тт. Т. 2: Д – М. Редколлегия: Кнунянц И.Л. (гл. ред.) и др. М.: Советская энциклопедия, 1990. 671 с.

6. Гофман У., Рюдорф В., Хаас А., Шенк П.В., Губер Ф., Шмайсер М., Баудлер М., Бехер Х.-Й., Дёнгес Э., Шмидбаур Х., Эрлих П., Зайферт Х.И. Руководство по неорганическому синтезу. Пер. с нем. / Под. ред. Г. Брауэра. В 6 тт. Т. 3. М.: Мир, 1985. 392 с.

7. Некрасов Б.В. Основы общей химии. Изд. 3-е., испр. и доп. В 2 тт. Т. 1. М.: Химия,

1973. 656 c.

8. Фтор и его соединения. Пер. с англ. Под ред. Д. Саймонса. В 2 тт. Т. 1. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1953. 510 с.

9. Рысс И.Г. Химия фтора и его неорганических соединений. М.: Гос. науч.-техн. издво хим. лит-ры, 1956. 718 с.

10. **Реми Г.** Курс неорганической химии. Пер. с нем. Т. 1. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1963. 922 с.

11. Химическая энциклопедия В 5 тт. Т. 4. П – Т. Редколлегия: Зефиров Н.С. (гл. ред.) и др. М.: Большая Российская энциклопедия, 1995. 639 с.

12. Eseev M.K., Goshev A.A., Horodek P., Kapustin S.N., Kobets A.G., Osokin C.S. Diagnostic methods for silica-reinforced carbon nanotube based nanocomposites // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. 2016. Vol. 7. No. 1. Pp. 180–184.

13. Nitride ceramics: combustion synthesis, properties and applications. Ed. by A.A. Gromov, L.N. Chukhlomina. Weinheim: Wiley-VCH Verlag, Germany, 2015. 331 p.

14. Маслова А.С., Пашкевич Д.С. Термодинамический анализ процесса получения фторида водорода из тетрафторида кремния в пламени водородсодержащего топлива и кислородсодержащего окислителя // Неделя науки СПбПУ. Материалы научной конференции с международным участием. Институт прикладной математики и механики. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2017. С. 245–247.

15. Souil J.M., Joulain P., Gengembre E. Experimental and theoretical study of thermal radiation from turbulent diffusion flames to vertical target surfaces// Combustion Science and Technology. 1984. Vol. 41. No. 1–2. Pp. 69–81.

16. Зимин А.Р., Пашкевич Д.С. Термодинамически равновесный состав веществ в системе элементов U-F-O-H // Неделя науки СПбПУ. Материалы научной конференции с международным участием. Институт прикладной математики и механики. СПб.: Издво Политехн. ун-та, 2017. С. 222–224.

17. **Трусов Б.Г.** Программная система моделирования фазовых и химических равновесий при высоких температурах // Инженерный журнал: наука и инновации. Электронное научно-техническое издание. 2012. № 1 (1). 21 с. DOI: 10.18698/2308-6033-2012-1-31.

18. Галкин Н.П., Зайцев В.А., Серегин М.Б. Улавливание и переработка фторсодержащих газов. М.: Атомиздат, 1975. 240 с.

19. Зайцев В.А. Производство фтористых соединений при переработке фосфатного сырья. М.: Химия, 1982. 248 с.

20. **Горбис З.Р.** Теплообмен и гидромеханика дисперсных сквозных потоков. М.: Энергия, 1970. 424 с.

Статья поступила в редакцию 06.12.2019, принята к публикации 20.12.2019.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗИМИН Арсений Романович — аспирант Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 fz1min@yandex.ru

ПАШКЕВИЧ Дмитрий Станиславович — доктор технических наук, профессор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

МАСЛОВА Анастасия Сергеевна — студентка Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 maslovanastya95@gmail.com

КАПУСТИН Валентин Валерьевич — аспирант Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Велико-го, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 Valentin.Kapustin.2014@yandex.ru

АЛЕКСЕЕВ Юрий Иванович — кандидат технических наук, главный конструктор ООО «Новые химические продукты», Санкт-Петербург, Российская Федерация. 191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 11.

alexeev-588@yandex.ru

REFERENCES

1. Hydrogen fluoride. The Essential Chemical Industry – online, University of York, UK, URL: http://www.essentialchemicalindustry.org/ chemicals/hydrogen-fluoride.html.

2. Obzor rynka flyuorita (plavikovogo shpata) v SNG [A review of the fluorite (fluorspar) market in the CIS], The 8th edition, The "Informain" Research Team, Moscow, 2016.

3. **Glushko V.P.,** Termodinamicheskiye svoystva individualnykh veshchestv. Spravochnoye izdaniye [Thermodynamic properties of the individual substances. Reference book], the 3d Ed. Vols. 1–4, Nauka, Moscow, 1979.

4. Lidin R.A., Molochko V.A., Andreyeva L.L., Khimicheskiye svoystva neorganicheskikh veshchestv [Chemical properties of the inorganic substances], 3d Ed., "Chemistry" Publishing, Moscow, 2000.

5. Khimicheskaya entsiklopediya [Chemical encyclopedia], In 5 Vols., Vol. 5, Knunyants I.L. is an editor-in-chief, Sovetskaya Entsiklopediya, Moscow, 1990.

6. **Hofmann U., Rudorff V., Haas A., et al.,** Handbuch der Präparativen Anorganischen Chemie, Herausg. von G. Brauer, Band 3, Stuttgart, Ferdinand Enke Verlag, 1978.

7. Nekrasov B.V., Osnovy obshchey khimii [Fundamentals of general chemistry], Vol. 1., 3d Ed., "Chemistry" Publishing, Moscow, 1973.

8. Simons J.H. (Ed.), Fluorene chemistry, 5 Vols., Vol. 1, Academic Press, New York, 1950.

9. **Ryss I.G.**, Khimiya ftora i yego neorganicheskikh soyedineniy [Chemistry of fluorine and its inorganic compounds], Scientific and Technical State Publishing House for Books on Chemistry, Moscow, 1956.

10. **Remy H.,** Treatise on inorganic chemistry: introduction and main groups of the periodic table, Vol. 1, Elsevier, 1959.

11. Khimicheskaya entsiklopediya v 5 t [Encyclopedia on chemistry, 5 Vols.], Vol. 4, Editor-in-Chief is Zefirov N.S., Publ. by "Bolshaya Rossiyskaya Entsiklopedia", Moscow, 1995.

12. Eseev M.K., Goshev A.A., Horodek P., et al., Diagnostic methods for silica-reinforced carbon nanotube based nanocomposites, Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. 7 (1) (2016)

Received 06.12.2019, accepted 20.12.2019.

180-184.

13. Nitride ceramics: combustion synthesis, properties and applications, Edited by A.A. Gromov, L.N. Chukhlomina, Weinheim: Wiley-VCH Verlag, Germany, 2015.

14. **Maslova A.S., Pashkevich D.S.**, Thermodynamic analysis of the process of producing hydrogen fluoride from silicon tetrafluoride in a flame of a hydrogen-containing fuel and an oxygen-containing oxidizing agent, SPbPU Science Week, Materials of Scientific Conference with International Participation, Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Polytechnical Institute Publishing, St. Petersburg (2017) 245–247.

15. Souil J.M., Joulain P., Gengembre E., Experimental and theoretical study of thermal radiation from turbulent diffusion flames to vertical target surfaces, Combustion Science and Technology. 41 (1-2) (1984) 69–81.

16. Zimin A.R., Pashkevich D.S., Thermodynamically equilibrium composition of substances in the system of elements U-F-O-H, SPbPU Science Week, Materials of Scientific Conference with International Participation, Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Polytechnical Institute Publishing, St. Petersburg (2017) 222–224.

17. **Trusov B.G.,** Code system for simulation of phase and chemical equilibriums at higher temperatures, Engineering Journal: Science and Innovation. Electronic Science and Engineering Publication. (1(1)) (2012) DOI: 10.18698/2308-6033-2012-1-31.

18. Galkin N.P., Zaytsev V.A., Seregin M.B., Ulavlivaniye i pererabotka ftorsoderzhashchikh gazov [Capture and processing of fluorinated gases], Atomizdat, Moscow, 1975.

19. **Zaytsev V.A.,** Proizvodstvo ftoristykh soyedineniy pri pererabotke fosfatnogo syrya [Production of fluoride compounds in phosphate processing], "Chemistry" Publishing, Moscow, 1982.

20. Gorbis Z.R., Teploobmen i gidromekhanika dispersnykh skvoznykh potokov [Heat exchange and hydromechanics of the dispersed through flows], Energiya, Moscow, 1970.

THE AUTHORS

ZIMIN Arseniy R.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation fz1min@yandex.ru

PASHKEVICH Dmitriy S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation pashkevich-ds@yandex.ru

MASLOVA Anastasia S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation maslovanastya95@gmail.com

KAPUSTIN Valentin V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University 29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation Valentin.Kapustin.2014@yandex.ru

ALEXEEV Yuriy I.

LTD "New Chemical Products" 11 Moika River Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation alexeev-588@yandex.ru DOI: 10.18721/JPM.13109 УДК 537.531, 621.371, 539.234

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВЧ- И ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ И ОРГАНИЧЕСКИХ ПЛЕНОК В.В. Старостенко, А.С. Мазинов, А.С. Тютюник, И.Ш. Фитаев, В.С. Гурченко

Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского,

г. Симферополь, Республика Крым, Российская Федерация

Представлены спектры пропускания и отражения электромагнитного излучения для тонких пленок, полученных методом полива из растворов фуллеренов в воде и дихлорметане, а также из растворов 4-метилфенилгидразона N-изоамилизатина в хлороформе, в CBЧ- (2,5-4,0 и 8,2-12,0 ГГц) и оптических (19-110 и 330-740 ТГц) диапазонах. Показано, что наиболее чувствительны к CBЧ-волнам углеродные образцы, осажденные из дихлорметана, на спектре которых отмечены пики поглощения 3,4 и 9,1 ГГц. В инфракрасном диапазоне были выделены частотные интервалы 20-50 и 78-108 ТГц, где наиболее ярко проявилось взаимодействие электромагнитных волн с образцами. В оптическом спектре пленки, полученные из двух видов фуллеренсодержащих суспензий, имея линейный спектр, обладали максимальным коэффициентом поглощения, а органические образцы с резким увеличением поглощения в высокочастотной области 599,6-713,8 ТГц имели край полосы поглощения 3,05 эВ. При этом микрофотографии поверхностей показали достаточно разветвленный рельеф (в особенности для поверхностей фуллерена) с нетривиальными 3D-образованиями, на форму которых влиял тип растворителя.

Ключевые слова: СВЧ электромагнитные волны, фуллерен, органическая пленка, оптический диапазон, микрофотография

Ссылка при цитировании: Старостенко В.В., Мазинов А.С., Тютюник А.С., Фитаев И.Ш., Гурченко В.С. Спектральные СВЧ- и оптические характеристики наноструктурированных углеродных и органических пленок // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 106–117. DOI: 10.18721/JPM.13109

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии 0CC BY-NC 4.0 (https:// creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/)

NANOSTRUCTURED CARBON AND ORGANIC FILMS: SPECTRAL MICROWAVE AND OPTICAL CHARACTERISTICS

V.V. Starostenko, A.S. Mazinov, A.S. Tyutyunik, I.Sh. Fitaev, V.S. Gurchenko

V.I. Vernadsky Crimean Federal University,

Simferopol, Republic of Crimea, Russian Federation

Microwave and optical transmission and reflection spectra of thin films prepared by casting the aqueous and dichloromethane solutions of fullerene, as well as casting the chloroform solution of 4-methylphenylhydrazone N-isoamylisatin have been recorded in the 2.5 - 4.0, 8.2 - 12.0 GHz and 19 - 110, 330 - 740 THz ranges. The carbon samples precipitated from dichloromethane were established to be the most sensitive to the microwaves. There were 3.4 and 9.1 GHz absorption peaks in their spectrum. The 20 - 50 and 78 - 108 THz IR intervals were chosen for investigation as the most pronounced. The fullerene-containing films, having a linear optical spectrum, exhibited the maximal absorption factor. The organic samples, having a sharp increase of optical absorption in the 599.6 - 713.8 THz high-frequency region, exhibited an absorption edge of 3.05 eV. In this case the surface photomicrographs demonstrated a rather ramified relief with nontrivial 3D forms dependent on the solution nature, notably prominent for fullerene surfaces.

Keywords: electromagnetic microwaves, fullerene, organic film, optical range, photomicrograph

Citation: Starostenko V.V., Mazinov A.S., Tyutyunik A.S., Fitaev I.Sh., Gurchenko V.S., Nanostructed carbon and organic films: spectral microwave and optical characteristics, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 106–117. DOI: 10.18721/JPM.13109

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

Введение

Освоение и внедрение новых частотных диапазонов с одновременным уменьшением массогабаритных свойств приемопередающей радиоаппаратуры, при неуклонном снижении ее стоимости, побуждает исследователей и конструкторов искать новые материалы, которые эффективно взаимодействуют с электромагнитным излучением в различных частотных диапазонах. В настоящий момент в системе связи основными остаются оптические (оптоволоконные) каналы, отвечающие за наземное перемещение информации и обеспечивающие передачу основного потока трафика [1], а также сверхвысокочастотные (СВЧ) сотовые станции, предоставляющие непосредственную связь с клиентами [2,3].

В конце 1990-х и начале 2000-х годов значительно возрос интерес к наноструктурированным углеродным производным (углеродные нанотрубки, графены, фуллерены), которые обладают не только уникальными физическими свойствами [4 — 6], но и в комбинации с другими материалами проявляют широкополосное поглощение [7, 8]. Создание на такой основе элементарных активных приборов [9] позволит достаточно легко интегрировать органоуглеродные элементы в существующие электронные схемы современной приемопередающей аппаратуры.

Эти же элементы, в комбинации с органическими материалами, составляют основу перспективных излучающих [10] и диодных структур [11, 12], значительно расширяя их рабочие диапазоны.

Однако стоит отметить, что подобные приборы не лишены недостатков, к которым (в первую очередь) можно отнести их фотополимеризацию (нежелательное изменение свойств под действием света), фотостимулированное и обычное окисление [13,14], приводящие к быстрой деградации используемых органических слоев.

Несмотря на столь широкий интерес к органоуглеродным материалам, их частотные свойства в основном применяются в видимом диапазоне, тогда как их характеристики в средневолновом инфракрасном (ИК) и СВЧ-диапазонах изучены слабо.

Целью данной работы было исследование эффектов воздействия электромагнитных волн сверхвысокочастотного и оптического диапазонов на наноструктурированные пленки фуллерена С₆₀ и органического прекурсора 4-метилфенилгидразона N-изоамилизатина (IMPH), которые служат основными рабочими слоями соответствующего гетероперехода [15].

Специфика измерения и объекты воздействия

Поскольку первоначальные исследования были ориентированы на создание барьерных структур [15], в данной серии экспериментов изучалось действие электромагнитного излучения на тонкие пленки, т. е. на такую форму вещества, из которой создавались эти гетеропереходы [12]. Изучение образцов C_{60} и IMPH было сосредоточено на измерениях и анализе спектров отражения и пропускания электромагнитного излучения сверхвысокочастотного и оптического диапазонов.

СВЧ-диапазон был представлен двумя интервалами: 2,5 — 4,0 и 8,2 — 12,0 ГГц. Для указанных случаев из исследуемых материалов были приготовлены тонкие квадратные подложки двух размеров: 18×18 и 6 × 6 мм, чтобы проводить измерения на волноводах сечением 72 × 34 и 23 × 10 мм соответственно.

Оптические измерения проводились в двух частотных интервалах: средневолновом инфракрасном 19 – 110 ТГц $(650 - 3650 \text{ см}^{-1})$ и видимом 330 - 740 ТГц(405 - 909 нм). Для этого были изготовлены образцы одного размера - 18×18 мм.

Исследуемые образцы фуллерена C_{60} были представлены двумя фазовыми состояниями. Одно из них — фуллеренсодержащий водный раствор (молекулярно-коллоидный фуллерен, *англ.* Fullerene water system (FWS)), который имел чистоту 99,9 % [16]. Другой образец C_{60} — твердофазный порошок, полученный методом распыления графита [17, 18], с чистотой 99,5 %.

Первичную суспензию FWS синтезировали из кристаллического фуллерена C_{60} (навеска 20 мг) который растворяли в N-метилпирролидоне (объем 25 мл) с помощью магнитной мешалки. Полученный коричнево-фиолетовый раствор смешивали с дистиллированной водой (от 12,5 до 100 мл). Затем полученный темно-красный прозрачный раствор перемешивали в течение 1 часа и подвергали исчерпывающему диализу против деионизованной воды. Диализат пропускали через фильтр (размер пор — 0,45 мкм), и в результате получали прозрачный коричневато-желтый раствор. Его хранили при температуре 10 °C, защищенным от света [16].

Органический прекурсор был приготовлен по методике, аналогичной описанной в работе [19]. 3-метил-1-фенил-4-формилпиразол-5-он (количество – 2 ммол) растворяли в 96%-м этаноле (25 мл) путем перемешивания и подогрева. К полученному раствору добавляли соответствующий гидразид 4-хлорбензойной кислоты (2 ммол) при дальнейшем перемешивании и нагревании в течение 1 – 2 ч до образования осадка. Образовавшийся осадок оставляли на долгий срок (на ночь) под маточным раствором, затем осадок отфильтровывали, промывали этанолом и высушивали на воздухе. В результате описанной процедуры был получен целевой продукт (вес – 680 мг) с выходом 96 %.

При формировании активных слоев, для каждого из исходных материалов (IMPH и C_{60}) были подготовлены растворы. В качестве растворителей для соединения IMPH использовался хлороформ, а в случае порошкового фуллерена C_{60} – дихлорметан (в концентрациях 0,5 мг/мл). Для приготовления образцов FWS не было необходимости в применении дополнительного растворителя. К завершающей стадии изготовления образцов приступали после выдержки полу-

ченных суспензий при комнатной температуре не менее 48 ч. Эта стадия заключалась в одновременном нанесении выдержанных суспензий (по 1 мл) на подложки, предназначенные для измерений в заданных частотных диапазонах.

Для пленочных образцов были введены следующие обозначения:

IMPH (N-isoamylisatin 4-methylphenylhydrazone) – осажденные на стекло из растворов 4-метилфенилгидразона N-изоамилизатина в хлороформе;

FFWS (fullerene from the fullerene water system) – осажденные из водных растворов C_{s0} ;

⁶⁰FDCM (fullerene from dichloromethane) – осажденные из суспензий дихлорметана.

Взаимодействие СВЧ-излучения с пленками фуллерена и ІМРН

Измерительный комплекс на базе векторного анализатора Р4226 (рис. 1) использовался нами ранее для исследования взаимодействия электромагнитного излучения с тонкими проводящими и полупроводящими пленками [20]. Основная сложность при измерениях характеристик полупроводниковых фуллереновых (С60) и органических (IMPH) пленок заключалась в их высоком омическом сопротивлении, которое было обусловлено их малой толщиной, а это требовало высокой чувствительности и точной настройки измерительного тракта. Для минимизации уровня внешних помех, измерения проводились в закрытом волноводе в диапазонах 2,5 - 4,0 и 8,2 -12,0 ГГц. Для компенсации влияния коаксиально-волноводных переходов, а также других мешающих факторов, производилась калибровка методом TRL (Through-Reflect-Line), с использованием меры отражения и четвертьволновой линии, что позволило получить достаточно точные результаты. Во избежание емкостного и индуктивного влияния исследуемого образца на измерительную систему, эффективная площадь взаимодействия излучения с образцами составляла 10 % от площади поперечного сечения волновода. Образцы располагались в геометрическом центре сечения волновода (см. рис. 1) и фиксировались с помощью диэлектрической подложки из материала, «прозрачного» для СВЧ-излучения. Таким образом, образец при измерениях находился в максимуме электрической компоненты электромагнитного поля и, если принимать
во внимание, что использовалась основная мода H_{10} , то можно утверждать, что на площадь образца приходилась наибольшая часть энергии.

Непосредственное взаимодействие СВЧ-излучения с образцами определялось матрицей S-параметров, при этом учитывались основные компоненты S_{21} и S_{11} , отвечающие прямому падению с первого порта P1. Как показали первичные замеры, свойства измерительного волноводного тракта с исследуемой структурой близки к свойствам обратимого четырехполюсника, т.е. коэффициент передачи одинаков в обоих направлениях. Исходя из этого, использовались основные компоненты S_{21} и S_{11} , отвечающие прямому падению с первого порта векторного анализатора VNA.

Напомним, что компоненты S-параметров есть отношения напряжений отраженного (V_{ref}), падающего (V_{inc}) и прошедшего (V_{trans}) излучений, т.е.

$$S_{11} = \frac{V_{ref}}{V_{inc}}$$
 и $S_{21} = \frac{V_{trans}}{V_{inc}};$

при этом мощности прошедшей (P_{trans}) и



Рис. 1. Блок-схема измерений в волноводном тракте:

VNA — векторный анализатор цепей Р4226; Р1, Р2 — входной и выходной контакты (порты);

WCA – коаксиально-волноводные переходы: CP – плоскость калибровки;

Smp – образец в волноводе (показаны векторы СВЧ-излучения) отраженной (P_{ref}) волн выражаются как

$$P_{trans} = \frac{\left|V_{trans}\right|^{2}}{Z_{v}};$$
$$P_{ref} = \frac{\left|V_{ref}\right|^{2}}{Z_{v}},$$

где Z_{y} – волновое сопротивление.

В настоящей статье определялись коэффициенты прошедшей (T) и отраженной (R) мощности, а затем вычислялся коэффициент поглощения A (рис. 2):

$$T = \frac{P_{trans}}{P_{inc}} = \frac{|V_{trans}|^2}{|V_{inc}|^2} = |S_{21}|^2;$$

$$R = \frac{P_{ref}}{P_{inc}} = \frac{|V_{ref}|^2}{|V_{inc}|^2} = |S_{11}|^2;$$

$$A = 1 - |S_{11}|^2 - |S_{21}|^2.$$

Неоднозначность частотных характеристик коэффициентов пропускания и отражения подтверждает вышеупомянутое утверждение о сложности природы взаимодействия излучения с тонкими углеродными и органическими пленками. Однако полученные зависимости позволяют в первом приближении определить специфику влияния внутренней структуры пленок на электромагнитную волну. В связи с этим для детального описания каждого из выбранных спектральных диапазонов были выбраны характерные частоты $v_1 = 3,4$ ГГц и $v_2 = 9,1$ ГГц, на которых наблюдаются «провалы» на частотных графиках коэффициента пропускания (см. рис. 2). Другими словами, два материала (IMPH и FDCM) проявили ослабление электромагнитной волны на данных частотах. При этом на частотах v_1 и v_2 соответствующие кривые имеют сходный характер как в случае с коэффициентом отраженной мощности, так и в случае с коэффициентом пропускания. Однако на частотах примерно 3,6 ГГц для этих структур наблюдается максимум коэффициента пропускания. Стоит также отметить, что спектр достаточно равномерен и только на данных частотах наблюдаются аномалии, что, очевидно, связано со спецификой структуры изучаемого материала. К тому же отсутствие ан-



Рис. 2. Частотные спектры образцов FFWS (1), IMPH (2) и FDCM (3), подвергнутых CBЧизлучению в диапазонах 2,5 – 4,0 (*a*) и 8,2 –12,0 ГГц (*b*);

T, R – коэффициенты прошедшей и отраженной мощности соответственно



Рис. 3. Графическое представление удельной поглощенной мощности СВЧ-излучения для образцов пленок FFWS, IMPH и FDCM, рассчитанной по формулам (1) (*a*) и (2) (*b*)

тисимметрии в поведении коэффициентов отражения и пропускания (кривые 2 и 3 на рис. 2, *a*) говорит о том, что происходит поглощение СВЧ-излучения.

В отличие от поведения образцов ІМРН и FDCM под воздействием СВЧ-излучения, образцы FFWS не обладали какими-либо выраженными особенностями, однако на частотах 2,5 – 4,0 ГГц имели тенденцию в поведении, обратную к поведению других материалов, а именно - при повышении частоты падающей волны коэффициент пропускания снижался, а с уменьшением коэффициента пропускания коэффициент отражения возрастал. Это явление говорит о том, что поглощение электромагнитной СВЧ-волны будет минимальным, а сам материал FFWS обладает небольшой электрической проводимостью, причем большей, чем у двух других материалов.

Анализ общих частотных характеристик изучаемых пленок привел к необходимости учитывать связь поглощенной части волновой энергии с их объемом. Более тщательно были рассмотрены минимумы коэффициента пропускания на частотах 3,32 и 8,97 ГГц. При этом удельная поглощенная мощность *Q* рассчитывалась как отношение поглощенной образцом мощности P_{abs} к его объему V, т.е.

$$Q = P_{abs}/V, \tag{1}$$

а величина P_{abs} определялась в виде произведения выходной мощности генератора векторного анализатора P_{inc} , равной -10,00 дБм, на коэффициент поглощения A:

$$P_{abs} = P_{inc} \left(1 - \left| S_{11} \right|^2 - \left| S_{21} \right|^2 \right).$$

Определение объема *V* потребовало усреднения значений толщины пленок, которые мы измеряли с помощью интерференционного микроскопа ЛОМО МИИ-4М на наиболее характерных участках образцов.

Сравнение удельной поглощенной мощности для трех образцов (рис. 3,*a*) показало, что максимальной поглощающей способностью обладают пленки FDCM. Минимальное значение указанной характеристики на частоте 3,32 ГГц наблюдалось у образцов IMPH, тогда как на частоте 8,97 ГГц минимальной поглощающей способностью обладали пленки FFWS.



Рис. 4. ИК-спектры оптического поглощения образцов пленок FDCM (*a*), FFWS (*b*) и IMPH (*c*) в частотных диапазонах $667 - 1667 \text{ см}^{-1}$ и $2601 - 3602 \text{ см}^{-1}$

Стоит заметить, что постоянство мощности СВЧ-излучения на выходе генератора Р4226 не позволило адекватно сравнить поглощающую способность пленок на разных частотах. Так, например, удельная поглощенная мощность на частоте 8,97 ГГц оказалась выше, чем на частоте 3,32 ГГц. Данный эффект не связан со свойствами исследуемых материалов, а объясняется более высокой плотностью излучения, создаваемой в волноводе меньшего сечения. Для сопоставления результатов с разной плотностью излучения, была проведена нормировка результатов с учетом линейности вычислений. Полученная нормированная удельная мощность (рис. 3,b) следует выражению

$$Q' = Q \cdot \frac{S_{23 \times 10}}{S_{72 \times 34}},$$
 (2)

где $S_{23\times10}, S_{72\times34}$ — площади сечения соответствующих волноводных линий.

Таким образом здесь учитываются размеры волноводов.

Средневолновые ИК-спектры оптического поглощения

Исследование взаимодействия средневолнового оптического излучения с элементами гетероструктуры проводились на ИК-Фурье-спектрометре Agilent Cary 630 в диапазоне пространственных частот 650 – 4000 см⁻¹, соответствующих прямому спектру 19,48 – 119,92 ТГц, с разрешением 110 ГГц (4 см⁻¹). При этом отдельно были выделены частотные интервалы 20 - 50 и 78 - 108 ТГц (667 - 1667 см⁻¹ и 2601 - 3602 см⁻¹), на которых ярко проявилось взаимодействие инфракрасных электромагнитных волн с пленками IMPH, FDCM и FFWS.

Если случае взаимодействия в СВЧ-электромагнитного излучения с пленочными структурами наиболее гладкий спектр наблюдался для образцов FFWS, то в ИК-диапазоне наименьшим количеством пиков обладали спектры структуры FDCM. Особо стоит отметить более низкочастотный интервал 20 - 50 ТГц (667 — 1667 см⁻¹), для которого наблюдалась гамма относительно узких полос поглощения. Так, для образцов FDCM пики на частотах 41,07 и 43,68 ТГц (1369 и 1457 см⁻¹) соответствовали связи С $_{sp3}-$ H, а пики 35,46 и 42,81 ТГц (1182 и 1427 см⁻¹) – фуллерену С60 причем последняя полоса сдваивается с полосой от алкильной группы на 43,68 ТГц (1456 см⁻¹) (рис. 4, *a*). Для пленки FFWS на спектрах хорошо видны две характерные узкие полосы ИК-поглощения на частотах 35,43 и 42,81 ТГц (1181 и 1427 см⁻¹) (обусловлены связями C - C) молекул C_{60} , хотя они частично перекрываются с другими полосами. Полосы поглощения в области 49,46 - 49,76 ТГц (1649 -1659 см⁻¹) (обусловлена связью C = O) – для карбонильной группы амида и 29,98 - 32,97 ТГц (1000 – 1099 см⁻¹) характерны для колебаний группы С – О. В данном случае следует отметить отсутствие полос, характерных для аминокислот (см. рис. 4, а). Частотный спектр ИК-поглощения пленками ІМРН характеризуется значительным количеством пиков, что обусловлено наличием многочисленных химических связей в молекуле 4-метилфенилгидразона N-изоамилизатина (см. рис. 4, *a*). На частотах 46,7 и 50,12 ТГц (1557 и 1671 см⁻¹) обнаруживаются пики, характерные для колебаний групп атомов C = O и C = N. В области частот 40,89 — 48,26 ТГц (1363 — 1609 см⁻¹) основная роль принадлежит валентным колебаниям бензольных колец. Вследствие деформационных и валентных колебаний групп C - N, C - C и C - H, обнаруживается последовательность максимумов поглощения в диапазоне частот 31.59 – 38.82 ТГц (1053 – 1294 см⁻¹). В частотной области 22,30 - 33,81 ТГц (743 - 1127 см⁻¹) определяющую роль играют деформационные колебания групп С – Н в бензольных кольцах и алкильном заместителе.

На более высоких частотах (рис. 4, b) спектр не столь разнообразен и характеризуется в основном пиками поглощения на частотах 75 – 90 ТГц (2501 – 3002 см⁻¹). Так, двойной пик в диапазоне 83 – 89 ТГц (2768 – 2968 см⁻¹) для пленок, осажденных из раствора дихлорметана, который можно отнести к колебательным модам С_{sp3} - H, для пленок FFWS проявляется в виде одиночного и более широкого максимума (рис. 4, b). Однако для последнего можно также отметить относительно протяженную полосу поглощения на частотах 90 - 108 ТГц (3002 - 3602 см⁻¹) с максимумом на 100 ТГц (3335 см⁻¹). Для образца ІМРН в области частот 85,7 – 101,9 ТГц (2858 - 3398 см⁻¹) наблюдается серия полос поглощения, связанных с колебаниями групп N – H и C – H (см. рис. 4, *b*).

Микроскопия поверхности пленок

Геометрия поверхности при воздействии столь высоких частот электромагнитного излучения играет важную роль, поэтому в процессе формирования исследуемых слоев каждый из отдельных элементов, как и в целом пленка (в данном случае это соединения IMPH, FDCM, FFWS), контролировались посредством отражающей и просвечивающей микроскопии на микроинтерферометре ЛОМО МИИ-4М, с усиленным освещением полупроводниковым лазером и с удлиненным оптическим путем на фотокамеру с фотоматрицей 1/2 FF 10 MP.

Следует отметить, что поверхности наноструктурированных пленок неравномерны и для них характерно наличие отдельно выраженных образований или даже областей (рис. 5). Здесь показаны наиболее характерные фрагменты поверхностей пленок FDCM, FFWS и IMPH.

Так для пленок, осажденных из раствора фуллерена в дихлорметане (FDCM), наблюдались отдельные микрообъекты, которые имели достаточно четкие геометрические формы в виде трехмерных «лучеобразных звезд». Размеры отдельных образований достигали 16 – 20 мкм, при этом толщина пленки в среднем составляла 400 - 500 нм (см. рис. 5, а). Образцы пленок FFWS продемонстрировали относительно однородную поверхность с наличием локализованных образований в форме «пчелиных ульев». Размеры отдельных формирований достигали 50 – 80 мкм, при этом толщина пленки составляла 1,8 мкм (см. рис. 5, b). Для поверхности пленок гидразона (ІМРН) также характерна относительная



Рис. 5. Микрофотографии наноструктурированных пленок FDCM (*a*), FFWS (*b*) и IMPH (*c*)

однородность, что объясняется значительной длиной молекулы 4-метилфенилгидразона N-изоамилизатина и, в частности, амил-радикала. Толщина пленок составляла 1,8 – 2,0 мкм (см. рис. 5, с).

Спектры оптического пропускания и отражения в видимом диапазоне

Для регистрации спектров пропускания и отражения исследуемых пленок был использован призменный монохроматор с ИК-фильтром и галогенной лампой. Перед проведением каждой серии экспериментов выполнялась калибровка спектрометра на излучение водорода. В качестве нормирующего базиса была использована чистая подложка.

Наибольшим поглощением обладали пленки FDCM, у которых линейный спектр пропускания лежал на уровне шумов фотоумножителя и был практически нулевым, при этом отраженная составляющая у этих пленок отсутствовала. Образцы FFWS, обладая аналогичными спектральными характеристиками, все же имели незначительный провал в коротковолновой части спектра.

Для оптических спектров пропускания света через пленки IMPH было характерно наличие резких минимумов в ближней ИК-области на частотах 336,85 и 340,68 ТГц (890 и 880 нм). Соответственно наблюдались резкие максимумы в спектрах отражения, а также общий спад в высокочастотной области 599,6 – 713,8 ТГц (500 – 420 нм), который обусловлен поглощением в пленке (рис. 6).

При этом мы рассчитывали логарифм

отношения коэффициентов пропускания T и отражения R, при заданной толщине образца, с дальнейшей линеаризацией (рис. 7) с показателем для косвенных разрешенных переходов (m = 2) [21]. Для расчетов была использована формула

$$\alpha h \nu = A \left(h \nu - E_g \right)^m, \qquad (3)$$

где α — коэффициент поглощения, A — константа, hv — энергия оптического кванта, E_g — ширина запрещенной зоны материала⁸ пленки.

В результате расчета получено значение ширины запрещенной зоны для соединения IMPH: $E_g = 3,05$ eV.

Заключение

Практически все пленочные образцы IMPH, FDCM и FFWS проявили заметную реакцию на воздействие электромагнитного излучения в широком частотном диапазоне, т. е. поглощение либо отражение падающей энергии. При этом наиболее неоднородным оказался инфракрасный диапазон на отрезке 20 – 50 ТГц (667 – 1667 см⁻¹), где наблюдалась серия узкополосных пиков, минимальные полосы которых достигали несколько сотен гигагерц.

Исследуемые структуры оказались менее чувствительными к сверхвысокочастотному электромагнитному излучению. Однако следует отметить, что на частотах 3,4 и 9,1 ГГц имелся «провал» на частотной зависимости коэффициента пропускания при измерении характеристик образцов, осажденных из суспензий фуллерена в дихлорметане (FFWS) и 4-метилфенилгидразона



Рис. 6. Оптические спектры пропускания (1) и отражения (2) тонкой пленки IMPH в диапазоне 406 – 909 нм



Рис. 7. Зависимость величины α (hv)² от энергии падающего фотона (представлен энергетический участок) для образца тонкой пленки IMPH

N-изоамилизатина в хлороформе (IMPH).

Исследование оптических спектров видимого диапазона показало наличие резких минимумов в спектрах поглощения на частотах 336,85 и 340,68 ТГц (890 и 880 нм), а также общего спада энергии в интервале 599,6 – 713,8 ТГц (500 – 420 нм) для пленок IMPH. Анализ полученных экспери-

1. **Кемр S.** Global digital statshot. Режим доступа: https://wearesocial.com/global-digi-tal-report-2019 (дата обращения: 10.01.2020).

2. Rout S.P. 5th generation mobile technology – a new milestone to future wireless communication networks // International Journal of Science and Research. 2016. Vol. 5. No. 5. Pp. 529–534.

3. **Kumar A., Gupta M.** A review on activities of fifth generation mobile communication system // Alexandria Engineering Journal. 2018. Vol. 57. No. 2. Pp. 1125–1135.

4. Baimova J.A., Korznikova E.A., Dmitriev S.V., Liu B., Zhou K. Review on crumpled graphene: unique mechanical properties// Reviews on Advanced Materials Science. 2014. Vol. 39. No. 1. Pp. 69–83.

5. Лебедева О.С., Лебедев Н.Г. Влияние деформаций растяжения и сжатия на пьезорезистивность углеродных нанотрубок и графеновых нанолент // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 1 (189). С. 26–34.

6. Елецкий А.В. Механические свойства

ментальных данных позволяет заключить, что пленки FDCM обладали наибольшим поглощением во всех трех исследуемых диапазонах электромагнитного излучения.

Таким образом, взаимодействие электромагнитного излучения с углеродными и органоуглеродными материалами весьма разнообразно и требует всесторонних экспериментальных и теоретических исследований. Однако уже на данном этапе исследования можно уверенно утверждать, что поведением спектров СВЧ-, оптического поглощения и отражения можно управлять посредством создания сложных молекулярных комплексов, выстраивая на их основе гетероструктуктурные переходы для работы в заданных частотных диапазонах.

Благодарности

Авторы благодарят сотрудников Российской биотехнологической компании «С₆₀Био» (г. Москва, «Сколково») за предоставленный образец водорастворимого фуллерена.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90038.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

углеродных наноструктур и материалов на их основе // Успехи физических наук. 2007. Т. 177. № 3. С. 233–274.

7. Li Y., Liu S., Sun J., Li S., Chen J., Zhao Y. Effects of the oxygen content of reduced graphene oxide on the mechanical and electromagnetic interference shielding properties of carbon fiber/reduced graphene oxide-epoxy composites // New Carbon Materials. 2019. Vol. 34. No. 5. Pp. 489 – 498.

8. Wang X., Jiang H.T., Yang K.Y., Ju A.X., Ma C.Q., Yu X.L. Carbon fiber enhanced mechanical and electromagnetic absorption properties of magnetic graphene-based film // Thin Solid Films. 2019. Vol. 674. No. 31. Pp. 97–102.

9. Chen F.C., Chu C.W., He J., Yang Y., Lin J.L. Organic thin-film transistors with nanocomposite dielectric gate insulator // Applied Physics Letters. 2004. Vol. 85. No. 15. Pp. 3295–3297.

10. Gusev A.N., Kiskin M.A., Braga E.V., et al. Novel zinc complex with an ethylenediamine schiff base for high-luminance blue fluorescent OLED applications // The Journal of Physical

Chemistry. 2019. Vol. 123. No. 18. Pp. 11850–11859.

11. Зиминов В.М., Захарова И.Б. Выпрямляющие свойства структур на основе фуллерена С₆₀ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2012. № 2 (146). С. 18–21.

12. Gusev A.N., Mazinov A.S., Tyutyunik A.S., Gurchenko V.S. Spectral and conductive properties of film heterostructures based on fullerene-containing material and 4-methylphenylhydrazone N-isoamilisatine // Radio Electronics, Nanophysics and Information Technologies. 2019. Vol. 11. No. 3. Pp. 331–336.

13. Konenkamp R., Priebe G., Pietzak B. Carrier mobilities and influence of oxygen in C_{60} films // Physical Review B. 1999. Vol. 60. No. 16. Pp. 11804–11808.

14. **Tapponnier A., Biaggio I., Gunter P.** Ultrapure C_{60} field-effect transistors and the effects of oxygen exposure // Applied Physics Letters. 2005. Vol. 86. No. 11. P. 112114.

15. Гусев А.Н., Мазинов А.С., Шевченко А.И., Тютюник А.С., Гурченко В.С., Брага Е.В. Вольтамперные характеристики и фотоэлектрический эффект гетероструктур фуллерен С₆₀ – 4-метилфенилгидразон N-изоамилизатина // Письма в ЖТФ. 2019. T. 45. № 19. С. 40–43.

16. Андреев С.М., Пургина Д.Д., Башкатова Е.Н., Гаршев А.В., Маерле А.В., Хаитов М.Р.

Эффективный способ получения водных нанодисперсий фуллерена С₆₀ // Российские нанотехнологии. 2014. № 7-8 (9). С. 24-30.

17. Мазинов А.С., Работягов К.В., Гурченко В.С., Тютюник А.С. Влияние структурных особенностей фуллеренсодержащего материала на его резистивные свойства // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2018. Т. 15. № 2. С. 86–93.

18. Мазинов А.С., Гурченко В.С., Тютюник А.С., Шевченко А.И. Влияние структурных особенностей фуллеренсодержащего материала на его резистивные свойства при осаждении из раствора // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. 2018. Т. 15. № 4. С. 85–92.

19. Cigan M., Jakusova K., M. Gaplovsky M., Filo J., Donovalova J., Gaplovsky A. Isatin phenylhydrazones: anion enhanced photochromic behavior// Photochemical and Photobiological Sciences. 2015. Vol. 14. No. 11. Pp. 2064–2073.

20. Старостенко В.В., Мазинов А.С., Фитаев И.Ш., Таран Е.П., Орленсон В.Б. Динамика формирования поверхности проводящих пленок алюминия на аморфных подложках // Прикладная физика. 2019. № 4. С. 60–65.

21. **Al-Saidi I., Sadik F.** Synthesis and investigation of phenol red dye doped polymer films // Advances in Materials Physics and Chemistry. 2016. Vol. 6. No. 5. Pp. 120 -128.

Статья поступила в редакцию 18.01.2020, принята к публикации 14.02.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СТАРОСТЕНКО Владимир Викторович — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой радиофизики и электроники Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

295007, Российская Федерация, Республика Крым, г. Симферополь, пр. Академика Вернадского, 4

starostenkovv@cfuv.ru

МАЗИНОВ Алим Сеит-Аметович — кандидат технических наук, доцент кафедры радиофизики и электроники Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

295007, Российская Федерация, Республика Крым, г. Симферополь, пр. Академика Вернадского, 4

mazinovas@cfuv.ru

ТЮТЮНИК Андрей Сергеевич — аспирант кафедры радиофизики и электроники Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

295007, Российская Федерация, Республика Крым, г. Симферополь, пр. Академика Вернадского, 4

real-warez@mail.ru

ФИТАЕВ Ибраим Шевкетович — ведущий специалист кафедры радиофизики и электроники Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

295007, Российская Федерация, Республика Крым, г. Симферополь, пр. Академика Вернадского, 4

fitaev.i@cfuv.ru

ГУРЧЕНКО Владимир Сергеевич — аспирант кафедры радиофизики и электроники Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского, г. Симферополь, Российская Федерация.

295007, Российская Федерация, Республика Крым, г. Симферополь, пр. Академика Вернадского, 4

gurchenko_v@mail.ru

REFERENCES

1. **Kemp S.,** Global digital statshot, URL: https://wearesocial.com/global-digital-report-2019.

2. Rout S.P., 5th generation mobile technology - a new milestone to future wireless communication networks, International Journal of Science and Research. 5 (5) (2016) 529–534.

3. **Kumar A., Gupta M.,** A review on activities of fifth generation mobile communication system, Alexandria Engineering Journal. 57 (2) (2018) 1125–1135.

4. Baimova J.A., Korznikova E.A., Dmitriev S.V., et al., Review on crumpled graphene: unique mechanical properties, Reviews on Advanced Materials Science. 39 (1) (2014) 69–83.

5. Lebedeva O.S., Lebedev N.G., The influence of the stretching and compression deformations on the piezoresistance of the carbon nanotubes and graphene nanoribbons, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics (1 (189)) (2014) 26–34.

6. **Eletskii A.V.,** Mechanical properties of carbon nanostructures and related materials, Phys. Usp. 50 (3) (2007) 225–261.

7. Li Y., Liu S., Sun J., et al., Effects of the oxygen content of reduced graphene oxide on the mechanical and electromagnetic interference shielding properties of carbon fiber/reduced graphene oxide-epoxy composites. New Carbon Materials. 34 (5) (2019) 489–498.

8. Wang X., Jiang H.T., Yang K.Y., et al., Carbon fiber enhanced mechanical and electromagnetic absorption properties of magnetic graphene-based film, Thin Solid Films. 674 (31) (2019) 97–102.

9. Chen F.C., Chu C.W., He J., et al., Organic thin-film transistors with nanocomposite dielectric gate insulator. Applied Physics Letters. 85 (15) (2004) 3295–3297.

10. Gusev A.N., Kiskin M.A., Braga E.V., et al., Novel zinc complex with an ethylenediamine schiff base for high-luminance blue fluorescent OLED applications, The Journal of Physical Chemistry. 123 (18) (2019) 11850–11859.

11. Ziminov V.M., Zakharova I.B., The rectifying properties of C_{60} fullerene-based structures, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics (2 (146)) (2012) 18–21.

12. Gusev A.N., Mazinov A.S., Tyutyunik A.S., Gurchenko V.S. Spectral and conductive properties of film heterostructures based on fullerenecontaining material and 4-methylphenylhydrazone N-isoamilisatine, Radio Electronics, Nanophysics and Information Technologies. 11 (3) (2019) 331–336.

13. Konenkamp R., Priebe G., Pietzak B., Carrier mobilities and influence of oxygen in C_{60} films, Physical Review B. 60 (16) (1999) 11804–11808.

14. Tapponnier A., Biaggio I., Gunter P., Ultrapure C_{60} field-effect transistors and the effects of oxygen exposure, Applied Physics Letters. 86 (11) (2005) 112114.

15. Gusev A.N., Mazinov A.S., Shevchenko A.I. et al., The voltage–current characteristics and photoelectric effect of fullerene C_{60} –N-isoamylisatin 4-methylphenylhydrazone heterostructures, Technical Physics Letters. 45 (10) (2019) 997–1000.

16. Andreev S.M., Purgina D.D., Bashkatova E.N., et al., Facile preparation of aqueous fullerene C_{60} nanodispersions, Nanotechnol. Russia. 9 (7–8) (2014) 369–379.

17 Mazinov A.S., Gurchenko V.S., Tyutyunik A.S., Shevchenko A.I., Influence of structural features of fullerene-containing material on its resistive properties, Ecological Bulletine of the Black Sea Economic Cooperation. 15 (2) (2018) 86–93.

18. Mazinov A.S., Gurchenko V.S., Tyutyunik A.S., Shevchenko A.I., Influence of structural features of fullerene-containing material deposited from solution on its resistive properties, Ecological Bulletine of the Black Sea Economic Cooperation. 15 (4) (2018) 85–92.

19. Cigan M., Jakusova K., Gaplovsky M., et al., Isatin phenylhydrazones: anion enhanced photochromic behavior, Photochemical and

Received 18.01.2020, accepted 14.02.2020.

Photobiological Sciences. 14 (11) (2015) 2064–2073.

20. Starostenko V.V., Mazinov A.S., Fitaev I.S., et al., Forming surface dynamics of conductive aluminum films deposited on amorphous substrates, Prikladnaya Phyzika. (4) (2019) 60–65.

21. Al-Saidi I., Sadik F., Synthesis and investigation of phenol red dye doped polymer films, Advances in Materials Physics and Chemistry. 6 (5) (2016) 120–128.

THE AUTHORS

STAROSTENKO Vladimir V.

V.I. Vernadsky Crimean Federal University 4 Vernadskogo Ave., Simferopol, 295007, Republic of Crimea, Russian Federation starostenkovv@cfuv.ru

MAZINOV Alim S-A.

V.I. Vernadsky Crimean Federal University 4 Vernadskogo Ave., Simferopol, 295007, Republic of Crimea, Russian Federation mazinovas@cfuv.ru

TYUTYUNIK Andrey S.

V.I. Vernadsky Crimean Federal University 4 Vernadskogo Ave., Simferopol, 295007, Republic of Crimea, Russian Federation real-warez@mail.ru

FITAEV Ibraim Sh.

V.I. Vernadsky Crimean Federal University 4 Vernadskogo Ave., Simferopol, 295007, Republic of Crimea, Russian Federation fitaev.i@cfuv.ru

GURCHENKO Vladimir S.

V.I. Vernadsky Crimean Federal University 4 Vernadskogo Ave., Simferopol, 295007, Republic of Crimea, Russian Federation gurchenko_v@mail.ru

Математика

DOI: 10.18721/JPM.13110 УДК 519.816

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КЛАССА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕКТОРА МЕДИЦИНСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ

В.И. Антонов¹, О.А. Богомолов², В.В. Гарбарук³, В.Н. Фоменко³

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация; ² Российский научный центр радиологии и хирургических технологий имени академика А.М. Гранова, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

³ Петербургский государственный университет путей сообщения

Императора Александра I, Санкт-Петербург, Российская Федерация

Встатье представлен разработанный авторами методопределения класса распределения, к которому принадлежит выбранный случайный вектор с медицинскими показателями в качестве компонент. Метод основан на статистическом критерии значимости. Решается задача об оптимальном выборе уровня значимости, при котором вероятность ошибки идентификации вектора минимальна. Для этого используется априорная информация о принадлежности компонент вектора к определенному классу распределения, в котором учитывается статистическая зависимость между медицинскими показателями. Разработанная математическая модель состояния пациента должна служить поддержкой принятию решения о выборе дальнейшей тактики лечения.

Ключевые слова: математическое моделирование, класс распределения, критерий значимости, мощность критерия

Ссылка при цитировании: Антонов В.И., Богомолов О.А., Гарбарук В.В., Фоменко В.Н. Определение класса распределения вектора медицинских показателей // Научнотехнические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 118–126. DOI: 10.18721/JPM.13110

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

A VECTOR COMPOSED OF MEDICAL PARAMETERS: DETERMINATION OF THE DISTRIBUTION CLASS

V.I. Antonov¹, O.A. Bogomolov², V.V. Garbaruk³, V.N. Fomenko³

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

²Russian Research Center for Radiology and Surgical Technologies,

St. Petersburg, Russian Federation;

³Emperor Alexander I St. Petersburg State Transport University,

St. Petersburg, Russian Federation

In the paper, the authors present a method for determining the distribution class to which a selected random vector with medical parameters as components belongs. The method is based on the statistical significance test. The optimal selection problem for the significance level where the probability of the vector identification error is minimal has been solved. In order to tackle the problem, the authors used the prior information on belonging the vector components to the definite distribution class in which the statistical relationship between the medical parameters was taken into account. The developed mathematical model of patient condition should serve as support of decision-making on further treatment tactics.

Keywords: mathematical simulation, distribution class, significance test, power of test

Citation: Antonov V.I., Bogomolov O.A., Garbaruk V.V., Fomenko V.N., A vector composed of medical parameters: determination of the distribution class, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 118–126. DOI: 10.18721/JPM.13110

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

Введение

Целью данной статьи является создание вероятностной прогностической модели для медицинского исхода заболевания пациентов, перенесших операцию радикальной простэктомии. Модель должна отвечать на вопрос, вероятен ли рецидив опухолевого процесса. Для этого на основе нескольких медицинских показателей создается база данных для групп пациентов, у которых не было рецидива опухолевого процесса и у которых он имел место. Эти показатели внутри каждой группы варьируются от пациента к пациенту и заполняют некоторую область в пространстве показателей с той или иной плотностью, разной для двух упомянутых групп. Система показателей объединяется в вектор, который рассматривается как реализация некого случайного вектора с законом распределения, выведенным из наблюдаемых данных. Этот случайный вектор обобщает экспериментальную информацию и относится ко всей группе в целом. Далее возникает задача определения (с достаточной степенью надежности), реализацией какого из двух рассматриваемых случайных векторов является вектор с показателями данного конкретного пациента, или, иначе говоря, к какой из двух групп, скорее всего, принадлежит пациент.

В данной работе эта задача решается на основе критерия значимости [1]. Одно из двух распределений рассматривается как нулевая гипотеза, а другое – как альтернативная гипотеза. Если случайный вектор попадает в так называемую допустимую область, принимается нулевая гипотеза. В противном случае считается, что справедлива альтернативная гипотеза. Атрибуция вектора (принадлежность некоторому вероятностному распределению) с помощью данного алгоритма может быть ошибочна в двух случаях: либо ошибочно отклоняется основная гипотеза (статистическая ошибка первого рода), либо, наоборот, основная гипотеза ошибочно принимается (статистическая ошибка второго рода).

Выбором допустимой области можно добиться любого значения (между 0 и 1) вероятности ошибки первого рода. Однако изменение вероятности ошибки первого рода влечет за собой и изменение вероятности ошибки второго рода. Расширение допустимой области, очевидно, уменьшает вероятность ошибки первого рода и увеличивает вероятность ошибки второго рода.

Таким образом, представляется естественным шагом так выбрать допустимую область, чтобы при заданном уровне значимости, т. е. вероятности ошибки первого рода, минимизировать вероятность ошибки второго рода [2, 3].

Задача оптимального выбора допустимой области в указанном выше смысле решена путем введения критерия Неймана – Пирсона [3]. Однако этот критерий применяется в рамках более общей трактовки критерия значимости, когда в него вводится элемент рандомизации. В результате ответ на вопрос, принимается ли основная гипотеза или она отклоняется, носит вероятностный характер.

С практической точки зрения наиболее важна итоговая ошибка атрибуции вектора по закону распределения. Эта характеристика складывается из двух источников: ошибок первого и второго рода. Если известны априорные вероятности гипотез о законе распределения, то можно минимизировать вероятность итоговой ошибки оптимальным выбором уровня значимости. Указанная выше задача оптимизации решается в данной работе.

Во втором разделе статьи описывается вероятностная модель, в рамках которой строится оптимизированный критерий атрибуции случайного вектора по закону распределения. В третьем разделе этот критерий рассматривается в качестве примера практического применения к медицинским исследованиям. И, наконец, в последнем разделе обсуждаются полученные результаты и возможные пути развития изложенного метода.

Вероятностная модель

В этой модели нами рассматриваются трехмерные случайные векторы, имеющие распределение A или B: $W^{(A)}$ и $W^{(B)}$. Две первые составляющие вектора — непрерывные случайные величины, а последняя компонента принимает только значения 0 или 1. Величины $m_i^{(A)}$, $\sigma_i^{(A)}$, (i = 1, 2, 3) — соответственно математические ожидания и стандартные отклонения составляющих вектора $W^{(A)}$. Для $W^{(B)}$ обозначения аналогичны.

Пусть $m_i^{(A)}[n]$ — условное математическое ожидание $W^{(A)}$, (i = 1, 2), когда $W_3^{(A)} = n$. Такие же обозначения введем для условных стандартных отклонений и ковариации непрерывных составляющих. Распределение дискретной составляющей задается величиной $p_n = P\{W_3 = n\}$.

Условные и безусловные характеристики непрерывных компонент связаны соотношениями

$$m_{i} = \sum_{n=0,1} m_{i} [n] p_{n},$$

$$\sigma_{i}^{2} = \sum_{n=0,1} \left(\left(\sigma_{i} [n] \right)^{2} + \left(m_{i} [n] \right)^{2} \right) p_{n} - m_{i}^{2},$$

$$\operatorname{Cov}_{12} = \sum_{n=0,1} m_{1} [n] m_{2} [n] p_{n} - m_{1} m_{2}.$$

Задача, решаемая в данной работе, наиболее достоверно определить, к какому из распределений (*A* или *B*) относится данный вектор *W*. Для этого применяется критерий значимости.

Назовем множество

$$\begin{split} \widetilde{D} &= \bigcup_{n=0,1} D_n \cap \left\{ W_i, i = 1, 2, 3 \middle| W_3 = n \right\}, \\ D_n &= \left\{ W_i, i = 1, 2, 3 \middle| x_1^{(n)} \le W_1 \le \right. \\ &\le x_2^{(n)} \land y_1^{(n)} \le W_2 \le y_2^{(n)} \right\}, \end{split}$$
(1)

допустимой областью.

Для каждого из двух значений величины W_3 предусмотрен свой интервал допустимых значений W_1 и W_2 . В формуле (1) и далее мы используем символы \bigcup и \bigcap для операций объединения и пересечения множеств, символ \wedge — для конъюнкции условий.

Ситуацию, когда вектор имеет распределение A, принимаем за нулевую гипотезу H_0 . Если же вектор распределен по варианту B, реализуется альтернативная гипотеза H_1 . Согласно критерию значимости, если

$$(W_1, W_2) \in \widetilde{D},$$

то в этом и только в этом случае гипотеза H_0 принимается.

Ошибка первого рода (ошибочное отклонение нулевой гипотезы) происходит с вероятностью

$$P_1 = P((W_1, W_2) \notin \widetilde{D} | H_0).$$

Вероятность ошибки второго рода (ошибочное принятие нулевой гипотезы) равна

$$P_2 = P\left(\left(W_1, W_2\right) \in \widetilde{D} \middle| H_1\right).$$

С практической точки зрения целесообразно так выбрать допустимую область (1), чтобы при заданной, близкой к нулю, вероятности P_1 добиться минимального значения P_2 . Математически задача формулируется следующим образом:

$$\min P((W_1, W_2, W_3) \in \widetilde{D} | H_1) =$$

= $\min \sum_{n=0,1} p_n^{(B)} P((W_1, W_2) \in D_n | H_1) =$
= $\sum_{n=0,1} p_n^{(B)} \min P((W_1, W_2) \in D_n | H_1).$

Поэтому

$$\left\{ x_1^{[n]}, x_2^{[n]}, y_1^{[n]}, y_2^{[n]} \right\} = = \underset{x_1^{[n]}, x_2^{[n]}, y_2^{[n]}}{\operatorname{arg\,min}} P((W_1, W_2) \in D_n | H_1),$$
(2)

где arg min(f) обозначает функцию, дающую в качестве результата значения аргументов функции f(x) в точке минимума последней.

Запишем выражения для вероятностей ошибок первого и второго рода:

$$\Phi_{1}^{(C)}(n) = F^{(C)}(x_{2}^{(n)}, y_{2}^{(n)})[n] - F^{(C)}(x_{1}^{(n)}, y_{2}^{(n)})[n],$$

$$\Phi_{2}^{(C)}(n) = F^{(C)}(x_{2}^{(n)}, y_{1}^{(n)})[n] - F^{(C)}(x_{1}^{(n)}, y_{1}^{(n)})[n],$$

$$P_{1} = 1 - \sum_{n=0,1} p_{n}^{(A)}[\Phi_{1}^{(A)}(n) - \Phi_{2}^{(A)}(n)],$$

$$P_{2} = \sum_{n=0,1} p_{n}^{(B)}[\Phi_{1}^{(B)}(n) - \Phi_{2}^{(B)}(n)].$$
(3)

где $F^{(C)}(x,y)[n]$ (C = A или C = B) — условная функция распределения вектора (W_1 , W_2).

При принятии решения, к какому классу, А или В, относится данный случайный вектор, важно знать вероятность ошибочной атрибуции вектора. Эту вероятность можно определить, если известна априорная вероятность Р_А принадлежности вектора к классу А.

Пусть Р___ вероятность ошибочной атрибуции. Тогда

$$P_{err} = P_A P_1 + (1 - P_A) P_2.$$
 (4)

Пусть $P_2^{(0)}(P_1)$ — вероятность ошибки второго рода, вычисленная по оптимизированному алгоритму при уровне значимости P_1 . Естественно так задать P_1 , чтобы величина (4) принимала минимальное значение $P_{err}^{(0)}$, T. e.

$$P_{1}^{(0)} = \underset{P_{1} \in [0,1]}{\operatorname{arg min}} \left[P_{A} \cdot P_{1} + (1 - P_{A}) \cdot P_{2}^{(0)}(P_{1}) \right];$$
(5)
$$P_{err}^{(0)} = P_{A} \cdot P_{1}^{(0)} + (1 - P_{A}) \cdot P_{2}^{(0)}(P_{1}^{(0)}).$$

Пример применения алгоритма атрибуции к данным медицинских исследований

Изложенный выше алгоритм атрибуции случайного вектора был применен к данным, относящимся к онкоурологическим пациентам, перенесшим операцию по удалению опухоли. Рак предстательной железы считается наиболее диагностируемым онкологическим заболеванием у мужчин и второй (согласно статистическим данным) причиной смерти от рака [4]. Тесно коррелирует с объемом новообразования уровень простатспецифического антигена p (ПСА) в сыворотке крови [5, 6], который измеряется в нг/мл. Скорость роста опухолевого пора-

жения характеризует время удвоения ПСА [7, 8].

Исходно имелось две группы больных с различным исходом операции радикальной простэктомии. Каждый пациент характеризовался индивидуальными значениями факторов – предоперационных и послеоперационных показателей [9 – 12]. Массив пациентов разбивали на две группы: у 33 объектов исследования был зарегистрирован рецидив опухоли, у 37 - рецидив отсутствовал. Прогнозирование дальнейшего способа лечения после операции является важной задачей, поскольку влияет на конечный результат радикальной простэктомии [9, 13 - 15].

Всего нами было отобрано три фактора:

 W_1 — исходное значение ПСА, нг/мл; W_2 — время удвоения ПСА, мес; W_3 — хирургический край опухоли, т. е. наличие опухолевых клеток в линии резекции. Принимали $W_3 = 0$, если этих клеток нет, и $W_3 = 1$ в противном случае.

В группу A были включены больные, не имевшие рецидивов в течение определенного периода времени, а в группу B – больные с рецидивами. В табл. 1 приведено количество пациентов в группах.

Величины W_1 и W_2 в группе *B* имеют заметную корреляцию. В табл. 1 приведены оценки коэффициентов корреляции при $W_3 = 0$ и 1.

В табл. 2 приведены главные характеристики распределений А и В.

Поясним, как строилась двумерная условная (т.е. при фиксированном значении W_{3}) функция распределения случайного

Таблица 1

Группа пациентов	Количество пациентов		Коэффициент корреляции <i>W</i> ₁ и <i>W</i> ₂		Ложные атрибуции (количество и итоговая ошибка)		
	$W_3 = 0$	$W_{3} = 1$	$W_3 = 0$	$W_{3} = 1$	$W_3 = 0$	$W_{3} = 1$	Относительная ошибка
А (без рецидива)	37	3	0,0058	0,0430	12	0	0,30
В (с рецидивом)	33	5	-0,2000	-0,3600	6	1	0,18

Объем данных и результаты анализа заболеваемости по группам пациентов

Обозначения: W_1 – исходное значение ПСА, нг/мл; W_2 – время удвоения ПСА, мес; W_3 – хирургический край опухоли; принимали $W_3 = 0$, если патологических клеток нет, и $W_3 = 1$ в противном случае. Примечание, Коэффициент корредяции W и W находили по формуле, $R_{xy} = \frac{\text{соу}_{XY}}{\text{соу}_{XY}}$ Примечание. Коэффициент корреляции W_1 и W_2 находили по формуле $R_{XY} = \frac{\cos v_{XY}}{\sigma_x \sigma_y}$

Таблица 2

Характеристики условных распределений непрерывных составляющих случайного вектора W_1 , W_2

W ₃	$P_n^{(A)}$	$p_n^{(B)}$	<i>m</i> _{<i>i</i>} ^(A)	<i>m</i> _{<i>i</i>} ^(B)	σ _i ^(A)	σ _i ^(B)
0	0,925	0,868	12,2; 2200	17,4; 998	10,6; 2410	11,0; 2000
1	0,075	0,132	8,33; 1000	30,9; 265	1,48;558	20,7; 152
Итоговое значение	_		11,9; 2110	19,2; 901	10,3; 2350	13,5; 1870

Обозначения: p_n – распределения дискретной составляющей; m_i – математическое ожидание; σ_i – среднеквадратическое отклонение; верхние индексы указывают на принадлежность данных к группам пациентов А и В. Два значения соответствуют составляющим W_1 и W₂.

вектора W_1, W_2 , требующаяся для вычисления вероятностей ошибок первого и второго рода (3).

Пусть

$$x_k, y_k; (k = 1, N)$$
 (6)

- упорядоченные по возрастанию условные выборки непрерывных компонент W_1 и W_2 , соответственно. Далее, пусть точки

$$(x_{i(j)}, y_{k(j)}); (j = \overline{1, N})$$
 (7)

представляют опытные данные. Введем обозначения

$$\begin{aligned} \xi_{0} &= 2x_{1} - x_{2}; \\ \xi_{i} &= 0, 5(x_{i} + x_{i+1}); \ (i = \overline{1, N-1}); \\ \xi_{N} &= 2x_{N} - x_{N-1}; \\ \eta_{0} &= 2y_{1} - y_{2}; \\ \eta_{i} &= 0, 5(y_{i} + y_{i+1}), \ (i = \overline{1, N-1}); \\ \eta_{N} &= 2y_{N} - y_{N-1}. \end{aligned}$$
(8)

Для построения функции распределения разобьем прямоугольник

$$\left[\xi_0,\xi_N;\eta_0,\eta_N\right] \tag{9}$$

на *N*² прямоугольников вида

$$\left[\xi_{i-1},\xi_{i};\eta_{k-1},\eta_{k}\right];\left(i=\overline{1,N};k=\overline{1,N}\right).$$
 (10)

Далее выделим из всех прямоугольников (10) такие, которые содержат экспериментальные точки (7), и объединим их в множество S_{a} :

$$\sum_{k=1}^{N} \xi_{i(j)-1}, \xi_{i(j)}; \eta_{k(j)-1}, \eta_{k(j)}]; (j = 1, N);$$

$$S_{e} = \bigcap_{j=1}^{N} \left[\xi_{i(j)-1}, \xi_{i(j)}; \eta_{k(j)-1}, \eta_{k(j)} \right].$$

$$(11)$$

Будем считать, что внутри каждого из N прямоугольников (11) случайный вектор W_1, W_2 , распределен равномерно и вероятность попадания случайного вектора в каждый из них одинакова и равна 1/*N*. Эта вероятность для всех прочих прямоугольников равна нулю. Тогда плотность распределения имеет вид

$$\rho(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{N \cdot \Delta \xi_i \cdot \Delta \eta_k}, \\ \text{если} (x, y) \in \\ \in [\xi_{i-1}, \xi_i; \eta_{k-1}, \eta_k] \subset S_e; \\ 0, \\ \text{если} (x, y) \notin S_e, \end{cases}$$
(12)

где $\Delta \xi_i = \xi_i - \xi_{i-1};$ $\Delta \eta_k = \eta_k - \eta_{k-1}.$ В соответствии с формулой (12) условная функция распределения является неоднородной кусочно-билинейной функцией:

$$F(x, y) = a_{i,k} + b_{i,k} (x - \xi_{i-1}) + c_{i,k} (y - \eta_{k-1}) + d_{i,k} (x - \xi_{i-1}) (y - \eta_{k-1}),$$
(13)
если $(x, y) \in [\xi_{i-1}, \xi_i; \eta_{k-1}, \eta_k],$

где параметры получаются из условия непрерывности F (x, y) и граничных условий

$$F(\xi_0, y) = F(x, \eta_0) = 0$$

с помощью рекуррентных соотношений

$$b_{i,k} = b_{i,k-1} + d_{i,k-1}\Delta\eta_{k-1},$$

$$c_{i,k} = c_{i-1,k} + d_{i-1,k}\Delta\xi_{i-1},$$

$$a_{i,k} = a_{i-1,k-1} + b_{i-1,k-1}\Delta\xi_{i-1} +$$

$$+c_{i-1,k-1}\Delta\eta_{k-1} + d_{i-1,k-1}\Delta\xi_{i-1}\Delta\eta_{k-1},$$
(14)



Рис. 1. Вероятность ошибки второго рода как функция вероятности ошибки первого рода



Рис. 2. Оптимальный уровень значимости как функция априорной вероятности



Рис. 3. Минимизированная ошибка атрибуции

$$d_{i,k} = \begin{cases} \frac{1}{N \cdot \Delta \xi_{i} \cdot \Delta \eta_{k}}, \\ e \subset \Lambda \mu \ [\xi_{i-1}, \xi_{i}; \eta_{k-1}, \eta_{k}] \subset S_{e}; \\ 0, \\ e \subset \Lambda \mu \ [\xi_{i-1}, \xi_{i}; \eta_{k-1}, \eta_{k}] \notin S_{e}, \end{cases}$$
(14)

причем $a_{1,k} = a_{i,1} = b_{1,k} = c_{i,1} = 0.$ На рис. 1 приведена зависимость вероятности ошибки второго рода при оптимальном выборе допустимой области (1) согласно формуле (2). На рис. 2 приведена зависимость оптимального уровня значимости при заданной априорной информации о принадлежности больного к группе A, а на рис. 3 дана вероятность итоговой ошибки атрибуции пациента (см. формулу (5)).

Мы применили алгоритм атрибуции к данным групп А и В. В табл. 1 (столбцы справа) приведено количество ошибок при определении группы, в которую входит пациент. Мы приняли, что априорная вероятность $P_{4} = 0,5$, так как количество пациентов в обеих группах примерно одинаково. Отметим также, что в этом случае ошибка атрибуции близка к максимальному значению 0,25, как видно из графика на рис. 3. Данные табл. 1 (ложные атрибуции) показывают, что фактическая итоговая ошибка атрибуции близка к этой оценке.

Заключение

Пример применения предложенного критерия значимости показывает возможность его использования на практике, в частности в медицине при прогнозировании осложнений. Ясно, что вероятность ошибки определения класса, к которому относится данный объект, будет снижаться при увеличении числа пациентов с известным диагнозом.

Отметим, что построенный в данной работе алгоритм является оптимальным только в классе критериев со связной допустимой областью (см. формулу (1)). Однако в случае распределения более сложной формы, например, при мультимодальной плотности распределения, выбор несвязной допустимой области мог бы дать более мощный критерий.

Включение в критерий большего количества непрерывных переменных повысило бы надежность алгоритма. Однако расширение числа переменных вместе с тем усложнило бы нахождение оптимальной допустимой области.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кендалл М., Стюарт А. Многомерный статистический анализ и временные ряды. Пер. с англ. М.: Наука, 1976. 736 с.

2. Брандт 3. Статистические методы анализа наблюдений. Пер. с англ. М.: Мир, 1975. 312 с.

3. Севастьянов Б.А. Курс теории вероятностей и математической статистики. М.: Наука, 1982. 256 с.

4. 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. 90–97.

5. Watt K.W., Lee P.J., M'Timkulu T., Chan W., Loor R. Human prostate-specific antigen: structural and functional similarity with serine proteases // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1986. Vol. 83. No. 10. Pp. 3166–3170.

6. Пушкарь Д.Ю., Говоров А.В. Маркеры рака предстательной железы // Экспериментальная и клиническая урология. 2011. № 2–3. С. 19–21.

7. Жаринов Г.М., Богомолов О.А. Исходное время удвоения простатспецифического антигена: клиническое и прогностическое значение у больных раком предстательной железы // Онкоурология. 2014. Т. 10. № 1. С. 44-48.

8. Roberts S.G., Blute M.L., Bergstralh E.J., Slezak J.M., Zincke H. PSA doubling time as a predictor of clinical progression after biochemical failure following radical prostatectomy for prostate cancer // Mayo Clin. Proc. 2001. Vol. 76. No. 6. Pp. 576–581.

9. Богомолов О.А., Школьник М.И., Жаринов Г.М. Предоперационная кинетика простатспецифического антигена как фактор

прогноза безрецидивной выживаемости после радикальной простатэктомии // Онкоурология. 2014. Т. 10. № 4. С. 47–51.

10. Астанин С.А., Колобов А.В., Лобанов А.И., Пименова Т.П., Полежаев А.А., Соляник Г.И. Влияние пространственной гетерогенной среды на рост и инвазию опухоли. Анализ методами математического моделирования // Медицина в зеркале информатики. М.: Наука, 2008. С. 188–223.

11. Безруков Е.А., Лачинов Э.Л., Мартиросян Г.А. Факторы местного рецидива после радикальной простатэктомии // Медицинский вестник Башкортостана. 2015. Т. 10. № 3. С. 203-205.

12. Han M., Partin A.W., Zahurak M., Piantadopi S., Epstein J., Walsh P.S. Biochemical (prostate specific antigen) recurrence probability following radical prostatectomy for clinically localized prostate cancer // J. Urol. 2003. Vol. 169. No. 2. Pp. 517–523.

13. Богомолов О.А., Гарбарук В.В., Жуйков В.Н., Тихомиров С.Г. Распознавание образов в медицинской диагностике // Проблемы математической и естественнонаучной подготовки в инженерном образовании. Сб. трудов V Международной научно-методической конференции. СПб, 2018. С. 39–41.

14. 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 (August). e1003800. DOI: 10.1371/journal.pcbi.1003800.

15. Williams M.J., Werner B., Barnes C.P., Graham T.A., Sottoriva A. Identification of neutral tumor evolution across cancer types // Nature Genetics. 2016. Vol. 48. No. 3. Pp. 238–244.

Статья поступила в редакцию 21.10.2019, принята к публикации 19.12.2019.

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

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

ФОМЕНКО Виктор Николаевич — доктор физико-математических 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 vfomenko1943@gmail.com

REFERENCES

1. **Kendall M.G., Stuart A.,** Design and analysis, and time series, Charles Griffin & Co. Ltd., London, 1966.

2. **Brandt S.,** Statistical and computational methods in data analysis, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1970.

3. Sevastianov B.A., Kurs teorii veroyatnostey i matematicheskoy statistiki [The course of probability theory and mathematical statistics], Nauka, Moscow, 1982. (In Russ.)

4. Antonov V.I., Blagoveshchenskaya E.A., Bogomolov O.A., et al., The exponential model of cell growth: a simulation error, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 11 (3) (2018) 90–98. (In Russ.)

5. Watt K.W., Lee P.J., M'Timkulu T., et al., Human prostate-specific antigen: structural and functional similarity with serine proteases, Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 83 (10) (1986) 3166–3170.

6. **Pushkar' D.Yu., Govorov A.V.,** Prostate cancer markers, Experimental and Clinical Urology. (2–3) (2011) 19–21. (In Russ.)

7. **Zharinov G.M., Bogomolov O.A.,** The pretreatment prostate-specific antigen doubling time: clinical and prognostic values in patients with prostate cancer, Cancer Urology. 10 (1) (2014) 44–48. (In Russ.)

8. Roberts S.G., Blute M.L., Bergstrahh E.J., et al., PSA doubling time as a predictor of clinical progression after biochemical failure following radical prostatectomy for prostate cancer, Mayo Clin. Proc. 76 (6) (2001) 576–581.

9. Bogomolov O.A., Shkolnik M.I., Zharinov G.M., The preoperative kinetics of prostate-specific antigen as a predict of relapse-free survival after radical prostatectomy, Cancer Urology. 10 (4) (2014) 47–51. (In Russ.)

Received 21.10.2019, accepted 19.12.2019.

10. Astanin S.A., Kolobov A.V., Lobanov A.I., et al., Vliyaniye prostranstvennoy geterogennoy sredy na rost i invaziyu opukholi. Analiz metodami matematicheskogo modelirovaniya [The influence of the spatial heterogeneous medium on a tumor growth and invasion. An analysis by mathematical simulation methods], In: "Medicine in Informatics", Nauka, Moscow (2008) 188–223.

11. Bezrukov E.A., Lachinov E.L., Martirosyan G.A., Factors affecting local recurrence after radical proststectomy, Bashkortostan Medical Journal, Scientific Publication. 10 (3) (2015) 203–205. (In Russ.)

12. Han M., Partin A.W., Zahurak M., et al., Biochemical (prostate specific antigen) recurrence probability following radical prostatectomy for clinically localized prostate cancer, J. Urol. 169 (2) (2003) 517–523.

13. Bogomolov O.A., Garbaruk V.V., Zhuykov V.N., Tikhomirov S.G. Pattern recognition in medical diagnostics, Proceedings of the V International Scientific and Methodological Conference. Problems of Mathematical and Natural-Scientific Preparation in Engineering Education, St. Petersburg (2018) 39–41. (In Russ.)

14. Benzekry S., Lamont C., Beheshti A., 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.

15. Williams M.J., Werner B., Barnes C.P., et al., Identification of neutral tumor evolution across cancer types, Nature Genetics. 48 (3) (2016) 238–244.

THE AUTHORS

ANTONOV Valeriy I.

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

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

FOMENKO Victor N.

Emperor Alexander I St. Petersburg State Transport University 9 Moskovsky Ave., St. Petersburg, 190031, Russian Federation vfomenko1943@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2020

Хроника

АЛЕКСАНДР ЭПАМИНОНДОВИЧ ФОТИАДИ (к 80-летию со дня рождения)



16 апреля 2020 года исполнилось 80 лет со дня рождения видного ученого-физика Александра Эпаминондовича Фотиади – действительного члена Академии инженерных наук им. А.М. Прохорова, доктора физико-математических наук, профессора Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

Александр Эпаминондович является петербуржцем в третьем поколении. Его дед, выпускник Санкт-Петербургского технологического института, работал инженером на разных заводах Санкт-Петербурга; его отец, выпускник физико-математического факультета Ленинградского государственного университета, был выдающимся ученым-геофизиком, членом-корреспондентом АН СССР (по Сибирскому отделению).

Александр родился в Ленинграде, в крепкой семье единомышленников, перед

самой Великой Отечественной войной, окончил среднюю школу с золотой медалью и, выдержав тяжелейший конкурс, поступил в 1958 году на факультет радиоэлектроники Ленинградского политехнического института. В 1963 году А.Э. Фотиади блестяще оканчивает институт и получает диплом инженера-физика по специальности «Физическая электроника».

Вся его дальнейшая жизнь, со студенческих лет и по настоящее время, неразрывно связана с Санкт-Петербургским политехническим университетом, факультетом радиоэлектроники (впоследствии радиофизическим), кафедрой физической электроники (ныне Высшая инженерно-физическая школа). В 1972 году, после окончания аспирантуры, он защищает кандидатскую диссертацию на тему «Влияние магнитного поля на работу аргонового лазера» (научный руководитель - доктор физико-математических наук С.А. Фридрихов), а в 1993 году – докторскую диссертацию на тему «Кинетика активных сред газоразрядных лазеров постоянного тока на переходах атомов и ионов». В 2002 году он был избран действительным членом Академии инженерных наук им. А.М. Прохорова Российской Федерации.

Он известный специалист в области физики газовых лазеров. В процессе своей научной деятельности А.Э. Фотиади всегда проявлял и проявляет незаурядные лидерские качества. Он был одним из организаторов, а затем и руководителем (с 1978 года) первой в Политехническом институте лаборатории оптических квантовых генераторов. Александром Эпаминондовичем был предложен и реализован принципиально новый подход к исследованию многопараметрических систем, который был успешно использован при изучении и анализе активных сред газоразрядных лазеров. В результате были получены богатейшие сведения о плазменно- и

магнитооптических явлениях в атомарных и ионных газоразрядных лазерах, созданы кинетические модели активных сред самых распространенных газовых лазеров, разработаны бесконтактные слабовозмущающие методы диагностики и анализа свойств лазерных активных сред серийных приборов, предложены и реализованы эффективные методы управления характеристиками этих устройств. В итоге ведущие лазерные центры нашей страны успешно использовали результаты этих работ при разработке новой техники. Были созданы новые эффективные источники оптического излучения; интересны и практически очень важны созданные лабораторией методы обработки данных лазерного зондирования атмосферы. Широкую известность получили работы по изучению явления светорассеяния дисперсными средами различной природы, в том числе биологической. И далее вектор интересов ученого сместился в область новой биомедицинской техники, оптических методов экспресс-диагностики медико-биологических систем. Научные достижения А.Э. Фотиади и его сотрудников отражены в более чем 160 научных трудах, в том числе в трех монографиях и пяти изобретениях. Из последних работ можно выделить монографию «Лазеры и экологический мониторинг атмосферы» (вышла в 2013 году, в соавторстве с В.Е. Приваловым и В.Г. Шеманиным), а также статью 2019 года, посвященную повышению контрастности визуализации биологических тканей при хирургических операциях (в авторском коллективе из 7 человек).

Успешное руководство лабораторией привело А.Э. Фотиади на более высокие административные должности: в течение шестнадцати лет (с 1998 по 2014 год) Фотиади возглавлял кафедру физической электроники, а в течение семи лет (с 2002 по 2009 год) был деканом радиофизического факультета. С высокой работоспособностью и энергией, присущей А.Э. Фотиади, он успешно сочетает свою научную и организаторскую деятельность с педагогической. Помимо традиционного чтения лекций, он разработал концепцию и организовал подготовку на факультете специалистов-физиков, ориентированных на работу в интересах биологии и медицины. При его непосредственном участии была разработана магистерская программа «Физика медицинских технологий» (в рамках образовательного направления «Техническая физика»), а также открыта специализация «Физика и диагностика медико-биологических систем» (в рамках инженерной специальности «Физическая электроника»).

В развитие всемирно признанной «классической» инженерно-физической школы академика А.Ф. Иоффе, им была разработана концепция организации инновационного учебного процесса по подготовке конкурентоспособных специалистов для наукоемких областей техники и технологии на базе специализированных научно-образовательных центров. Для реализации выдвинутой концепции по его инициативе и при его непосредственном участии на радиофизическом факультете СПбГПУ был создан научно-образовательный центр «Физика нанокомпозитных материалов электронной техники». На базе этого центра на факультете была организована подготовка высококлассных специалистов в области микро- и наноэлектроники.

Юбиляру свойственны неиссякаемая жизненная энергия, редкая работоспособность и умение рационально строить свою деятельность. Благодаря этим качествам, ему удается сочетать глубину научных исследований и педагогическую основательность с работой в многочисленных организациях. Александр Эпаминондович является членом президиума Научно-методического совета Министерства образования и науки Российской Федерации по физике, председателем Научно-методического совета по направлению «Техническая физика» Учебно-методического объединения (УМО) высших учебных заведений по университетскому политехническому образованию Российской Федерации. Кроме того, он занимает пост председателя научно-методической комиссии по специальности «Физическая электроника» УМО по образованию в области радиотехники, электроники, биомедицинской физики и автоматизации Министерства образования и науки Российской Федерации.

Высокопрофессиональные заслуги и большая организаторская работа А.Э. Фотиади имеют высокую значимость в самых разных аспектах, они внесли достойный вклад в престиж Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого. Ему по праву присвоены почетные звания «Заслуженный работник высшей школы Российской Федерации», «Почетный работник высшего профессионального образования Российской Федерации». Александру Эпаминондовичу вручен диплом и памятный знак лауреата премии Правительства Санкт-Петербурга за выдающиеся достижения в области высшего и среднего профессионального образования по направлению «научные достижения, способствующие повышению качества подготовки специалистов и кадров высшей квалификации». Он также награжден несколькими медалями, в том числе медалью им. Ю.А. Гагарина.

Несмотря на все испытания властью и славой, Александр Эпаминондович остался Человеком. Среди его прекрасных человеческих качеств можно выделить порядочность и интеллигентность. Они выражаются не только в обширных знаниях, но и способностях к пониманию других людей и любви к ним. Это проявляется как в серьезных проблемах, так и в тысяче мелочей: радоваться успехам молодых, помогать в трудной ситуации, ценить таланты и способности и не хвастаться своими, всегда и со всеми здороваться, уметь уважительно выслушивать собеседника, не навязывать своего мнения и т. п.

В заключение считаем важным отметить издательскую деятельность А.Э. Фотиади, которой он уделяет много времени уже более десяти лет, несмотря на свою постоянную загруженность другими делами. Он является заместителем главного редактора (председателя редакционной коллегии) нашего журнала. Благодаря его научным контактам, авторитету ученого, журнал постоянно пополняется добротными научными статьями; присылаемые материалы рецензируются высококвалифицированными специалистами в самых разных областях физики и математики. Александр Эпаминондович внес неоценимый вклад в успех журнала: с 2019 года наше издание стало индексироваться в базе данных Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

Редакционный совет и редакционная коллегия журнала с радостью присоединяются к многочисленным поздравлениям юбиляру с 80-летием. Эта знаменательная дата символизирует гармоничное сочетание мудрости и богатого разностороннего опыта. От всей души желаем Вам энергии, оптимизма и реализации всех творческих планов! Крепкого Вам здоровья, радости, счастья и благополучия! Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 13 (1) 2020

Научное издание

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

«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS» TOM 13, № 1, 2020

Учредитель и издатель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор В.К. Иванов – председатель ред. коллегии д-р физ.-мат. наук, профессор А.Э. Фотиади – зам. председателя ред. коллегии канд. физ.-мат. наук, доцент В.М. Капралова – ответственный секретарь канд. физ.-мат. наук О.А. Ящуржинская – научный редактор, корректор А.С. Колгатина – переводчик Н.А. Бушманова – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

Сайт http://ntv.spbstu.ru

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка Н.А. Бушмановой

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого Адрес университета:195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

1.ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания "Научно-технические ведомости СПбГПУ". Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782. В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание ISSN 2304-9782 (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика**, включая следующие шифры научных специальностей: 01.02.04, 01.02.05, 01.04.01, 01.04.02, 01.04.03, 01.04.04, 01.04.05, 01.04.06, 01.04.07, 01.04.10, 01.04.15, 01.04.21.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базах данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ 2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, нежелательны ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word.

6. **Формулы** набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word) (мелкие формулы, символы и обозначения набираются без использования редактора формул). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется на букву «е» и оставляется только в фамилиях.

7. Рисунки (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и таблицы оформляются в виде отдельных файлов. Рисунки представляются только в черно-белом варианте. Шрифт – Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (http:// journals.spbstu.ru). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться ДОСРОЧНО.

Более подробную информацию можно получить по телефону редакции: (812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Бушманова Наталья Александровна или по e-mail: physics@spbstu.ru