

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

Том 13, №3
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;

Сулис Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, — главный редактор;

Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, — зам. главного редактора;

Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия — ответственный секретарь;

Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр
Техасского университета, Даллас, США;

Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;

Лобода О.С., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия;

Малерб Й.Б., Dr.Sc. (Physics), профессор, университет Претории, ЮАР;

Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Привалов В.Е., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;

Смирнов Е.М., 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 ВИНТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

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

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 цитирования**» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте

<http://www.elibrary.ru>

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства:

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

Тел. редакции (812) 294-22-85.

<http://ntv.spbstu.ru/physics>

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2020

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE
POLYTECHNICAL UNIVERSITY
JOURNAL

Physics
and Mathematics

**VOLUME 13, No.3,
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;

A.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. Donetskii – 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 peer-reviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

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

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

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

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

The journal is in the **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

Васильев А.Э., Козловский В.В., Колгатин С.Н. Вклад процессов внутренней ионизации полупроводников в тормозные потери энергии релятивистских электронов (статья на английском языке)..... 7

Стукова Е.В., Барышников С.В. Фазовые переходы в композитах на основе хлорида диизопропиламмония и титаната свинца..... 15

Математическое моделирование физических процессов

Верховцев А.В., Король А.В., Сушко Г.Б., Шрамм Ш., Соловьёв А.В. Обобщенная поправка к потенциалам погруженного атома для моделирования равновесных и неравновесных свойств металлов (статья на английском языке)..... 23

Чернышов А.Д., Сайко Д.С., Горяйнов В.В. Кузнецов С.Ф., Никифорова О.Ю. Точные решения задачи о диффузии в прямоугольной емкости с внутренним источником, полученные методом быстрых разложений..... 42

Засимова М.А., Иванов Н.Г., Марков Д. Численное моделирование циркуляции воздуха в помещении при подаче из плоской щели. I. Отработка применения вихреразрешающего подхода с использованием периодической постановки..... 56

Засимова М.А., Иванов Н.Г., Марков Д. Численное моделирование циркуляции воздуха в помещении при подаче из плоской щели. II. LES-расчеты для помещения конечной ширины..... 75

Приборы и техника физического эксперимента

Николаев П.Н. Алгоритм формирования начального приближения в задаче томографии ионосферы при межспутниковой схеме регистрации данных..... 93

Чумаков Ю.С., Храпунов Е.Ф., Малых А.Д. Экспериментальное исследование влияния крупномасштабных возмущений на ламинарно-турбулентный переход в свободноконвективном слое на вертикальной поверхности..... 108

Биофизика и медицинская физика

Соболев М.Е., Горелик А.Л., Власова О.Л. Разработка и применение нового физико-математического метода анализа количественных электроэнцефалограмм..... 119

Теоретическая физика

Горобей Н.Н., Лукьяненко А.С., Гольцев А.В. Параметры преобразования симметрии как классические динамические переменные в калибровочной теории (статья на английском языке)..... 130

Математика

Антонов В.И., Семенютин В.Б., Алиев В.А. Модели и методы исследования ауторегуляции мозгового кровообращения человека..... 136

Contents

Condensed matter physics

- Vasiliev A.E., Kozlovski V.V., Kolgatin S.N.** *Contribution of internal ionization processes in semiconductors to radiative losses of relativistic electrons*..... 7
- Stukova E.V., Baryshnikov S.V.** *Phase transitions in composites based on diisopropylammonium chloride and lead titanate*..... 15

Simulation of physical processes

- Verkhovtsev A.V., Korol A.V., Sushko G.B., Schramm S., Solov'yov A.V.** *Generalized correction to embedded-atom potentials for simulation of equilibrium and nonequilibrium properties of metals*..... 23
- Chernyshov A.D., Sajko D.S., Goryainov V.V., Kuznetsov S.F., Nikiforova O.Yu.** *The diffusion problem in a rectangular container with an internal source: exact solutions obtained by the fast expansion method*..... 42
- Zasimova M.A., Ivanov N.G., Markov D.** *Numerical modeling of air distribution in a test room with 2D sidewall jet. I. Foundations for eddy resolving approach application based on periodical formulation*..... 56
- Zasimova M.A., Ivanov N.G., Markov D.** *Numerical modeling of air distribution in a test room with 2D sidewall jet. II. LES-computations for the room with finite width*..... 75

Experimental technique and devices

- Nikolaev P.N.** *An algorithm of the initial approximation formation in the ionospheric tomography problem with inter-satellite data registration*..... 93
- Chumakov Yu.S., Khrapunov E.F., Malykh A.D.** *The effect of large-scale disturbances on the laminar-turbulent transition in a free-convective layer on a vertical surface: an experimental study*..... 108

Biophysics and medical physics

- Sobolev M.E., Gorelik A.L., Vlasova O.L.** *A novel physico-mathematical technique of analyzing the quantitative electroencephalograms: development and application*..... 119

Theoretical Physics

- Gorobey N.N., Lukyanenko A.S., Goltsev A.V.** *Symmetry transformation parameters as classical dynamic variables in the gauge theory*..... 130

Mathematics

- Antonov V.I., Semenyutin V.B., Aliev V.A.** *Studies in the autoregulation of human cerebral circulation: models and methods*..... 136

DOI: 10.18721/JPM.13301
UDC 621.38+539.1

CONTRIBUTION OF INTERNAL IONIZATION PROCESSES IN SEMICONDUCTORS TO RADIATIVE LOSSES OF RELATIVISTIC ELECTRONS

A.E. Vasiliev¹, V.V. Kozlovski¹, S.N. Kolgatin²

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

² Bonch-Bruевич St. Petersburg State University of Telecommunications,
St. Petersburg, Russian Federation

The study presents analysis of mass radiative energy losses (RL) incurred by relativistic electrons in different materials commonly used in semiconductor electronics. We have specifically focused on accounting for the processes of 'internal' ionization, resulting in the production of electron-hole pairs in semiconductors and dielectrics. We have established that accounting for these processes is the only method offering consistent explanations on the values of mass RLs observed experimentally. The analysis performed should allow to make more detailed predictions for the performance of semiconductor devices in real conditions, particularly, in space.

Keywords: relativistic electron, ionization potential, radiative energy losses, silicon, germanium, graphene

Citation: Vasiliev A.E., Kozlovski V.V., Kolgatin S.N., Contribution of internal ionization processes in semiconductors to radiative losses of relativistic electrons, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 7–14. DOI: 10.18721/JPM.13301

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

ВКЛАД ПРОЦЕССОВ ВНУТРЕННЕЙ ИОНИЗАЦИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ В ТОРМОЗНЫЕ ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ

А.Э. Васильев¹, В.В. Козловский¹, С.Н. Колгатин²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций
им. проф. М.А. Бонч-Бруевича, Санкт-Петербург, Российская Федерация

Выполнен анализ массовых тормозных потерь энергии (ТПЭ) релятивистских электронов в различных материалах, используемых в полупроводниковой электронике. Особое внимание уделено учету процессов «внутренней» ионизации, приводящей к образованию электронно-дырочных пар в полупроводниках и диэлектриках. Показано, что только при таком учете удается непротиворечиво объяснить экспериментально наблюдаемые значения массовых ТПЭ. Проведенный в работе анализ позволит выполнять более детальное прогнозирование работоспособности полупроводниковых приборов в реальных, в частности космических, условиях.

Ключевые слова: релятивистский электрон, потенциал ионизации, тормозные потери энергии, кремний, германий, графен

Ссылка при цитировании: Васильев А.Э., Козловский В.В., Колгатин С.Н. Вклад процессов внутренней ионизации полупроводников в тормозные потери энергии релятивистских элект-

Introduction

While the effects of electron irradiation on the properties of semiconductor structures and devices have been considered in numerous papers and books [1 – 4], many aspects of this problem are yet to be fully understood. Most studies tend to focus on the role of elastic processes and the effect of emerging radiation defects on the properties of materials and devices [4 – 8]. The contribution from inelastic energy losses of bombarding particles is discussed to a far lesser extent. However, it is the inelastic processes that determine the resistance to electron radiation for a number of semiconductor devices, e.g., metal-oxide-semiconductor (MOS) structures and field-effect transistors [9].

The goal of our study is to investigate the ionization losses and the absorbed energy of relativistic electrons in different materials used in semiconductor electronics. In particular, we concentrated on the processes of ‘internal’ ionization leading to production of electron-hole pairs in semiconductors and dielectrics. Relativistic electrons of 0.9 MeV ($V = 0.94c$) were used as irradiating particles. The particles and the energy were chosen so that the computational data could be verified experimentally with the RTE-IV electron accelerator available at Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Estimation of radiative energy losses of relativistic electrons within the Born approximation of scattering theory

In general, calculating the absorbed energy is a complex problem that can be best solved by numerical methods. We confine ourselves to considering the situation when the thickness of the irradiated sample is much lower than the particle range, which is the case in most applied problems.

The absorbed dose D_e depends on linear radiative losses (RL) of the bombarding electrons (dE/dx) in the medium:

$$D_e = (1/\rho) \cdot (dE/dx) F_e \quad (1)$$

Here ρ is the density of the medium, F_e is the exposure dose, often referred to as fluence.

The quantity $(1/\rho) \cdot (dE/dx)$ which is called the reduced (or mass) RL, is more common in practice. For convenience, Eq. (1) can be transformed by introducing the units widely used for the quantities included in this formula:

$$D_e = 1.6 \cdot 10^{-10} (1/\rho) \cdot (dE/dx) F_e; \quad (2)$$

D_e is given here in grays (Gy), mass RL $(1/\rho) \cdot (dE/dx)$ in MeV·(cm²/g), F_e in cm⁻².

Eq. (2) allows calculating the absorbed dose at a known particle fluence. The inverse formula for estimation of the fluence required to obtain a known absorbed dose takes the following form:

$$F_e = \frac{1}{1.6 \cdot 10^{-10} (1/\rho) \cdot (dE/dx)} \quad (3)$$

The stopping power of MeV electrons is mainly due to ionization and excitation of bound electrons in target atoms (ionizing losses). Therefore, the notions of radiative and ionizing energy losses are virtually identical in this case. Ionizing energy losses (IEL) of relativistic electrons due to excitation and ionization of target electrons are described by the Bethe formula obtained within the Born approximation of scattering theory [10]:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{ion} = \frac{2pN_{at}Ze^4}{m_eV^2} \times \left(\ln \frac{m_eV^2E}{2I^2(1-\beta^2)} - \ln 2(2(1-\beta^2)^{1/2} - 1 + \beta^2) + 1 - \beta^2 + \frac{[1 - (1-\beta^2)^{1/2}]^2}{8} \right), \quad (4)$$

where E is the kinetic energy of the relativistic electron, V is the velocity of the incident electron,

$\beta = V/c$ is the relativistic factor, I is the mean ionization potential of the target atoms.

IEL linearly depend on the number of electrons per unit of the target volume (electron density), N_e . Electron density, in turn, is known to be proportional to the density of the medium:

$$N_e = Z \cdot N_{at} = Z \cdot \rho \cdot N_0 / A. \quad (5)$$

Here N_0 is the Avogadro constant; A is the atomic mass of the medium.

The first (logarithmic) term in curly brackets in the Bethe formula (4) exceeds the remaining terms by an order of magnitude in the given examples. For this reason, Eq. (4) can be simplified by omitting all terms except the first one.

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{ion} = \frac{2\pi N_{at} Z e^4}{m_e V^2} \left(\ln \frac{m_e V^2 E}{2 I^2 (1-\beta^2)} \right). \quad (6)$$

Let us express the squared initial velocity of the incident electron in terms of the relativistic factor

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{ion} = \frac{2\pi N_{at} Z e^4}{m_e \beta^2 c^2} \left(\ln \frac{m_e \beta^2 c^2 E}{2 I^2 (1-\beta^2)} \right). \quad (7)$$

Let us rewrite the factor in front of the logarithm in expression (7), introducing the Rydberg energy E_R and the Bohr radius r_0 widely used in atomic physics:

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{ion} = \frac{8\pi N_{at} Z E_R^2 r_0^2}{m_e \beta^2 c^2} \times \left(\ln \frac{m_e \beta^2 c^2 E}{2 I^2 (1-\beta^2)} \right), \quad (8)$$

$$E_R = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 13.6 \text{ eV}, \quad (9)$$

$$r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ cm}.$$

Now Eq. (8) can be used for linear IEL to obtain the formula for mass RL $(1/\rho) \cdot (dE/dx)$, given that the density of the medium $\rho = A \cdot N_{at} / N_0$:

$$-\frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{ion} = \frac{8\pi N_{at} Z E_R^2 r_0^2}{m_e c^2} \times \frac{Z}{A \cdot \beta^2} \left(\ln \frac{m_e \beta^2 c^2 E}{2 I^2 (1-\beta^2)} \right). \quad (10)$$

Or, substituting the universal constants, we arrive to:

$$-\frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{ion} (\text{MeV} \cdot \text{cm}^2 / \text{g}) = 0.154 \cdot \frac{Z}{A \cdot \beta^2} \left(\ln \frac{0.511 \cdot 10^6 \cdot \beta^2 E}{2 I^2 (1-\beta^2)} \right). \quad (11)$$

It is often assumed that normalized linear IEL reduced to electron density in the target (or normalized mass RL reduced to mass-to-charge ratio of the target nucleus),

$$\frac{1}{\rho} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{ion} \left(\frac{A}{Z} \right) = \frac{1}{\beta^2} \left(\ln \frac{m_e \beta^2 c^2 E}{2 I^2 (1-\beta^2)} \right) = K(Z), \quad (12)$$

is a quantity independent of the material of the stopping target, equal to $18/\beta^2$ [11]. This implies that the contribution from variation of the mean ionization potential under the logarithm in Eq. (11) is small. Making this assumption, we can use Eq. (11) to easily calculate mass RL in any medium based on the experimentally found RL, for example, in aluminum [12]:

$$\left(\frac{1}{\rho} \cdot \frac{dE}{dx} \right)_x = \left(\frac{1}{\rho} \cdot \frac{dE}{dx} \right)_{Al} \times \left(\frac{Z}{A} \right)_x / \left(\frac{Z}{A} \right)_{Al}. \quad (13)$$

We believe that neglecting the contribution from the ionization potential of the target atoms and using Eq. (13) is ill-suited for our problems. For this reason, Eq. (11) was used to calculate RL in some materials common for semiconductor electronics. Semiconductors with different band gaps, and metals with different ohmic and

rectifying contacts were selected. The mean ionization potential I and mass RL of electrons were approximated for these materials. The value of I was taken equal to Ref. [13]:

$$\begin{aligned} I &= 11.5Z \text{ (for } Z < 15), \\ I &= 9.0Z \text{ (for large } Z). \end{aligned} \quad (14)$$

The data obtained are given in Table 1. The table also lists the coefficients for calculating the absorbed dose at a known fluence (by Eq. (2)) and calculating the fluence at a known absorbed dose (by Eq. (3)).

As evident from Table 1, mass RL and conversion factors between the exposure and absorbed doses can differ by 1.7 times for most materials (with the atomic number Z ranging from 6 to 79).

The Bragg rule was used for the case when the stopping medium was a chemical compound consisting of several elements [13]. According to this rule, the stopping power of a complex substance is equal to the weighted sum of stopping powers of the constituent elements:

$$\frac{1}{\rho} \cdot \frac{dE}{dx} = \frac{\omega_1}{\rho_1} \cdot \left(\frac{dE}{dx} \right)_1 + \frac{\omega_2}{\rho_2} \cdot \left(\frac{dE}{dx} \right)_2 \quad (15)$$

where ω_1 and ω_2 are the relative proportions of elements in the compound (wt. %).

Eq. (15) was used to calculate the stopping powers of silicon oxide (dielectric) and silicon carbide (wide-bandgap semiconductor). Both values of $1/\rho \cdot (dE/dx)$ coincided and were equal to $1.61 \text{ MeV} \cdot (\text{cm}^2/\text{g})$.

Fig. 1 shows the curve for mass RL normalized to mass-to-charge ratio of the target nucleus $K(Z)$, as a function of the nuclear charge; the dependence was obtained by Eq. (12). This curve can be extrapolated by the dependence

$$K(Z) \sim \frac{1}{\beta^2} \ln \left(\frac{\text{const}}{Z^2} \right). \quad (16)$$

As follows from Fig. 1, substituting the curve with a straight line $K(Z) = 18/\beta^2$ is not entirely acceptable for light and heavy targets.

According to the Bethe formula, targets with close values of Z should also have close values of mass RL. For example, it can be seen from Table 1 that the elements with $Z = 13$ (aluminum) and $Z = 14$ (silicon) have virtually the same calculated values of mass RL (1.53 and $1.56 \text{ MeV} \cdot (\text{cm}^2/\text{g})$, respectively). However, it was experimentally confirmed in Ref. [14] that RL in silicon are higher than in aluminum by almost 1.5 times (1.5 and $2.1 \text{ MeV} \cdot (\text{cm}^2/\text{g})$, respectively). Possible explanations for this difference may lie in the mechanism of internal ionization in semiconductors.

T a b l e 1
Mean ionization potentials, mass RL, and coefficients for converting absorbed dose to fluence (and vice versa) for irradiation of different materials used in modern semiconductor electronics with 0.9 MeV electrons

Target material	I	$(1/\rho) \cdot (dE/dx)$	F/D
	eV	$\text{MeV} \cdot (\text{cm}^2/\text{g})$	$1/\text{Gy} \cdot \text{cm}^2$
Graphene	69	1.72	$3.6 \cdot 10^9$
Aluminum	150	1.53	$4.1 \cdot 10^9$
Silicon	161	1.56	$4.0 \cdot 10^9$
Germanium	288	1.29	$4.8 \cdot 10^9$
Gold	711	1.04	$6.0 \cdot 10^9$

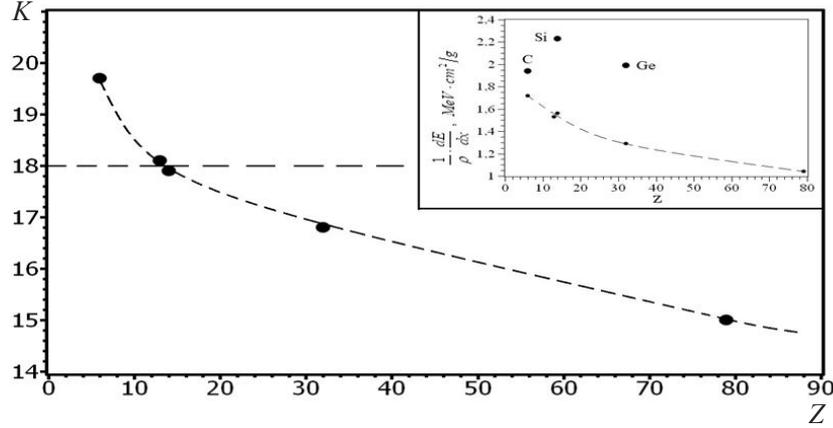


Fig. 1. Mass RL normalized to mass-to-charge ratio of target nucleus $K(Z)$ as a function of nuclear charge; obtained by Eq. (12).

The inset shows mass RL as a function of the nuclear charge calculated by Eq. (11) within the Born approximation of scattering theory. The black dots indicate mass RL values obtained taking into account the internal ionization for graphene, silicon, and germanium

Contribution from internal ionization of semiconductors to radiative energy losses of relativistic electrons

The concept of internal ionization is introduced for condensed matter. Internal ionization in semiconductors and dielectrics corresponds to the transition of valence electrons to the conduction band (band-to-band transition). Klein [15] suggested an equation relating the energy for production of an electron-hole pair E_i and the band gap E_g (in eV):

$$E_i = 2.67E_g + 0.87, \quad (17)$$

establishing that the internal ionization energy is approximately three times more than the band gap.

E_i is higher than E_g because the energy of relativistic electrons is spent not only for ionization but also for generation of excited states in a solid, i.e., plasmons and phonons. Table 2 gives the energies E_i and E_g for the main materials used in modern semiconductor electronics (silicon, germanium) and graphene.

Since the average ionization potential, which is equal to $\sim 9Z$ for most elements, is significantly (by orders of magnitude) higher than the energy for the production of electron-hole pairs in semiconductors, the main result of electron stopping is a sharp increase in the concentration of charge carriers. Mass RL are estimated by substituting into Eq. (10) the energies for production of electron-hole pairs for the materials

T a b l e 2
Band gap, energy for production of electron-hole pairs, mass RL and pair production rate by single relativistic electron for three semiconductor materials

Target material	E_g	E_i	$(1/\rho) \cdot (dE/dx)$ MeV·(cm ² /g)	N_{e-p}/F cm ⁻¹
	eV			
Graphene	5.2	18.7	1.94	$1.6 \cdot 10^5$
Silicon	1.12	3.6	2.23	$1.4 \cdot 10^6$
Germanium	0.67	2.9	1.99	$3.7 \cdot 10^6$

listed in Table 2. The results obtained are given in column 3 of Table 2. Comparing the data in Table 1 and Table 2, we can conclude that taking into account internal ionization changes (that is, increases) the capacities for RL: for example, by almost 50 % for silicon and germanium (up to $2.23 \text{ MeV} \cdot (\text{cm}^2/\text{g})$). With this factor taken into account, the calculated values of mass RL ($2.23 \text{ MeV} \cdot (\text{cm}^2/\text{g})$) are much closer to the experimental ones ($2.21 \text{ MeV} \cdot (\text{cm}^2/\text{g})$) [14]. The black dots in the inset at Fig. 1 correspond to the values of mass RL normalized to mass-to-charge ratio of the target nucleus, accounting for internal ionization for graphene, silicon, and germanium. Let us estimate the concentration of electron-hole pairs produced by a single relativistic electron (N_{e-p}/F), dividing linear RL by pair production energy. This data is given in column 4. For example, this value for silicon is $1.4 \cdot 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Let us estimate the production rate of electron-hole pairs for the real electron accelerator running at Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University. Irradiation with electrons is performed using an RTE-IV pulse accelerator. Pulse frequency is 450 Hz, pulse duration 370 μs , duty cycle 1/6. A beam with a current of 1 mA and a cross-sectional diameter of 0.9 cm scans over an area of $2 \times 40 \text{ cm}$. The mean current density of the beam during irradiation with electrons is taken to be $12.5 \mu\text{A} \cdot \text{cm}^{-2}$; however, the current density in the pulse is much higher, reaching $6 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$. The electron flux density in the pulse at such currents is $3.6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$, and the total production rate

for electron-hole pairs upon electron irradiation reaches a huge value $(1.4 \cdot 10^6 \cdot 3.6 \cdot 10^{16}) = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$. An additional charge is generated upon irradiation of MOS structures and field-effect transistors at the insulator-semiconductor interface and in the bulk of the insulator due to production of electron-hole pairs, resulting in a change in the main characteristic, which is the threshold voltage of the device [9].

Summary

The results obtained in the course of our investigation led us to the following conclusions:

1. Accounting for internal ionization of semiconductors due to production of electron-hole pairs changes (increases) the stopping powers of relativistic electrons, for example, by almost 50% for silicon and germanium.
2. This in turn offers a consistent explanation for the values of mass RL observed experimentally.
3. The analysis carried out in the study should allow making more effective and more detailed predictions for the performance of semiconductor devices in real conditions, particularly, in space.

Acknowledgments

This study was supported by the Academic Excellence Project 5-100 proposed by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

We are grateful to Prof. Vadim Ivanov (Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University) for the insights provided.

REFERENCES

1. **Lebedev A.A.**, Materials research foundations, Vol. 6. Radiation Effects in Silicon Carbide, Material Research Forum LLC, Millersville, 2017.
2. **Claeys C., Simoen E.**, Radiation effects in advanced semiconductor materials and devices, Springer-Verlag, Berlin, 2002.
3. **Kozlovskiy V.V., Vasilyev A.E., Emtsev V.V., et al.**, The Frenkel pairs formation in the silicon under high energy electron and proton irradiation, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (2 (122)) (2011) 13–21 (in Russian).
4. **Van Lint V.A., Flanagan T.M., Leadon R.E., et al.**, Mechanisms of radiation effects in electronic materials, John Wiley & Sons Inc., New York, 1980.
5. **Lutz J., Schlangenotto H., Scheuermann U., De Doncker R.**, Semiconductor power devices physics, characteristics, reliability, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2011.
6. **Iwamoto N., Svensson B.G.**, Semiconductors and semimetals, Vol. 91. Part of the volume:



Defects in semiconductors, Chap. Ten – Point defects in silicon carbide, Elsevier (2015) 369–407.

7. **Holmes-Siedle A., Adams L.**, Handbook of radiation effects, Oxford University, Oxford, 1993.

8. **Lehmann C.**, Interaction of radiation with solids and elementary defect production, North-Holland, Amsterdam, 1977.

9. **Lebedev A.A., Kozlovski V.V., Levinshstein M.E., et al.**, Effect of high energy (15 MeV) proton irradiation on vertical power 4H-SiC MOS-FETs, Semiconductor Science and Technology. 34 (4) (2019) 045004.

10. **Bethe H.A., Ashkin J.**, Experimental nuclear physics, Vol. 1. Ed. by E. Segre, Wiley, New York, 1953.

11. **Marion I.B., Young F.C.**, Nuclear reaction analysis: Graphs and tables, North Holland Pub-

lishing Co., Amsterdam, 1968.

12. **Corbett J.W., Bourgoin J.C.**, Point defects in solids, Vol. 2. Semiconductors and molecular crystals, Defect creation in semiconductors, Ed. by J.H. Crawford and L.M. Slifkin. Springer, Boston, 1975.

13. Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe, Ed. by M.E. Levinshstein, S.L. Rumyantsev, M.S. Shur, John Wiley & Sons, New York, 2001.

14. **Combasson J.L., Farmery B.W., McCulloch D., et al.**, Ion ranges in aluminum and silicon, Radiation Effects. 36 (3–4) (1978) 149–156.

15. **Klein C.P.**, Radiation ionization energies in semiconductors – Speculations about the role of plasmons, Proceedings of the 8th International Conference on the Physics of Semiconductors, Kyoto (Japan) (1966) 307–311.

Received 17.06.2020, accepted 05.08.2020.

THE AUTHORS

VASILIEV Alexander E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

vasiliev_ae@spbstu.ru

KOZLOVSKI Vitaly V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

vkozlovski@phmf.spbstu.ru

KOLGATIN Sergey N.

Bonch-Bruевич St. Petersburg State University of Telecommunications

61 Moika Emb., St. Petersburg, 191186, Russian Federation

kolgatins@gmail.com

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Lebedev A.A.** Materials research foundations. Vol. 6. Radiation effects in silicon carbide. Millersville: Material Research Forum LLC, 2017. 178 p.

2. **Claeys C., Simoen E.** Radiation effects in advanced semiconductor materials and devices. Berlin: Springer-Verlag, 2002. 401 p.

3. **Козловский В.В., Васильев А.Э., Емцев В.В., Оганесян Г.А., Колгатин С.Н.** образо-

вание пар Френкеля в кремнии под действием электронов и протонов высоких энергий // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2011. № 2 (122). С. 13–21.

4. **Van Lint V.A., Flanagan T.M., Leadon R.E., Naber J.A., Rogers V.C.** Mechanisms of radiation effects in electronic materials. New York:

John Wiley & Sons Inc., 1980. 359 p.

5. **Lutz J., Schlangenotto H., Scheuermann U., de Doncker R.** Semiconductor power devices physics. Characteristics, reliability. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. 536 p.

6. **Iwamoto N., Svensson B.G.** Semiconductors and semimetals. Vol. 91. Part of the volume: Defects in Semiconductors. Chapter Ten – Point Defects in Silicon Carbide. Elsevier, 2015. Pp. 369–407.

7. **Holmes-Siedle A., Adams L.** Handbook of radiation effects. Oxford: Oxford University, 1993. 479 p.

8. **Lehmann C.** Interaction of radiation with solids and elementary defect production. Amsterdam: North-Holland, 1977. 341 p.

9. **Lebedev A.A., Kozlovski V.V., Levinshtein M.E., Ivanov P.A., Strel'chuk A.M., Zubov A.V., Fursin L.** Effect of high energy (15 MeV) proton irradiation on vertical power 4H-SiC MOSFETs // Semiconductor Science and Technology. 2019. Vol. 34. No. 4. P. 045004.

10. **Bethe H.A., Ashkin J.** Experimental nucle-

ar physics. Vol. 1. Ed. by E. Segre. New York: Wiley, 1953. 662 p.

11. **Marion I.B., Young F.C.** Nuclear reaction analysis: graphs and tables. Amsterdam: North Holland Publishing Co., 1968. 169 p.

12. **Corbett J.W., Bourgoin J.C.** Point defects in solids. Vol. 2. Semiconductors and molecular crystals. Defect creation in semiconductors. Ed. by J.H. Crawford and L.M. Slifkin. Boston: Springer, 1975. 166 p.

13. Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe. Ed. by M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, M.S. Shur. New York: John Wiley & Sons, 2001. 216 p.

14. **Combasson J.L., Farmery B.W., McCulloch D., Nielsen G.W., Thompson M.W.** Ion ranges in aluminum and silicon // Radiation Effects. 1978. Vol. 36. No. 3–4. Pp. 149–156.

15. **Klein C.P.** Radiation ionization energies in semiconductors – Speculations about the role of plasmons // Proceedings of the 8th International Conference on the Physics of Semiconductors. Kyoto (Japan). 1966. Pp. 307–311.

Статья поступила в редакцию 17.06.2020, принята к публикации 05.08.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВАСИЛЬЕВ Александр Электроневич – 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
vasiliev_ae@spbstu.ru

КОЗЛОВСКИЙ Виталий Васильевич – 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
vkozlovski@phmf.spbstu.ru

КОЛГАТИН Сергей Николаевич – доктор технических наук, заведующий кафедрой физики Санкт-Петербургского государственного университета телекоммуникаций им. проф. М.А. Бонч-Бруевича, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 61
kolgatins@gmail.com



DOI: 10.18721/JPM.13302
УДК 537.226

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОМПОЗИТАХ НА ОСНОВЕ ХЛОРИДА ДИИЗОПРОПИЛАММОНИЯ И ТИТАНАТА СВИНЦА

Е.В. Стукова¹, С.В. Барышников²

¹ Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Российская Федерация;
² Благовещенский государственный педагогический университет, г. Благовещенск, Российская Федерация

В работе представлены результаты исследований диэлектрических свойств композитов $(\text{DIPAC})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$ с объемной долей x титаната свинца в композите от 0,10 до 0,40. Показано, что добавка титаната свинца к хлориду диизопропиламмония приводит к увеличению диэлектрической проницаемости и возникновению дополнительного фазового перехода при нагреве и охлаждении. Появление нового фазового перехода объясняется в рамках теории Ландау – Гинзбурга с учетом диполь-дипольного взаимодействия между компонентами.

Ключевые слова: сегнетоэлектрический композит, фазовый переход, диэлектрическая проницаемость, титанат свинца, хлорид диизопропиламмония

Ссылка при цитировании: Стукова Е.В., Барышников С.В. Фазовые переходы в композитах на основе хлорида диизопропиламмония и титаната свинца // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 15–22. DOI: 10.18721/JPM.13302

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

PHASE TRANSITIONS IN COMPOSITES BASED ON DIISOPROPYLAMMONIUM CHLORIDE AND LEAD TITANATE

E.V. Stukova¹, S.V. Baryshnikov²

¹ Amur State University, Blagoveshchensk, Russian Federation;
² Blagoveshchensk State Pedagogical University, Blagoveshchensk, Russian Federation

The paper presents the results of studies in the dielectric properties of $(\text{DIPAC})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$ composites with the x volume fraction of lead titanate in composite from 0.10 to 0.40. It has been shown that the addition of lead titanate to diisopropylammonium chloride leads to an increase in the dielectric constant and the appearance of additional phase transitions during heating and cooling. The appearance of a new phase transition was explained in the framework of the Landau – Ginzburg theory, taking into account the dipole-dipole interaction between the components.

Keywords: ferroelectric composite, phase transition, dielectric constant, lead titanate, diisopropylammonium chloride

Citation: Stukova E.V., Baryshnikov S.V. Phase transitions in composites based on diisopropylammonium chloride and lead titanate, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 15–22. DOI: 10.18721/JPM.13302

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

Введение

Сегнетоэлектрики относятся к многофункциональным материалам и имеют большой потенциал практического применения в разнообразных устройствах, таких как нелинейные конденсаторы, пьезоэлектрические, пироэлектрические и электрооптические устройства. Возможность переключения электрическим полем спонтанной поляризации обеспечивает их использование в устройствах хранения информации.

В настоящее время существует повышенный интерес к исследованиям новых органических сегнетоэлектриков. Одним из таких материалов является хлорид диизопропиламмония ($C_6H_{16}NCl$, DIPAC) со спонтанной поляризацией $P_s \approx 8,9$ мкКл/см² и температурой Кюри $T_c = 440$ К [2], открытый в 2006 году [1]. Несколько лет спустя, путем замещения хлора бромом и йодом (последние характеризуются большими ионными радиусами), были получены новые кристаллы: бромид диизопропиламмония ($C_6H_{16}NBr$, DIPAB) с точкой Кюри $T_c = 426$ К и значением спонтанной поляризации $P_s \approx 23$ мкКл/см² [3], а также иодид диизопропиламмония ($C_6H_{16}NI$, DIPAI) с параметрами $T_c = 378$ К, $P_s \approx 5,17$ мкКл/см² [4].

В частности, DIPAB имеет значение спонтанной поляризации, близкое к таковому у титаната бария, высокую температуру Кюри и демонстрирует хороший пьезоэлектрический отклик. Эти атрибуты делают сегнетоэлектрики группы диизопропиламмония альтернативой перовскитоподобным сегнетоэлектрикам. Именно поэтому в последнее время возрос интерес к изучению указанных материалов [2–6].

Особое внимание уделяется изучению свойств сегнетоэлектрических композитов на основе таких материалов, поскольку созданные структуры могут обладать необычными свойствами, нехарактерными для однородных веществ.

Исследовались диэлектрические свойства наночастиц хлорида диизопропиламмония (DIPAC), внедренных в матрицы опала и

кремнезема МСМ-41 [7]. В результате было показано, что внедрение такого соединения в поры опала смещает температуру фазового перехода композита в сторону низких температур и повышает его коэффициент расширения, по сравнению с объемным образцом. Кроме того, в нанопорах опала возрастает температурный гистерезис фазового перехода. Для DIPAC, внедренного в молекулярные сита МСМ-41, никаких аномалий диэлектрической проницаемости, относящихся к сегнетоэлектрическому переходу, не наблюдалось ввиду аморфного состояния данного соединения.

В работе [8] приведены результаты исследований линейных и нелинейных диэлектрических свойств, а также калориметрических измерений сегнетоэлектрического композита $(DIPAB)_{1-x}/(PbTiO_3)_x$ с объемной долей частиц титаната свинца в композите $x = 0,1, 0,2$ и $0,3$. Показано, что добавка частиц титаната свинца к бромиду диизопропиламмония приводит к изменению последовательности структурных фазовых переходов в бромиде диизопропиламмония, увеличению эффективной диэлектрической проницаемости и значений тангенса диэлектрических потерь ($tg\delta$) композита. В температурном интервале 423 – 411 К присутствуют две фазы $C_6H_{16}NBr$ (сегнетоэлектрическая $P2_1$ и несегнетоэлектрическая $P2_12_1$), соотношение между которыми зависит от доли частиц титаната свинца в композите.

Цель настоящей работы – определить влияние частиц титаната свинца на свойства хлорида диизопропиламмония в составе композита $(DIPAC)_{1-x}/(PbTiO_3)_x$.

Образцы и методика эксперимента

Хлорид диизопропиламмония был получен реакцией диизопропиламина с 30 %-м водным раствором HCl с последующей перекристаллизацией из метилового спирта. Согласно данным рентгеновской спектроскопии, полученный хлорид диизопропиламмония при комнатной температуре находился в полярной фазе $P2_1$, что соответствует карточ-

ке ICDD00-009-0589. Неполярная кристаллическая структура наблюдается в DIPAC при температуре свыше $T_c \approx 440$ К; она относится к пространственной группе $2/m$. Фазовый переход в DIPAC классифицирован как переход первого рода, так как присутствует температурный гистерезис, составляющий около 4 К.

Титанат свинца представляет собой классический сегнетоэлектрик структурного типа перовскита с температурой Кюри $T_c = 763$ К. При комнатной температуре PbTiO_3 находится в тетрагональной сегнетоэлектрической фазе с $P_s \approx 60$ мкКл/см² [9].

Для приготовления образцов $(\text{DIPAC})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$ использовался порошок хлорида диизопропиламмония со средним размером частиц около 10 мкм и порошок титаната свинца со средним размером частиц около 1 мкм. Содержание PbTiO_3 варьировалось от $x = 0,10$ до 0,40 (x – объемная доля титаната свинца). Образцы для измерения готовились

путем тщательного перемешивания с последующим прессованием под давлением примерно 10^4 кг/см² в виде дисков диаметром 10 мм и толщиной 1,5 мм. Для проведения диэлектрических измерений на поверхности образцов наносились серебряные электроды. Электронная фотография поверхности композитного образца без электродов приведена на рис. 1.

Изучение диэлектрических свойств образцов композита $(\text{DIPAC})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$ было проведено с помощью цифрового измерителя иммитанса E7-25, имеющего частотный диапазон 25 – 10^6 Гц и рабочее напряжение 0,7 В. Для определения температуры использовался термометр ТС-6621 с хромель-алюмелевой термопарой. Точность определения температуры составляла 0,1 К. Исследования проводились в режиме «нагрев-охлаждение» со скоростью 1 К/мин в температурном интервале от 290 до 450 К в автоматическом режиме, с компьютерным управлением.

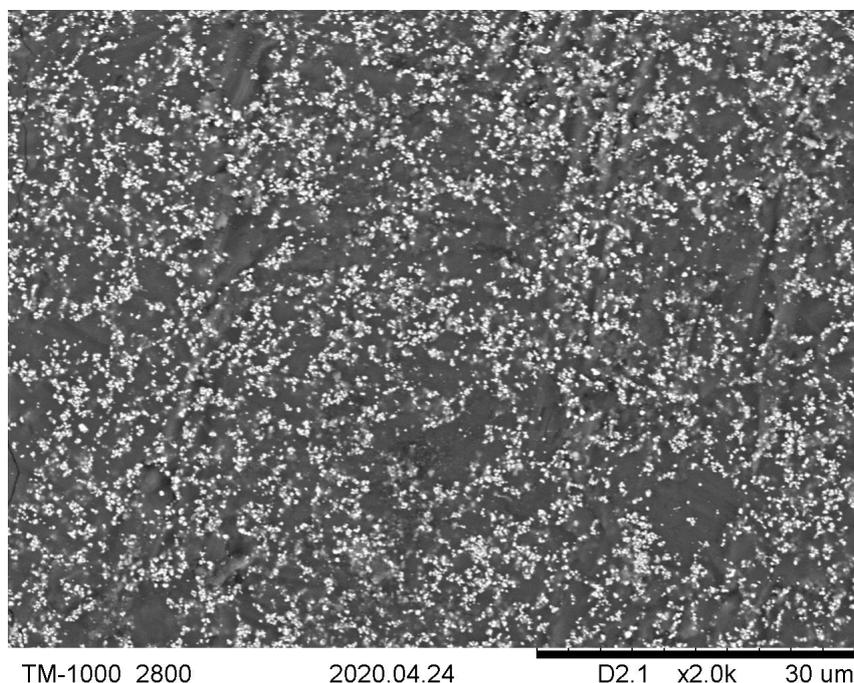


Рис. 1. Электронная фотография поверхности образца композита $(\text{DIPAC})_{0,90}/(\text{PbTiO}_3)_{0,10}$ при увеличении в 2000 раз (темная матрица – частицы хлорида диизопропиламмония, светлые включения – частицы титаната свинца)

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Результаты исследования диэлектрических свойств поликристаллических образцов DIPAC и композитов $(\text{DIPAC})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$ при $x = 0, 10, 0,20$ и $0,25$ представлены на рис. 2. Анализ зависимостей $\epsilon'(T)$ показывает, что в композите с $x = 0,10$ на кривых появляется дополнительный максимум как при нагреве, так и при охлаждении, он же наблюдается и для составов с объемной долей PbTiO_3 до $0,30$.

При дальнейшем увеличении объемной доли частиц включений, при $x > 0,30$, температурные максимумы фазового перехода в чистом DIPAC при нагреве (T_1) и при охлаждении (T_2) сглаживаются. В то же время амплитуды дополнительных максимумов при нагреве (T_3) и при охлаждении (T_4) на температурных зависимостях диэлектрической проницаемости возрастают с увеличением объемной доли частиц титаната свинца.

Значение температуры основного фазо-

вого перехода в образцах композита с объемной долей включений до $0,30$ существенно не меняется, по сравнению с чистым образцом DIPAC (рис. 3). Температура дополнительного максимума в композитах со значениями x от $0,10$ до $0,30$ практически не зависит от доли включений, а для образца с $x = 0,40$ — немного понижается (примерно на 5 К).

Чтобы объяснить появление новых фазовых переходов в композите, рассмотрим систему взаимодействующих частиц. Согласно феноменологической теории, для описания фазового перехода в однородном сегнетоэлектрике используется разложение Ландау — Гинзбурга по степени поляризации, которая играет роль параметра порядка [10]. Для композитов, представляющих собой смесь сегнетоэлектрических порошков, свободная энергия будет складываться из энергии частиц, входящих в композит, и энергии их взаимодействия. С учетом этих соображений, свободную энергию можно записать в следующем виде:

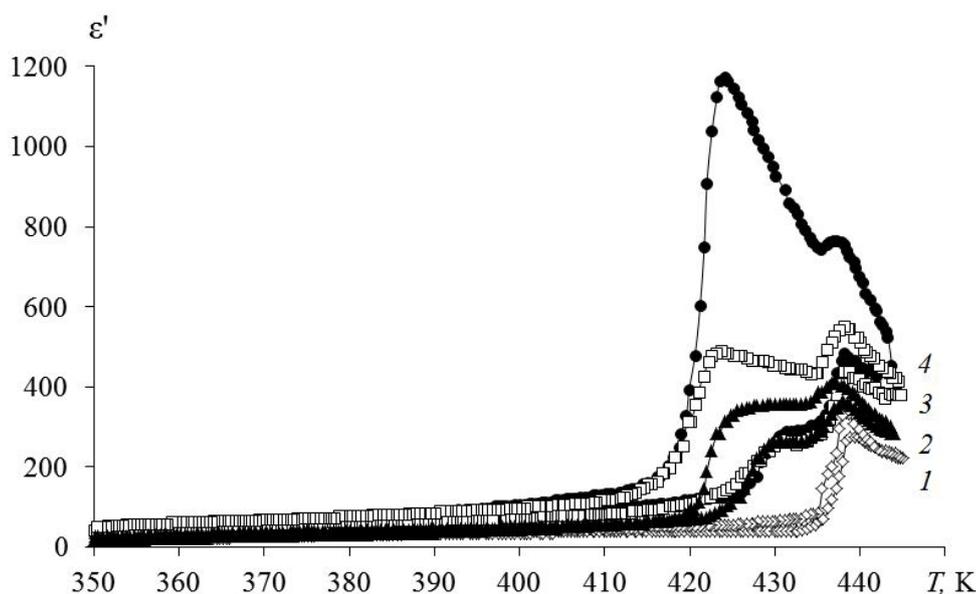


Рис. 2. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости композита $(\text{DIPAC})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$, зарегистрированные на частоте 10 кГц в цикле нагрев-охлаждение; $x = 0$ (1), $0,10$ (2), $0,20$ (3), $0,25$ (4)

$$\begin{aligned}
 F = & \\
 = & \sum_i \int_{V_i} \left(F_{0i} + \frac{1}{2} \alpha_i P_i^2 + \frac{1}{4} \beta_i P_i^4 + \dots \right) dv_i + \\
 & + \sum_j \int_{V_j} \left(F_{0j} + \frac{1}{2} \alpha_j P_j^2 + \frac{1}{4} \beta_j P_j^4 + \dots \right) dv_j + \\
 & + \Delta F_{ij},
 \end{aligned} \quad (1)$$

где P_i, P_j – величины поляризации для частиц первого сорта (например, DIPAC) и для частиц второго сорта (например, PbTiO_3), соответственно; ΔF_{ij} – энергия взаимодействия между частицами, которая в случае композитов имеет в основном электрическую природу.

Если оценивать напряженность электрического поля, создаваемую монодоменной частицей диаметром 1 мкм, на расстоянии от нее 50 мкм по направлению поляризации, то эта величина составит примерно $5 \cdot 10^6$ В/см для титаната свинца и $7 \cdot 10^5$ В/см для DIPAC.

Энергия электрического взаимодействия между дипольными частицами будет складываться из энергий Кеезома и Дебая. Максимальную энергию взаимодействия двух дипольных частиц можно записать в виде

$$\Delta F_{ij} \approx \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{2p_1 p_2}{R^3} + \frac{\epsilon_1 p_2^2}{\pi R^6} + \frac{\epsilon_2 p_1^2}{\pi R^6} \right], \quad (2)$$

где первое слагаемое – это энергия Кеезома (отражает взаимодействие частиц с готовыми дипольными моментами), а второе и третье – энергия Дебая (взаимодействие дипольной и недипольной частиц, обусловленное наведенной поляризацией); p_1, p_2 – дипольные моменты частиц.

Для системы дипольных частиц энергия ΔF_{ij} будет иметь вид

$$\begin{aligned}
 \Delta F_{ij} = & \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \left[\int_{V_i} \int_{V_j} \left(\frac{2(P_i P_j)}{R_{ij}^3} \right) dv_i dv_j + \right. \\
 & + \int_{V_i} \int_{V_j} \left(\frac{\epsilon_i P_j^2}{\pi R_{ij}^6} \right) dv_i dv_j + \\
 & \left. + \int_{V_i} \int_{V_j} \left(\frac{\epsilon_j P_i^2}{\pi R_{ij}^6} \right) dv_i dv_j \right], \quad (3)
 \end{aligned}$$

где под обозначениями P_i и P_j следует понимать некоторые средние значения поляризации частиц; это обусловлено разбросом

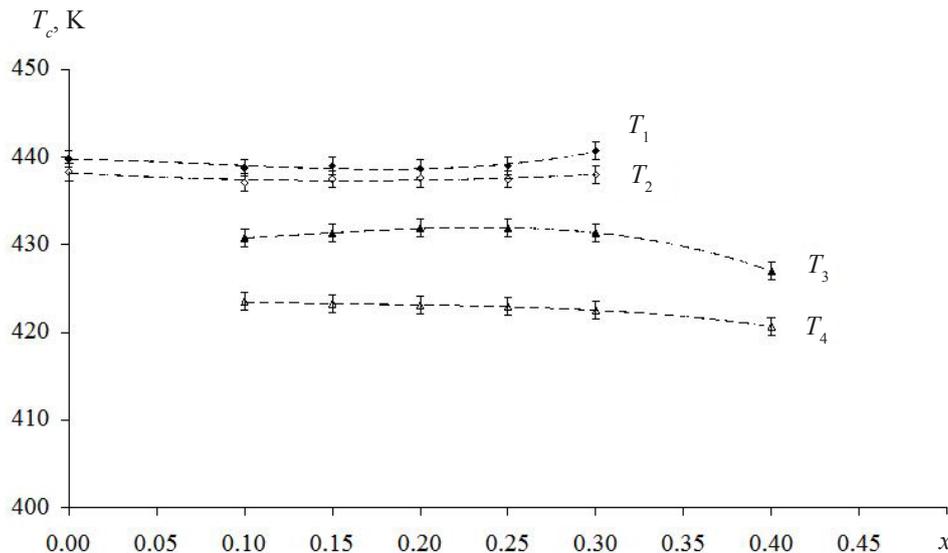


Рис. 3. Зависимости значений температурных максимумов от объемной доли включений в образцах композита $(\text{DIPAC})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$: T_1, T_2 – температуры основного максимума при нагреве и охлаждении, соответственно; T_3, T_4 – температуры дополнительного максимума при нагреве и охлаждении, соответственно

значений дипольных моментов частиц как по величине, так и по направлению.

Температуры фазовых переходов частиц DIPAC в композите будут определяться из условия минимума свободной энергии с учетом взаимодействия:

$$\frac{dF_i}{dP_i} = \frac{d}{dP_i} \left[\sum_i \int_{V_i} \left(\frac{1}{2} \alpha_i P_i^2 + \frac{1}{4} \beta_i P_i^4 + \dots \right) dv_i + \Delta F_{ij} \right] = 0. \quad (4)$$

Согласно выражениям (3) и (4), энергия взаимодействия частиц и, следовательно, температуры фазовых переходов для DIPAC в композите будут отличаться от температур фазовых переходов однородного DIPAC.

Сдвиг фазового перехода по температуре будет зависеть от нескольких величин:

- концентрации и размеров частиц включений,
- величин спонтанных поляризаций этих частиц,
- степени их поляризации,
- диэлектрической проницаемости этих частиц.

Если проанализировать график зависимости значений температуры фазовых переходов в композите от объемной доли титаната свинца (см. рис. 3), то можно предположить, что в смеси присутствуют два состояния частиц DIPAC:

первое — это частицы, не имеющие в ближайшем окружении частиц PbTiO_3 ; их фазовые переходы соответствуют фазовым пере-

ходам изотропного DIPAC (T_1 и T_2);

второе — это частицы, соседствующие с дипольными частицами PbTiO_3 ; их температуры фазовых переходов будут определяться с учетом энергии взаимодействия (T_3 и T_4), как следует из соотношений (3) и (4).

Подтверждается это тем, что амплитуды кривых $\varepsilon'(T)$ (рис. 3) для частиц второго сорта увеличиваются с ростом концентрации PbTiO_3 , и когда $x > 0,30$, число частиц первого сорта пренебрежимо мало. Температуры переходов T_3 и T_4 практически не зависят от концентрации частиц титаната свинца в диапазоне значений x от 0,10 до 0,30, что может свидетельствовать о наличии некоторых аномалий в термодинамическом потенциале DIPAC при этих температурах, и малое изменение энергии взаимодействия приводит к фазовым переходам.

Заключение

Проведены исследования диэлектрических свойств поликристаллических образцов DIPAC и композитов $(\text{DIPAC})_{1-x}/(\text{PbTiO}_3)_x$ при $x = 0,10, 0,20$ и $0,25$. Анализ результатов полученных данных показал, что для композитов на основе хлорида диизопропиламмония и титаната свинца увеличение объемной доли x (содержание PbTiO_3) от 0,10 до 0,30 приводит к возникновению дополнительных фазовых переходов. При значениях $x > 0,30$ максимум основного перехода практически не наблюдался. Появление дополнительного фазового перехода можно объяснить диполь-дипольным взаимодействием компонентов композита.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ye Q., Song Y.-M., Wang G.-X., Chen K., Fu D.-W., Chan P.W.H., Zhu J.-S., Huang S.D., Xiong R.-G. Ferroelectric metal-organic framework with a high dielectric constant // J. Am. Chem. Soc. 2006. Vol. 128. No. 20. Pp. 6554–6555.
2. Fu D.-W., Zhang W., Cai H.-L., Ge J.-Z., Zhang Y., Xiong R.-G. Diisopropylammonium chloride: a ferroelectric organic salt with a high phase transition temperature and practi-

- cal utilization level of spontaneous polarization // Advanced Materials. 2011. Vol. 23. No. 47. Pp. 5658–5662.
3. Fu D.-W., Cai H.-L., Liu Y., Ye Q., Zhang W., Zhang Y., Chen X.-Y., Giovannetti G., Capone M., Li J., Xiong R.-G. Diisopropylammonium bromide is a high-temperature molecular ferroelectric crystal // Science. 2013. Vol. 339. No. 6118. Pp. 425–428.



4. Jiang C., Tong W.-Y., Lin H., Luo C., Peng H., Duan C.-G. Effect of counter anions on ferroelectric properties of diisopropylammonium cation based molecular crystals // Physica Status Solidi. A. 2017. Vol. 214. No. 6. P. 1700029.
5. Piecha A., Gagor A., Jakubas R., Szklarz P. Room-temperature ferroelectricity in diisopropylammonium bromide // CrystEngComm. 2013. Vol. 15. No. 5. Pp. 940–944.
6. Stukova E., Meredelina T., Baryshnikov S., Milinskiy A. Size effects in a ferroelectric NH_4IO_3 // Ferroelectrics. 2019. Vol. 539. No. 1. Pp. 33–38.
7. Baryshnikov S.V., Charnaya E.V., Milinskiy A.Yu., Parfenov V.A., Egorova I.V. Impact of nanoconfinement on the diisopropylammonium chloride ($\text{C}_6\text{H}_{16}\text{ClN}$) organic ferroelectric // Phase Transitions. 2018. Vol. 91. No. 3. Pp. 293–300.
8. Барышников С.В., Стукова Е.В., Мерделлина Т.А. Сегнетоэлектрические свойства композитов на основе диизопропиламмония бромида и титаната свинца // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 17–24.
9. Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. Пер. с англ. под ред. Леманова В.В., Смоленского Г.А. М.: Мир, 1981. 736 с.
10. Гинзбург В.Л. Фазовые переходы в сегнетоэлектриках (несколько исторических замечаний) // УФН. 2001. Т. 171. № 10. С. 1091–1097.

Статья поступила в редакцию 23.05.2020, принята к публикации 02.06.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СТУКОВА Елена Владимировна – доктор физико-математических наук, профессор, заведующая кафедрой физики Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Российская Федерация.

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

БАРЫШНИКОВ Сергей Васильевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры физического и математического образования Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Российская Федерация.

675000, Российская Федерация, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104
svbar2003@list.ru

REFERENCES

1. Ye Q., Song Y.-M., Wang G.-X., et al., Ferroelectric metal-organic framework with a high dielectric constant, J. Am. Chem. Soc. 128 (20) (2006) 6554–6555.
2. Fu D.-W., Zhang W., Cai H.-L., et al., Diisopropylammonium chloride: a ferroelectric organic salt with a high phase transition temperature and practical utilization level of spontaneous polarization, Advanced Materials. 23 (47) (2011) 5658–5662.
3. Fu D.-W., Cai H.-L., Liu Y., et al., Diisopropylammonium bromide is a high-temperature molecular ferroelectric crystal, Science. 339 (6118) (2013) 425–428.
4. Jiang C., Tong W.-Y., Lin H., et al., Effect of counter anions on ferroelectric properties of diisopropylammonium cation based molecular crystals, Physica Status Solidi. A. 214 (6) (2017) 1700029.
5. Piecha A., Gagor A., Jakubas R., Szklarz P., Room-temperature ferroelectricity in diisopropylammonium bromide, CrystEngComm. 15 (5) (2013) 940–944.
6. Stukova E., Meredelina T., Baryshnikov S., Milinskiy A., Size effects in a ferroelectric NH_4IO_3 , Ferroelectrics. 539 (1) (2019) 33–38.
7. Baryshnikov S.V., Charnaya E.V., Milinskiy A.Yu., et al., Impact of nanoconfinement on the diisopropylammonium chloride ($\text{C}_6\text{H}_{16}\text{ClN}$)

organic ferroelectric, *Phase Transitions*. 91 (3) (2018) 293–300.

8. **Baryshnikov S.V., Stukova E.V., Meredolina T.A.**, Ferroelectric properties of composites based on diisopropylammonium bromide and lead titanate, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics*. 12 (4)

(2019) 17–24.

9. **Lines M.E., Glass A.M.**, Principles and applications of ferroelectrics and related materials, Clarendon Press, Oxford, 1977.

10. **Ginzburg V.L.**, Phase transitions in ferroelectrics: some historical remarks, *Physics – Uspekhi*. 44 (10) (2001) 1037–1043.

Received 23.05.2020, accepted 02.06.2020.

THE AUTHORS

STUKOVA Elena V.

Amur State University

21 Ignatievskoe Ave., Blagoveshchensk, 675027, Russian Federation

lenast@bk.ru

BARYSHNIKOV Sergey V.

Blagoveshchensk State Pedagogical University

104 Lenina St., Blagoveshchensk, 675000, Russian Federation

svbar2003@list.ru

DOI: 10.18721/JPM.13303
UDC 538.9, 544-971

GENERALIZED CORRECTION TO EMBEDDED-ATOM POTENTIALS FOR SIMULATION OF EQUILIBRIUM AND NONEQUILIBRIUM PROPERTIES OF METALS

A.V. Verkhovtsev¹, A.V. Korol¹, G.B. Sushko¹,
S. Schramm², A.V. Solov'yov¹

¹ MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology,
Frankfurt am Main, Germany;

² Goethe University Frankfurt, Frankfurt am Main, Germany

A modification of an embedded-atom method (EAM)-type potential is proposed for a quantitative description of equilibrium and nonequilibrium properties of metal systems within the molecular dynamics framework. The modification generalizes the previously developed linear correction to EAM-type potentials [Sushko et al., J. Phys.: Condens. Matter 28 (2016) 145201] and asymptotically approaches zero at large interatomic distances. A general procedure for constructing this modification is outlined and its relation to the linear correction is elaborated. To benchmark this procedure, we examine the melting phase transition and several equilibrium properties of finite-size nanosystems made of silver, gold and titanium. The simulations performed with the modified potential predict higher bulk melting temperatures of the metals and agree better with experimental values as compared to the original EAM-type potential. Our results show that the modification works well for metals with both cubic and hexagonal lattice structures. The Gupta potential is chosen as an example but the modification proposed can also be applied to other potentials of the EAM type.

Keywords: molecular dynamics simulation, many-body potential, phase transition, equilibrium properties, metal nanoparticle

Citation: Verkhovtsev A.V., Korol A.V., Sushko G.B., Schramm S., Solov'yov A.V., Generalized correction to embedded-atom potentials for simulation of equilibrium and nonequilibrium properties of metals, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 23–41. DOI: 10.18721/JPM.13303

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

ОБОБЩЕННАЯ ПОПРАВКА К ПОТЕНЦИАЛАМ ПОГРУЖЕННОГО АТОМА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАВНОВЕСНЫХ И НЕРАВНОВЕСНЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛОВ

А.В. Верховцев¹, А.В. Король¹, Г.Б. Сушко¹,
Ш. Шрамм², А.В. Соловьёв¹

¹ Научно-исследовательский центр мезобионаносистем,
г. Франкфурт-на-Майне, Германия;

² Университет им. Гёте, г. Франкфурт-на-Майне, Германия

Предложена модификация потенциалов погруженного атома (EAM) для описания равновесных и неравновесных свойств металлических систем в рамках классической молекулярной динамики. Данная модификация обобщает разработанную ранее авторами линейную поправку к потенциалам типа EAM и асимптотически убывает на больших межатомных расстояниях. Описана процедура построения модифицированных потенциалов и показана связь данной модификации с линейной поправкой. Предложенная модификация использована для моделирования процесса плавления и изучения ряда равновесных свойств наносистем из серебра, золо-

та и титана. Результаты расчетов, проведенных при помощи модифицированного потенциала, предсказывают более высокие температуры плавления металлов, по сравнению с изначальным потенциалом типа EAM, что лучше согласуется с экспериментальными данными. Многочастичный потенциал типа Гупта рассмотрен в качестве примера, но предложенная модификация может также применяться и к другим потенциалам типа EAM.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, многочастичный потенциал, фазовый переход, металлическая наночастица

Ссылка при цитировании: Верховцев А.В., Король А.В., Сушко Г.Б., Шрамм Ш., Соловьёв А.В. Обобщенная поправка к потенциалам погруженного атома для моделирования равновесных и неравновесных свойств металлов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 23–41. DOI: 10.18721/JPM.13303

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

Introduction

Computer simulations based on atomistic models have emerged as a powerful tool for the analysis of physicochemical processes occurring in materials and related materials properties [1]. A vast number of atomistic simulations employ molecular dynamics (MD) methods that require the evaluation of total potential energy of many-atom systems and the forces acting on constituent atoms [2, 3]. MD simulations provide insights into many physical processes, such as diffusion [4 – 6], plastic deformation [7, 8], melting [9 – 11], crystallization [10, 12] and other phase transformations [13, 14]. All of these processes happen on temporal and spatial scales exceeding by far those accessible by *ab initio* methods. In order to reach these scales, semi-empirical interatomic potentials parameterized for specific material compositions and structures are used [3, 15 – 17]. A potential constructed by fitting to a specific set of properties should perform well for other properties that were not explicitly considered during its construction phase [18].

Different interatomic potentials [19 – 24] belonging to a general class of embedded-atom method (EAM)-type potentials are commonly used in MD simulations of metal systems [25]. In the past decades, more complex potentials, based on the modified EAM (MEAM) or the second-neighbor (2NN) MEAM, have also been developed for different metals and alloys (see, e.g., a few recent examples [26, 27]). Parameters of these potentials are usually fitted to reproduce experimental data on the properties of bulk materials (e.g., cohesive energy, equilibrium lattice

constants, bulk modulus, elastic constants, vacancy-formation energy, etc.) or fitted to zero-temperature *ab initio* calculations of perfect crystalline structures.

It has also been widely discussed that EAM-type potentials are less accurate in describing the dynamics of systems being far from equilibrium, for instance, the melting phase transition. In particular, these potentials often struggle to reproduce the experimental values of melting temperature for bulk metals and yield the discrepancy up to several hundred degrees [5, 28 – 30]. This indicates the necessity to modify the exploited force fields in order to enable a more accurate description of systems' properties at elevated temperatures. An accurate description of both equilibrium and nonequilibrium properties of metal systems is important, e.g., for studying irradiation-driven phase and structural transformations of nanostructures [31, 32] or irradiation-induced chemistry underlying novel nanofabrication techniques [33, 34].

Different approaches to account for finite-temperature effects in classical force fields for metal systems have been discussed in literature. A method for re-parameterization of interaction potentials was proposed [35] to adjust the calculated melting temperature of materials without affecting mechanical properties to which the potentials were fitted. In that method, the melting temperature was calculated using a trial interatomic potential and the Gibbs – Duhem equation (which relates changes in the chemical potential of a system to changes in its temperature and pressure) was then solved to update the



parameters of potentials. This method was applied [35] to re-parameterize an EAM-type potential for Al and improved the calculated bulk melting temperature without considerable change in other properties. A correction to a many-body force field for titanium proposed in Ref. [36] included the contribution of thermal excitations of electronic degrees of freedom. In that approach, an EAM-type potential was augmented by an additional term (related to electronic entropy) that arises from the Sommerfeld theory of metals. According to that theory, there is a temperature-dependent contribution to the free energy of a metal system that depends also on the density of states at the Fermi energy. In Ref. [37], several parameterizations of EAM-type potentials for Ti describing defects, plasticity and melting were presented. These potentials fit well to either low- or high-temperature experimental data but could not describe both temperature regions simultaneously. On this basis, a temperature-dependent potential, being a combination of potentials operating better in different regions, was suggested to study the properties of Ti in a wide temperature range. The knowledge accumulated in these studies suggests that modifications of conventional EAM-type potentials are required in order to match the calculated nonequilibrium properties (the melting temperature in particular) of metal materials to experimental values.

In our previous work [38], we presented a modification of an EAM-type potential (considering a many-body Gupta potential [39] as an example). With that modification, both the melting temperature and the near-equilibrium properties of selected metal systems were reproduced. It was revealed that augmenting steepness of the interaction potential by enhancing its repulsive part leads to an increase of the melting temperature. This happens because a higher thermal energy is needed to reach the threshold of atomic vibration amplitudes at which the melting occurs. To that end, the original EAM-type potential was augmented by adding a linear term to the repulsive part [38]. The linear correction represented a minor change to the potential energy but led to a significant increase of the melting temperature. It was applied to study thermal, geometrical

and energetic properties of magnesium, titanium, platinum and gold, yielding a good agreement with experimental results. In Ref. [40], this method was used to evaluate melting points of finite-size NiTi nanoalloys with different composition of Ni and Ti. These results were used to evaluate bulk melting temperatures of $\text{Ni}_{1-x}\text{Ti}_x$ alloys, which agreed with an experimental phase diagram for the NiTi material.

In this paper, the previously developed methodology is generalized in the form of a new modification of an EAM-type potential. This modification represents a linear function multiplied by a sigmoid function, which gradually tends to zero beyond a given distance. A general procedure for constructing this modification is outlined and its parameters are related to the parameters of the linear correction [38]. The modified EAM-type potential is used for MD simulations of melting of nanometer-sized nanoparticles made of silver, gold and titanium. Structural and energetic equilibrium properties of these systems, such as lattice constants, cohesive energy and vacancy formation energy are also analyzed. Our results demonstrate that the new modification is applicable for metals with both cubic and hexagonal crystalline lattices. To be consistent with our previous works [38, 40] the Gupta potential is considered as an example but we stress that the modification proposed can also be applied to other interatomic potentials of the EAM type, e.g., to Sutton – Chen [20] or Finnis – Sinclair [41] potentials.

EAM-type Gupta potential

Similar to other many-body potentials of the EAM type, the Gupta potential is constructed as a sum of (i) a short-range repulsive term that stems from the repulsion between atomic cores and (ii) a long-range attractive term which imitates delocalization of the outer-shell electrons and is related to electron density at a given atomic site. The total energy of an N -atom system interacting via an EAM-type potential reads as

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} V(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F_i(\rho_i), \quad (1)$$

where $V(r_{ij})$ is the short-range repulsive interaction between atoms i and j separated by the distance r_{ij} ; the attractive term F_i stands for the energy obtained by embedding atom i into the local electron density ρ_i provided by the remaining atoms of the system.

The functional form of $F_i(\rho_i)$ may vary in different EAM-type potentials [25] while the Gupta potential employs a specific form of this function,

$$F_i(\rho_i) \propto -\sqrt{\rho_i}.$$

This functional form is based upon the second-moment approximation of the tight-binding model [42, 43], according to which the attractive many-body term is related to the energy of d valence electron band and expressed as a square root of ρ_i . The latter is constructed empirically as a linear superposition of electron charge densities of constituent atoms,

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \psi(r_{ij}).$$

Within the Gupta representation, the functions $V(r_{ij})$ and $\psi(r_{ij})$ are introduced in exponential forms so that the total potential energy U_{Gup} reads as follows:

$$U_{\text{Gup}} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} A e^{-p \left(\frac{r_{ij}}{d} - 1 \right)} - \sqrt{\sum_{j \neq i} \xi^2 e^{-2q \left(\frac{r_{ij}}{d} - 1 \right)}} \right], \quad (2)$$

where d is the first-neighbor distance; p, q are related to bulk elastic constants; ξ represents an effective orbital-overlap integral; A adjusts the cohesive energy.

The parameters for silver, gold and titanium used in this work were taken from Ref. [22].

Linear correction to EAM-type potentials

The EAM-type Gupta potential (2) corrected with the linear term U_{lin} introduced in Ref. [38] reads

$$U = U_{\text{Gup}} + U_{\text{lin}} \equiv U_{\text{Gup}} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (B r_{ij} + C), \quad (3)$$

where B and C are parameters.

The linear form was chosen to match the curvature of the modified potential energy profile in the vicinity of the equilibrium point (governed by the second derivative of potential energy U) to that of the original EAM-type potential.

As discussed in Ref. [38], the term $B r_{ij}$ ($B > 0$) makes the potential energy profile steeper at interatomic distances exceeding the equilibrium point r_0 whilst also slightly changing the depth of the potential well at r_0 . The constant term $C < 0$ was therefore added to mitigate the latter effect. In Ref. [38], parameters B and C were obtained empirically for a specific cutoff distance r_c for titanium, gold, platinum and magnesium. As shown below, these parameters can be derived for any material and any r_c using the following analytical estimate.

The correction to an EAM-type potential should not change the cohesive energy of a bulk material to which the potential was fitted. Therefore, the change in the total potential energy due to a linear correction should be equal to zero. If we approximate the real crystalline structure of a metal with a uniform distribution of atoms with number density n_0 , this condition can be written as

$$\int_{r < r_c} n_0 (B r_{ij} + C) dV = 0, \quad (4)$$

leading to the relation

$$C = -\frac{3}{4} B r_c. \quad (5)$$

Fig. 1 shows (by lines) the calculated dependence $C(B)$ for gold and titanium for different values of r_c . These parameters of the linear correction leave intact the cohesive energy of bulk metal systems. Bulk gold and silver have fcc crystal lattices and very similar lattice constants, so the results shown for gold also describe silver crystals. For each metal we consider three cutoff distanc-



es between 6 and 8 Å, corresponding to minima in the radial distribution function (see the vertical lines in Fig. 2). The indicated values of r_c were chosen following Ref. [22]. In that work, the parameters of the Gupta potential for the fcc metals were derived accounting for interatomic interactions up to the fifth-neighbor shell, while the suggested cutoff values for titanium and other hcp structures corresponded to inclusion of seven to eight shells of neighboring atoms.

The linear correction causes a small displacement Δr of atoms from their equilibrium positions defined by the original EAM-type potential. Expanding U in a Taylor series about the equilibrium atomic positions for the original potential and keeping only the first term of this expansion one evaluates a change in potential energy associated with Δr as

$$\begin{aligned} \Delta U &= -F_{lin} \Delta r = \\ &= -\frac{2\pi}{3} \left(\frac{4}{3}\right)^3 \frac{C^3}{B^2} n_0 \Delta r. \end{aligned} \quad (6)$$

As it was demonstrated in our earlier work [38], augmenting steepness of the interatomic potential beyond the equilibrium point by enhancing the repulsive contribution of the force field leads to a rise of the melting point. It happens because an increased thermal energy is needed to reach the threshold of atomic vibration amplitudes at which the melting phase transition occurs. Knowing the experimental bulk melting temperature T_m^{exp} and the value predicted by the original Gupta potential, T_m^{Gup} , parameters B and C can be chosen such that an increase in the melting temperature will be equal to $\Delta T = T_m^{\text{exp}} - T_m^{\text{Gup}}$.

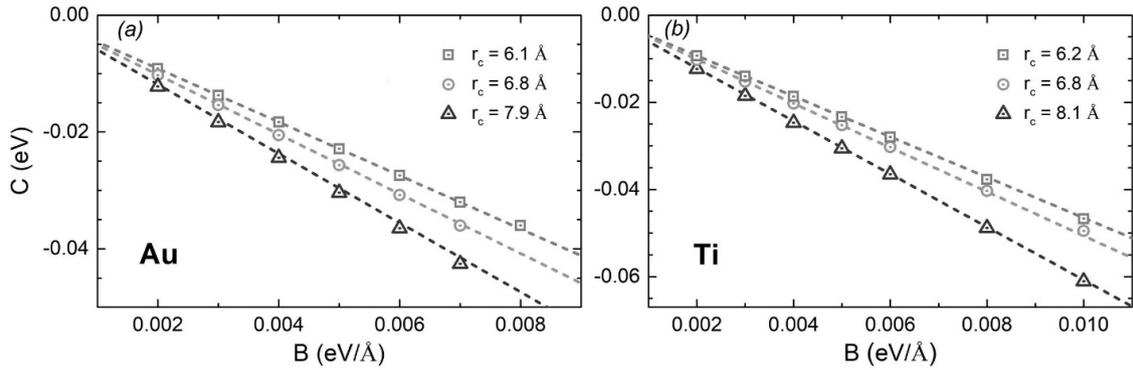


Fig. 1. The $C(B)$ dependence for Au (a) and Ti (b) for different cutoff values r_c ; lines show the results obtained using Eq. (5); symbols show the results of structure optimization calculations which account for the realistic crystal structures (see the ‘Results and discussion’ section)

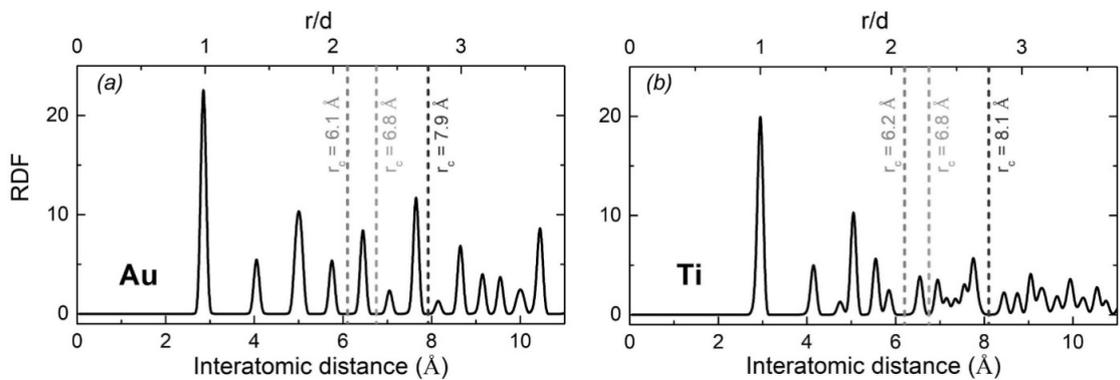


Fig. 2. The calculated radial distribution functions (RDFs) for 10-nm Au (a) and Ti (b) nanoparticles (composed of approximately 30,000 atoms). The used cutoff values r_c are shown by dashed lines

Eqs. (5) and (6) define, for any r_c , a combination of parameters B , C that reproduce experimental values of cohesive energy and melting temperature of bulk materials. These conditions were used to define B and C for the three metals studied.

Generalized modification of EAM-type potentials

In this section, we generalize the above described methodology and propose a new modification of an EAM-type potential. The modification should keep features of the linear correction, i.e., maintain its behavior in the vicinity of atomic equilibrium points and enhance the repulsive interactions with an increase of atomic displacements. We construct the modification in such a way that it contains a parameter describing the characteristic range of the potential thus eliminating the dependence of the potential on the choice of the cutoff distance. These conditions are fulfilled by multiplying U_{lin} by a sigmoid function which is equal to unity at small interatomic distances and asymptotically approaches zero beyond a given distance. The modified EAM-type Gupta potential then reads as

$$U = U_{Gup} + U_{mod} \equiv U_{Gup} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \frac{\tilde{B}r_{ij} + \tilde{C}}{1 + e^{\lambda(r_{ij}-r_s)}}. \quad (7)$$

The parameters \tilde{B} and \tilde{C} have the same meaning as B and C in Eq. (3): \tilde{B} defines an additional force acting on the nearest atoms and \tilde{C} adjusts the depth of the potential well in the vicinity of the equilibrium point where $U = 0$. The parameter λ describes the slope of U_{mod} at large interatomic distances, while r_s defines the sigmoid's midpoint and hence the range of this potential. Fig. 3 shows the potential U_{mod} for a pair of atoms as a function of interatomic distance r . Due to its sigmoid-type shape, $U_{mod}(r)$ asymptotically approaches zero and its range serves as a natural cutoff distance for this interaction.

For each pair of atoms, the potential U_{lin} grows monotonically with interatomic distance up to the cutoff r_c , and all atoms located within the sphere of radius r_c experience the same force exerted by a given atom. On the contrary, U_{mod} has a maximum at interatomic distances of about 5 – 8 Å depending on the choice of λ and r_s (see Fig. 3). Thus, the force exerted by an atom due to U_{mod}

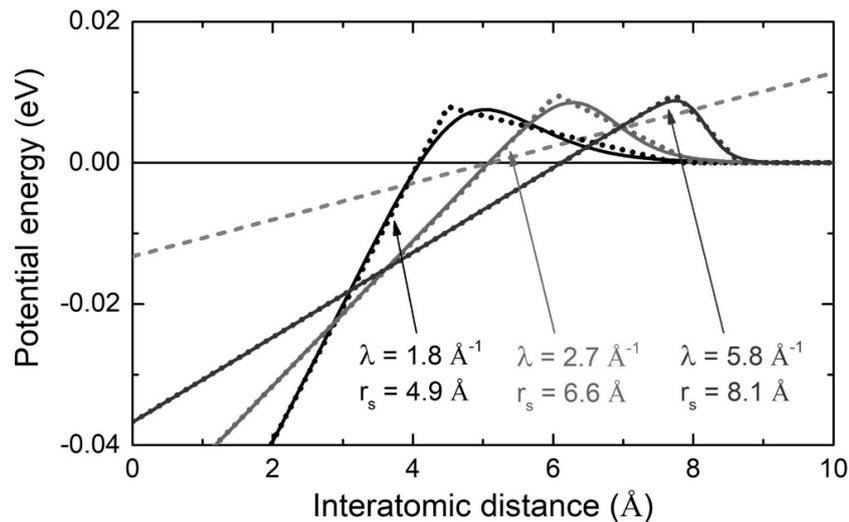


Fig. 3. Plots of $U_{mod}(r)$ (7) for different values of the parameters (solid lines) and U_{lin} (a dashed gray line) vs. the interatomic distance r , and also the piecewise linear approximation $\tilde{U}_{mod}(r)$ (8) (dotted curves, see the Appendix for details). The used procedure of deriving the parameter values is given in the text



enhances interaction with several nearest atomic shells while the interaction with more distant atoms weakens. The strength of this interaction is governed by the steepness of the potential beyond its maximum, i.e., by the parameter λ . Therefore, the force acting on the nearest neighbors due to U_{mod} should exceed (by the absolute value) the force F_{lin} as its effect is compensated by weaker interactions with more distant atoms. Thus, for each pair of atoms interacting via $U_{mod}(r)$, the initial slope of the potential should be steeper than the slope of $U_{lin}(r)$, i.e. $\tilde{B} > B$.

To analytically derive parameters of the new modification, $U_{lin}(r)$ in Eqs. (4) and (6) was substituted with $\bar{U}_{mod}(r)$ – a piecewise linear approximation of the sigmoid-type function $U_{mod}(r)$, see Eq. (8) in Appendix. Then, parameters of this function were expressed through the parameters B and C of the linear correction. As a last step of this procedure, $\bar{U}_{mod}(r)$ was fitted with $U_{mod}(r)$ to derive λ and r_s . Further technical details are given in the Appendix. The parameters of U_{mod} used for an analysis of melting temperature and near-equilibrium properties of silver, gold and titanium nanosystems are summarized in Table 1. Details of this analysis are presented below in the ‘Results and Discussion’ section.

The modification U_{mod} (7) is qualitatively similar to the well-known Dzugutov potential [45] which was developed to model glass-forming liquid metals. The Dzugutov potential coincides with the Lennard – Jones potential at small interatomic distances but has a maximum beyond the equilibrium point. This enables the suppression of crystallization and enforces the emergence of icosahedral structures. The maximum

of U_{mod} corresponds to the positions of more distant atoms (see Fig. 3 and the RDFs in Fig. 2). As a result, the modification U_{mod} does not affect crystal structure but leads to an increase in the melting temperature whilst slightly changing the near-equilibrium properties of metals.

Computational details

All simulations described in this work were conducted using the MBN Explorer software package [46]. We considered spherical nanoparticles with radii from 1 to 5 nm (ranging from 250 to 30,000 atoms) that were cut from ideal silver, gold and titanium crystals. The systems were constructed using the MBN Studio software [47].

Prior to the analysis of the structural and energetic parameters of each system, energy minimization calculations were performed using the velocity-quenching algorithm. The MD simulations of the melting process were performed using a large simulation box of $20 \times 20 \times 20$ nm in the NVT canonical ensemble. The temperature T was controlled by a Langevin thermostat with a damping time of 1 ps. The nanoparticles were heated up (starting from the initial temperature T_0 well below the expected melting temperatures, $T_0 = 300$ K for Ag and Au and 1000 K for Ti) with a constant heat rate of 0.5 K/ps, which is within the range of typical values used for MD simulations of phase transitions. The total simulation time for each run was 3 ns. The time integration of the equations of motion was done using the velocity-Verlet algorithm [2] with an integration time step of 1 fs. In the calculations performed with the linear correction U_{lin} , the interatomic interactions were truncated at the cutoff radius r_c .

T a b l e 1

Parameters of the potential U_{mod}

Element	\tilde{B} , eV/Å	\tilde{C} , eV	λ , Å ⁻¹	r_s , Å
Ag	0.009	-0.048	5.93	7.10
Au	0.026	-0.145	4.68	7.36
Ti	0.052	-0.269	2.77	6.68

N o t a t i o n: \tilde{B} is an additional force acting on the nearest atoms; \tilde{C} adjusts the depth of the potential well in the vicinity of the equilibrium point where $U = 0$; λ describes the slope of U_{mod} at large interatomic distances; r_s defines the sigmoid’s midpoint.

ranging from about 6 to 8 Å as shown in Fig. 2. In the case of the potential augmented with U_{mod} , its range served as a natural cutoff distance, which varied between 8 and 9 Å.

The melting temperatures of nanoparticles were determined from the analysis of heat capacity

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$$

defined as a partial derivative of the internal energy of the system with respect to temperature at a given volume. A sharp maximum of C_V was attributed to the nanoparticle melting and the position of the maximum was referred to as the nanoparticle's melting point. The bulk melting temperature T_m^{bulk} was estimated by extrapolating the obtained values to the $N \rightarrow \infty$ limit according to the Pawlow law [48, 49],

$$T_m^{bulk} = T_m + \gamma N^{-1/3}$$

with γ being the factor of proportionality.

Results and discussion

Fig. 1 shows the dependence $C(B)$ that describes the parameters of the linear correction U_{lin} at different values of cutoff r_c . Dashed lines were obtained by means of Eq. (5) within the uniform density model (see the section 'Linear correction to EAM-type potentials'), while symbols show the results of structure optimization of gold and titanium systems with realistic crystal structures. In the case of structure optimization, the parameters B and C were chosen to match experimental cohesive energies [50]. The outcomes of the uniform density model are in good agreement with the results of optimization calculations. Table 2 summarizes the bulk cohesive energy for silver, gold and titanium, calculated with the linear correction as well as the experimental values and the results obtained by means of the original EAM-type Gupta potential.

T a b l e 2

Comparison of the calculated bulk cohesive energy values with experimental data

Element	Bulk cohesive energy, eV per atom			
	U_{Gup}	$U_{Gup} + U_{lin}$	$U_{Gup} + U_{mod}$	Experiment [50]
Ag	2.96	2.96	2.97	2.96
Au	3.78	3.77	3.78	3.78
Ti	4.87	4.87	4.83	4.85

N o t a t i o n: U_{Gup} is the original Gupta potential, Eq. (2); ($U_{Gup} + U_{lin}$) is the one corrected by U_{lin} , Eq. (3); ($U_{Gup} + U_{mod}$) is the one corrected by the sigmoid-type modification U_{mod} , Eq. (7), proposed in this work.

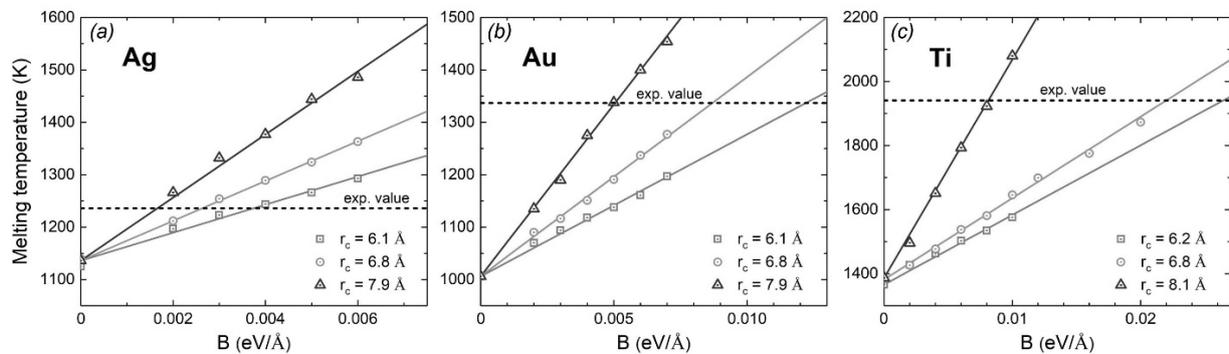


Fig. 4. The calculated dependences of the melting temperature of bulk silver (a), gold (b) and titanium (c) on the parameter B at the different cutoff r_c values (symbols) as well as the least-squares fit to these results (solid lines). Experimental values from Ref. [50] are shown by dashed lines. The calculation procedure is given in the text. $B = 0$ corresponds to the original Gupta potential, Eq. (2)



Fig. 4 shows the melting temperature of bulk silver, gold and titanium calculated using the linear correction U_{lin} to the Gupta potential, Eq. (3), at different values of the parameter B and the cutoff r_c . The parameter C was defined according to Eq. (5). Symbols denote the results of MD simulations of finite-sized nanoparticles melting, extrapolated to the bulk limit. The figure shows that the calculated melting temperature increases linearly with B . These results can be used to evaluate

$$\Delta T = \Delta T_m^{lin}(B) - \Delta T_m^{Gup}.$$

As follows from Eq. (6),

$$\Delta U = k\Delta T \propto \Delta r$$

where Δr stands for an increase in the amplitude of thermal vibrations of atoms with respect to the values predicted by the original Gupta potential.

The slope of $\Delta T(B)$ is therefore proportional to the distance by which the atoms should be additionally displaced from equilibrium positions to initiate the melting process at the temperature corresponding to the experimental value. For silver and gold $\Delta r \approx 0.09 \text{ \AA}$, which is about 3% of their nearest-neighbor distances. For titanium we observed the dependence of Δr on the cutoff distance. For smaller cutoff values, $r_c = 6.2 \text{ \AA}$ and 6.8 \AA , an increase in the amplitude of thermal vibrations is equal to 0.06 \AA and it increases up to 0.09 \AA for $r_c = 8.1 \text{ \AA}$. These results suggest that an increase in the amplitude of thermal vibrations by a few percent leads to a dramatic rise of the melting point. A much steeper slope of $\Delta T(B)$ for Ti at $r_c = 8.1 \text{ \AA}$ suggests that more distant atoms located in a concentric shell between 7 and 8 \AA make a significant contribution to the melting process and the original Gupta potential cannot account properly for this contribution.

Tables 2–4 summarize the results on structural and energetic properties of silver, gold and titanium nanocrystals obtained with the sigmoid-type modification U_{mod} (7). These results are compared to those obtained by means of the original EAM-type Gupta potential (2) and the linear correction U_{lin} (3).

As mentioned above, the calculated bulk co-

hesive energies are summarized in Table 2. Neither linear correction nor sigmoid-type modification significantly change the values predicted by the original Gupta potential; all these values are in good agreement with experimental data [50] with a relative discrepancy of less than 0.5%.

Table 3 presents the vacancy-formation energy that is the amount of cohesive energy required to form a vacancy in a crystal. It is defined [62, 63] as

$$\begin{aligned} E_{vf} &\equiv (N-1)(E_{N-1}^{coh} - E_N^{coh}) = \\ &= E_{N-1} - \frac{N-1}{N} E_N \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} E_N &= NE_N^{coh}, \\ E_{N-1} &= (N-1)E_{N-1}^{coh} \end{aligned}$$

are the potential energies of systems containing N and $(N-1)$ atoms, whereas E_N^{coh} and E_{N-1}^{coh} are the corresponding cohesive energies per atom. The calculated values (columns labeled as ' U_{Gup} ', ' $U_{Gup} + U_{lin}$ ' and ' $U_{Gup} + U_{mod}$ ') are compared with available experimental data and the results of DFT calculations and MD simulations employing different EAM-type potentials.

The values calculated with the original Gupta potential are consistent with some experimental and theoretical values reported in literature [22, 23, 52, 55, 57], whereas other works predicted either smaller or much larger values of E_{vf} . Note that the theoretical results reported in literature were obtained with different EAM-type potentials (Finnis – Sinclair and Gupta potentials as well as a distinct potential introduced in Ref. [54]) as well as with different EAM and modified EAM (MEAM) potentials. The variety of potentials and parameterizations used has resulted in a large (up to 40%) discrepancy between the calculated values of E_{vf} .

Calculations performed with the Gupta potential corrected by U_{lin} (see the column ' $U_{Gup} + U_{lin}$ ') yield smaller values of E_{vf} as compared to the original Gupta potential, and the magnitude of the decrease depends on the parameter B . The values of E_{vf} listed in Table 3 were obtained for each metal using the B values that reproduce the

Table 3

Comparison of the vacancy formation energy E_{vf} obtained in this paper with the published experimental and calculated data

Element	Vacancy formation energy E_{vf} , eV					
	U_{Gup}	$U_{Gup} + U_{lin}$	$U_{Gup} + U_{mod}$	Experiment	Calculation	
					EAM-type	DFT
Ag	0.94	0.90	0.91	0.99 ± 0.06 [52] 1.09 ± 0.10 [53]	0.79 [19] (Gupta) 0.88 [22] (Gupta) 0.97 [23] (EAM) 1.10 [54]	–
Au	0.72	0.58	0.81	$0.62 - 0.67$ [55] $0.70 - 1.10$ [55]	0.60 [19] (Gupta) 0.75 [22] (Gupta) 1.03 [23] (EAM) 1.10 [54]	–
Ti	1.49	1.22	1.44	1.55 [56]	1.43 [21] (FS) 1.49 [57] (EAM) 1.56 [58] (Gupta) 1.78 [59] (MEAM) 1.79 [28] (MEAM)	1.97 [60] 2.14 [61]

Note: U_{Gup} corresponds to the E_{vf} value calculated with the original EAM-type Gupta potential; $(U_{Gup} + U_{lin})$, $(U_{Gup} + U_{mod})$ correspond to the E_{vf} values done using the potential corrected by U_{lin} and the new modification U_{mod} ; EAM, MEAM – embedded-atom method and modified EAM [51]; DFT is the density functional theory; FS is the Finnis – Sinclair potential [41].

experimental bulk melting temperatures (see Fig. 4). The figure shows that for $r_c \approx 8 \text{ \AA}$ the value of B for silver, 0.0016 eV/\AA , is three times smaller than that for gold, 0.005 eV/\AA , and five times smaller than for titanium, 0.008 eV/\AA . As a result, the vacancy-formation energy for silver calculated by means of the linear correction is slightly (by about 5%) smaller than the value predicted by the original Gupta potential. For gold and especially titanium, larger values of B should be used to reproduce the experimental bulk melting temperatures, which leads to a more pronounced decrease of E_{vf} . The magnitude of this discrepancy for titanium is within the uncertainty range of the existing theoretical data obtained by means of different EAM-type potentials (see Table 3). In MD simulations reported in literature [21, 28, 57–59] E_{vf} varies from about 1.4 to 1.8 eV while DFT calculations [60, 61] predicted even larger values up to 2.1 eV.

The sigmoid-type modification U_{mod} gives the results which are closer to the experimental values and the results of other MD simulations [21 – 23, 57] compared to the original Gupta potential and linear correction. This is due to the change

in the asymptotic behavior of the original Gupta potential, i.e., the weakening of interatomic interactions at large distances.

Table 4 presents the equilibrium lattice constants for silver, gold and titanium calculated with U_{Gup} , $U_{Gup} + U_{lin}$ and $U_{Gup} + U_{mod}$. The force created by the linear correction causes a uniform strain on crystals, which become uniformly compressed. For silver and gold this effect is rather small (the relative change in the lattice parameters is less than 1%) while the relative shortening of titanium crystals is about 2.5%. This can also be attributed to a very steep linear correction (i.e., a large force) that should be used to reproduce the experimental bulk melting temperature of Ti. Note also that the geometry optimization of a Ti crystal using the original Gupta potential yields the structure which is elongated along the [0001] axis as compared to the experimental value (the calculated lattice parameter $c = 4.75 \text{ \AA}$ vs. the experimental value of 4.68 \AA). The geometry optimization by means of the linear correction results in a uniform compression of the crystal, which brings the parameter c in a better agreement with the experimental value.

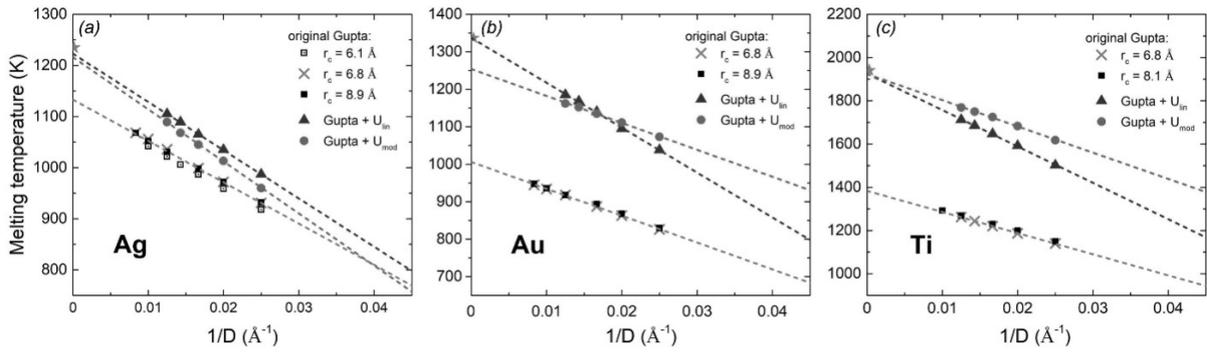


Fig. 5. Melting temperature of Ag (a), Au (b) and Ti (c) nanoparticles of diameter D calculated by 3 ways: using the original EAM-type Gupta potential (Eq. (2)), its linear correction U_{lin} (Eq. (3)) and the new modification U_{mod} (Eq. (7)); 3 values of r_c were considered (symbols). The extrapolation of the calculated numbers to the bulk limit was made (lines). Experimental values of bulk melting temperature are shown by stars

T a b l e 4

Comparison of the calculated equilibrium lattice constants with experimental data

Element	Equilibrium lattice constant, Å			
	U_{Gup}	$U_{Gup} + U_{lin}$	$U_{Gup} + U_{mod}$	Experiment [50]
Ag	4.07	4.05	4.07	4.09
Au	4.06	4.03	4.09	4.08
Ti (a)	2.91	2.83	2.89	2.95
Ti (c)	4.75	4.63	4.77	4.68

F o o t n o t e. The presented results were calculated with the original Gupta potential (U_{Gup}), as well as with the Gupta potential corrected by U_{lin} and the new modification U_{mod} . Two lattice parameters, a and c , are listed for titanium.

The sigmoid-type modification U_{mod} has a small impact on the equilibrium lattice parameters, which almost coincide with those predicted by the original Gupta potential and agree reasonably well with the experimental results. Contrary to the linear correction, U_{mod} does not induce a strong compression of the Ti crystal and its lattice parameters obtained by means of U_{mod} are similar to those calculated with U_{Gup} . As discussed above, this is due to the functional form of U_{mod} wherein a positive contribution of U'_{mod} plays the role at small interatomic distances (which span over a few nearest atomic layers) while a negative contribution of U'_{mod} plays the role at larger values of r .

Fig. 5 shows the melting temperatures of finite-sized Ag, Au and Ti nanoparticles as function of their inverse diameter, $1/D$. For all these metals, the bulk melting temperature predicted by the original Gupta potential is significantly lower than the experimental values. The most il-

lustrative example is titanium (see Fig. 5,c) whose melting temperature calculated with U_{Gup} is approximately 1380 K. It is more than 500 K lower than the experimental value of 1941 K (marked by a star symbol) which yields the relative discrepancy of about 30%. A similar feature has been observed for gold and silver – the absolute discrepancy is smaller for these metals (about 330 K and 100 K, respectively) while the relative discrepancy for gold is as large as 25%. These results further justify the necessity of correcting the EAM-type potential to bring the calculated bulk melting temperatures in closer agreement with the experimental values. The modification U_{mod} produces a similar effect as the linear correction – it leads to an increase in nanoparticles' melting temperatures and, as a result, to an increase in bulk melting temperatures. The new modification improves the calculated bulk melting temperature for the three metals considered. Good

agreement with the experimental values has been obtained for titanium and silver (the relative discrepancies from the experimental values are 0.8 and 1.5%, respectively) while a somewhat larger discrepancy of about 6% has been observed for gold. This is linked to the observation that the sigmoid-type modification increases the slope of the $T_m(1/D)$ dependence for silver and titanium nanoparticles but it almost does not change the slope for gold nanoparticles. The utilized parameters of U_{mod} for gold have been chosen such that all the quantities considered in this work agree better with experimental data as compared to the original Gupta potential. An even better agreement might be achieved by performing a more detailed analysis of the multidimensional parameter surface of U_{mod} . A finer tuning of parameters should bring the calculated T_m^{bulk} for gold to a better agreement with experimental data.

Summary

We formulated a recipe for modification of classical embedded-atom method (EAM)-type potentials aiming at a quantitative description of both equilibrium and nonequilibrium properties of metal systems by means of molecular dynamics simulations. The modification suggested in this work asymptotically approaches zero at large interatomic distances and generalizes the previously developed linear correction [38]. A general procedure for constructing the modified EAM-type potential was outlined and the relation between parameters of the new modification and the linear correction was elaborated.

The procedure developed has been applied to analyze the melting temperature as well as lattice constants, cohesive energy and vacancy formation energy of nanosystems made of silver, gold and titanium. It was demonstrated that the modified potential leads to an increase in the melting temperature of the metals and to a better agreement with experimental values as compared to the uncorrected EAM-type potential. The new modification induces a small (on the order of a few per cent or less) change of the equilibrium properties but increases the bulk melting temperature by more than 30% as it is demonstrated for the case of titanium. We have considered the

many-body Gupta potential as an example but the generality of the correction allows its application in combination with other potentials of the EAM type such as Sutton – Chen or Finnis – Sinclair potentials. The results presented for the metals with cubic and hexagonal crystalline lattices further confirm a wide range of applicability of the proposed modification.

Appendix

Derivation of parameters of U_{mod}

To analytically derive the parameters of the sigmoid-type potential $U_{mod}(r)$, the latter was approximated by a piecewise linear function:

$$\bar{U}_{mod}(r) = \begin{cases} B_1 r + C_1, & r < R_0 \\ B_2 r + C_2, & R_0 < r < R_2 \\ 0, & r > R_2 \end{cases} \quad (8)$$

where $B_1 > 0$ ($C_1 < 0$) and $B_2 < 0$ ($C_2 > 0$),

$$R_0 = -\frac{C_1 - C_2}{B_1 - B_2}$$

is the point of intersection of the two linear segments, and $R_2 = -C_2/B_2$ is the point where $\bar{U}_{mod}(r) = 0$ (see dotted curves in Fig. 3). After substituting Eq. (8) into Eq. (4) and carrying out the integration one arrives at the condition:

$$\frac{(1-\gamma)^4}{(1-\beta)^3} = -\frac{\gamma^4}{\beta^3} \quad (9)$$

where $\beta = B_2/B_1$ and $\gamma = C_2/C_1$.

Substituting Eq. (8) in Eq. (6) one derives the force F_{mod} due to the potential $\bar{U}_{mod}(r)$. This force should be equal to the force F_{lin} arising due to the linear correction at a given cutoff in order to increase the melting temperature by the same value. This can be expressed as

$$\left(\frac{4}{3}\right)^3 \frac{C^3}{B^2} = \frac{C_1^3}{B_1^2} \left[\frac{(1-\gamma)^3}{(1-\beta)^2} + \frac{\gamma^3}{\beta^2} \right]. \quad (10)$$

The procedure for deriving the parameters of the sigmoid-type function U_{mod} (7) and its approximation \bar{U}_{mod} (8) can be summarized as follows:



(i) The parameters B and C of the linear correction are obtained as described in the section ‘Linear correction to EAM-type potentials’;

(ii) Fixing the point $R_1 = -C_1/B_1$ at which $U_{mod}(r) = 0$ (see Fig. 3) a scan over different values of B_1 and C_1 is performed;

(iii) β and γ are derived from the numerical solution of Eqs. (9) and (10), and the corresponding values of B_2 and C_2 are obtained;

(iv) Repeating steps (i) – (iii) for different combinations (B_1, C_1) one obtains a multidimensional parameter surface (B_1, C_1, B_2, C_2);

(v) Once $B_{1,2}, C_{1,2}$ are derived, the resulting piecewise function is fitted with the sigmoid-type

function U_{mod} , Eq. (7), to obtain the parameters λ and r_s .

Acknowledgments

This work was supported in part by Deutsche Forschungsgemeinschaft (Project No. 415716638), the European Union’s Horizon 2020 research and innovation programme (H2020-MSCA-IF-2017 “Radio-NP”, GA 794733) and the Alexander von Humboldt Foundation Linkage Grant. The possibility to perform calculations at the Goethe-HLR cluster of the Frankfurt Center for Scientific Computing is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. **Andreoni W., Yip S.** (Eds.), Handbook of materials modeling. Methods: theory and modeling, 2nd ed., Springer International Publishing, Cham, 2019.
2. **Rapaport D.C.**, The art of molecular dynamics simulation, 2nd ed., Cambridge University Press, 2011.
3. **Solov’yov I.A., Korol A.V., Solov’yov A.V.**, Multiscale modeling of complex molecular structure and dynamics with MBN Explorer, Springer International Publishing, Cham, 2017.
4. **Hoyt J.J., Asta M., Sadigh B.**, Test of the universal scaling law for the diffusion coefficient in liquid metals, Phys. Rev. Lett. 85 (3) (2000) 594–597.
5. **Sushko G.B., Verkhovtsev A.V., Yakubovich A.V., et al.**, Molecular dynamics simulation of self-diffusion processes in titanium in bulk material on grain junctions and on surface, J. Phys. Chem. A. 118 (33) (2014) 6685–6691.
6. **Cheng B., Paxton A.T., Ceriotti M.**, Hydrogen diffusion and trapping in α -iron: the role of quantum and anharmonic fluctuations, Phys. Rev. Lett. 120 (22) (2018) 225901.
7. **Verkhovtsev A.V., Yakubovich A.V., Sushko G.B., et al.**, Molecular dynamics simulations of the nanoindentation process of titanium crystal, Comput. Mater. Sci. 76 (August) (2013) 20–26.
8. **Zink M., Samwer K., Johnson W.L., Mayr S.G.**, Plastic deformation of metallic glasses: size of shear transformation zones from molecular dynamics simulations, Phys. Rev. B. 73 (17) (2006) 172203.
9. **Cleveland C.L., Luedtke W.D., Landman U.**, Melting of gold clusters: icosahedral precursors, Phys. Rev. Lett. 81 (10) (1998) 2036–2039.
10. **Qi Y., Cagin T., Johnson W.L., Goddard III W.A.**, Melting and crystallization in Ni nanoclusters: the mesoscale regime, J. Chem. Phys. 115 (1) (2001) 385–394.
11. **Lyalin A., Hussien A., Solov’yov A.V., Greiner W.**, Impurity effects on the melting of Ni clusters, Phys. Rev. B. 79 (16) (2009) 165403.
12. **Yakubovich A.V., Sushko G.B., Schramm S., Solov’yov A.V.**, Kinetics of liquid-solid phase transition in large nickel clusters, Phys. Rev. B. 88 (3) (2013) 035438.
13. **Purja Pun G.P., Mishin Y.**, Molecular dynamics simulation of the martensitic phase transformation in NiAl alloys, J. Phys.: Condens. Matter 22 (29) (2010) 295403.
14. **Kexel C., Schramm S., Solov’yov A.V.**, Atomistic simulation of martensite-austenite phase transition in nanoscale nickel-titanium crystals, Eur. Phys. J. B. 88 (9) (2015) 221.
15. **Kim S.-G., Horstemeyer M.F., Baskes M.I., et al.**, Semi-empirical potential methods for atomistic simulations of metals and their construction procedures, J. Eng. Mater. Technol. 131 (4) (2009) 041210.
16. **Lloyd J.R., Luo T.** (Eds.), Handbook of molecular dynamics potential functions, Begell

House, New York, Connecticut, 2011.

17. **Müser M.H.**, Semi-empirical interatomic potentials: recent advances and challenges, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 23 (7) (2015) 070401.

18. **Rassoulinejad-Mousavi S.M., Zhang Y.**, Interatomic potentials transferability for molecular simulations: a comparative study for platinum, gold and silver, *Sci. Rep.* 8 (2018) 2424.

19. **Rosato V., Guellope M., Legrand B.**, Thermodynamical and structural properties of f.c.c. transition metals using a simple tight-binding model, *Philos. Mag. A.* 59 (2) (1989) 321–326.

20. **Sutton A.P., Chen J.**, Long-range Finnis – Sinclair potentials, *Philos. Mag. Lett.* 61 (3) (1990) 139–146.

21. **Ackland G.J.**, Theoretical study of titanium surfaces and defects with a new many-body potential, *Philos. Mag. A.* 66 (6) (1992) 917–932.

22. **Cleri F., Rosato V.**, Tight-binding potentials for transition metals and alloys, *Phys. Rev. B.* 48 (1) (1993) 22–33.

23. **Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S.**, Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Phys. Rev. B.* 33 (12) (1986) 7983–7991.

24. **Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I.**, The embedded-atom method: a review of theory and applications, *Mater. Sci. Rep.* 9 (7–8) (1993) 251–310.

25. **Mishin Y., Asta M., Li J.**, Atomistic modeling of interfaces and their impact on microstructure and properties, *Acta Mater.* 58 (4) (2010) 1117–1151.

26. **Lang L., Yang K., Tian Z., et al.**, Development of a Ni–Mo interatomic potential for irradiation simulation, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 27 (4) (2019) 045009.

27. **Kavousi S., Novak B.R., Baskes M.I., et al.**, Modified embedded-atom method potential for high-temperature crystal-melt properties of Ti–Ni alloys and its application to phase field simulation of solidification, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 28 (1) (2020) 015006.

28. **Kim Y.-M., Lee B.-J., Baskes M.I.**, Modified embedded-atom method interatomic potentials for Ti and Zr, *Phys. Rev. B.* 74 (1) (2006) 014101.

29. **Ryu S., Weinberger C.R., Baskes M.I.,**

Cai W., Improved modified embedded-atom method potentials for gold and silicon, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 17 (7) (2009) 075008.

30. **Lewis L.J., Jensen P., Barrat J.-L.**, Melting, freezing, and coalescence of gold nanoclusters, *Phys. Rev. B.* 56 (4) (1997) 2248–2257.

31. **Nordlund K., Kuronen A.**, Non-equilibrium properties of GaAs interatomic potentials, *Nucl. Instrum. Meth. B.* 159 (3) (1999) 183–186.

32. **Wang Z.W., Palmer R.E.**, Determination of the ground-state atomic structures of size-selected Au nanoclusters by electron-beam-induced transformation, *Phys. Rev. Lett.* 108 (24) (2012) 245502.

33. **Sushko G.B., Solov'yov I.A., Solov'yov A.V.**, Molecular dynamics for irradiation driven chemistry: application to the FEBID process, *Eur. Phys. J. D.* 70(10) (2016) 217.

34. **Huth M., Porrati F., Schwab C., et al.**, Focused electron beam induced deposition: a perspective, *Beilstein J. Nanotechnol.* 3 (2012) 597–619.

35. **Sturgeon J.B., Laird B.B.**, Adjusting the melting point of a model system via Gibbs–Duhem integration: application to a model of aluminum, *Phys. Rev. B.* 62 (22) (2000) 14720–14727.

36. **Ackland G.J.**, Temperature dependence in interatomic potentials and an improved potential for Ti, *J. Phys.: Conf. Ser.* 402 (2012) 012001.

37. **Mendelev M.I., Underwood T.L., Ackland G.J.**, Development of an interatomic potential for the simulation of defects, plasticity and phase transformations in titanium, *J. Chem. Phys.* 145 (15) (2016) 154102.

38. **Sushko G.B., Verkhovtsev A.V., Kexel C., et al.**, Reconciling simulated melting and ground-state properties of metals with a modified embedded-atom method potential, *J. Phys.: Condens. Matter.* 28 (14) (2016) 145201.

39. **Gupta R.P.** Lattice relaxation at a metal surface, *Phys. Rev. B.* 23 (12) (1981) 6265–6270.

40. **Kexel C., Verkhovtsev A.V., Sushko G.B., et al.**, Toward the exploration of the NiTi phase diagram with a classical force field, *J. Phys. Chem. C.* 120 (43) (2016) 25043–25052.

41. **Finnis M.W., Sinclair J.E.**, A simple empirical N-body potential for transition metals, *Philos. Mag. A.* 50 (1) (1984) 45–55.

42. **Ackland G.J., Finnis M.W., Vitek V.,**



- Validity of the second moment tight-binding model, *J. Phys. F: Met. Phys.* 18 (8) (1988) L153–L157.
43. **Goringe C.M., Bowler D.R., Hernandez E.**, Tight-binding modelling of materials, *Rep. Prog. Phys.* 60 (12) (1997) 1447–1512.
44. **Daw M.S., Baskes M.I.**, Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals, *Phys. Rev. Lett.* 50 (17) (1983) 1285–1288.
45. **Dzugutov M.**, Glass formation in a simple monatomic liquid with icosahedral inherent local order, *Phys. Rev. A.* 46 (6) (1992) 2984–2987.
46. **Solov'yov I.A., Yakubovich A.V., Nikolaev P.V., et al.**, MBN Explorer – a universal program for multiscale computer simulations of complex molecular structure and dynamics, *J. Comput. Chem.* 33 (30) (2012) 2412–2439.
47. **Sushko G.B., Solov'yov I.A., Solov'yov A.V.**, Modeling MesoBioNano systems with MBN Studio made easy, *J. Mol. Graph. Model.* 88 (May) (2019) 247–260.
48. **Pawlow P.**, Über die Abhängigkeit des Schmelzpunktes von der Oberflächenenergie eines festen Körpers, *Z. Phys. Chem.* 65 (1909) 1–35.
49. **Calvo F.**, Thermodynamics of nanoalloys, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (42) (2015) 27922–27939.
50. **Kittel C.**, *Introduction to Solid State Physics*, 7th ed., Wiley, 1995.
51. **Baskes M.I.**, Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities, *Phys. Rev. B.* 46 (5) (1992) 2727–2742.
52. **McGervey J.D., Triftshäuser W.**, Vacancy-formation energies in copper and silver from positron annihilation, *Phys. Lett. A.* 44 (1) (1973) 53–54.
53. **Simmons R.O., Balluffi R.W.**, Measurement of the equilibrium concentration of lattice vacancies in silver near the melting point, *Phys. Rev.* 119 (2) (1960) 600–605.
54. **Doyama M., Kogure Y.**, Embedded atom potentials in fcc metals, *Radiat. Eff. Defects Solids.* 142 (1–4) (1997) 107–114.
55. **Jongenburger P.**, Energy of formation of vacancies in copper and gold, *Phys. Rev.* 106 (1) (1957) 66–69.
56. **Shestopal V.O.**, Specific heat and vacancy formation in titanium at high temperatures, *Sov. Phys. Solid State.* 7 (11) (1966) 2798–2799.
57. **Johnson R.A.**, Many-body effects on calculated defect properties in h.c.p. metals, *Philos. Mag. A* 63 (5) (1991) 865–872.
58. **Lai W.S., Liu B.X.**, Lattice stability of some Ni–Ti alloy phases versus their chemical composition and disordering, *J. Phys.: Condens. Matter* 12 (5) (2000) L53–L60.
59. **Baskes M.I., Johnson R.A.**, Modified embedded atom potentials for HCP metals, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2 (1) (1994) 147–163.
60. **Raji A.T., Scandolo S., Mazzarello R., et al.**, Ab initio pseudopotential study of vacancies and self-interstitials in HCP titanium, *Philos. Mag.* 89 (20) (2009) 1629–1645.
61. **Le Bacq O., Willaime F., Pasturel A.**, Unrelaxed vacancy formation energies in group-IV elements calculated by the full-potential linear Muffin-tin orbital method: invariance with crystal structure, *Phys. Rev. B.* 59 (13) (1999) 8508–8515.
62. **Korzhavyi P.A., Abrikosov I.A., Johansson B., et al.**, First-principles calculations of the vacancy formation energy in transition and noble metals, *Phys. Rev. B.* 59 (18) (1999) 11693–11703.
63. **Mattsson T.R., Mattsson A.E.**, Calculating the vacancy formation energy in metals: Pt, Pd, and Mo, *Phys. Rev. B.* 66 (21) (2002) 214110.

Received 13.05.2020, accepted 04.06.2020.

THE AUTHORS

VERKHOVTSEV Alexey V.

MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology

3 Altenhöferallee, Frankfurt am Main, 60438, Germany

verkhovtsev@mbnexplorer.com

KOROL Andrei V.

MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology
3 Altenhöferallee, Frankfurt am Main, 60438, Germany
korol@mbnexplorer.com

SUSHKO Gennady B.

MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology
3 Altenhöferallee, Frankfurt am Main, 60438, Germany
sushko@mbnexplorer.com

SCHRAMM Stefan

Goethe University Frankfurt
1 Max-von-Laue St., Frankfurt am Main, 60438, Germany

SOLOV'YOV Andrey V.

MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology
3 Altenhöferallee, Frankfurt am Main, 60438, Germany
solovyov@mbnresearch.com

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Andreoni W., Yip S.** (Eds.). Handbook of materials modeling. Methods: theory and modeling. 2nd Ed. Springer International Publishing, Cham. 2019. 1987 p.
2. **Rapaport D.C.** The art of molecular dynamics simulation. 2nd Ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. 549 p.
3. **Solov'yov I.A., Korol A.V., Solov'yov A.V.** Multiscale modeling of complex molecular structure and dynamics with MBN Explorer. Springer International Publishing, Cham. 2017. 451 p.
4. **Hoyt J.J., Asta M., Sadigh B.** Test of the universal scaling law for the diffusion coefficient in liquid metals // *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 85. No. 3. Pp. 594–597.
5. **Sushko G.B., Verkhovtsev A.V., Yakubovich A.V., Schramm S., Solov'yov A.V.** Molecular dynamics simulation of self-diffusion processes in titanium in bulk material, on grain junctions and on surface // *J. Phys. Chem. A.* 2014. Vol. 118. No. 33. Pp. 6685–6691.
6. **Cheng B., Paxton A.T., Ceriotti M.** Hydrogen diffusion and trapping in α -iron: the role of quantum and anharmonic fluctuations // *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 120. No. 22. P. 225901.
7. **Verkhovtsev A.V., Yakubovich A.V., Sushko G.B., Hanauske M., Solov'yov A.V.** Molecular dynamics simulations of the nanoindentation process of titanium crystal // *Comput. Mater. Sci.* 2013. Vol. 76. August. Pp. 20–26.
8. **Zink M., Samwer K., Johnson W.L., Mayr S.G.** Plastic deformation of metallic glasses: size of shear transformation zones from molecular dynamics simulations // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 73. No. 17. P. 172203.
9. **Cleveland C.L., Luedtke W.D., Landman U.** Melting of gold clusters: icosahedral precursors // *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 81. No. 10. Pp. 2036–2039.
10. **Qi Y., Cagin T., Johnson W.L., Goddard III W.A.** Melting and crystallization in Ni nanoclusters: the mesoscale regime // *J. Chem. Phys.* 2001. Vol. 115. No. 1. Pp. 385–394.
11. **Lyalin A., Hussien A., Solov'yov A.V., Greiner W.** Impurity effects on the melting of Ni clusters // *Phys. Rev. B.* 2009. Vol. 79. No. 16. P. 165403.
12. **Yakubovich A.V., Sushko G.B., Schramm S., Solov'yov A.V.** Kinetics of liquid-solid phase transition in large nickel clusters // *Phys. Rev. B.* 2013. Vol. 88. No. 3. P. 035438.
13. **Purja Pun G.P., Mishin Y.** Molecular dynamics simulation of the martensitic phase transformation in NiAl alloys // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2010. Vol. 22. No. 29. P. 295403.
14. **Kexel C., Schramm S., Solov'yov A.V.**



Atomistic simulation of martensite-austenite phase transition in nanoscale nickel-titanium crystals // *Eur. Phys. J. B.* 2015. Vol. 88. No. 9. P. 221.

15. **Kim S.-G., Horstemeyer M.F., Baskes M.I., Rais-Rohani M., Kim S., Jelinek B., Houze J., Moitra A., Liyanage L.** Semi-empirical potential methods for atomistic simulations of metals and their construction procedures // *J. Eng. Mater. Technol.* 2009. Vol. 131. No. 4. P. 041210.

16. **Lloyd J.R., Luo T.** (Eds.). *Handbook of molecular dynamics potential functions.* New York, Connecticut: Begell House, 2011. 245 p.

17. **Müser M.H.** Semi-empirical interatomic potentials: recent advances and challenges // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2015. Vol. 23. No. 7. P. 070401.

18. **Rassoulinejad-Mousavi S.M., Zhang Y.** Interatomic potentials transferability for molecular simulations: a comparative study for platinum, gold and silver // *Sci. Rep.* 2018. Vol. 8. P. 2424.

19. **Rosato V., Guellope M., Legrand B.** Thermodynamical and structural properties of f.c.c. transition metals using a simple tight-binding model // *Philos. Mag. A.* 1989. Vol. 59. No. 2. Pp. 321–326.

20. **Sutton A.P., Chen J.** Long-range Finnis – Sinclair potentials // *Philos. Mag. Lett.* 1990. Vol. 61. No. 3. Pp. 139–146.

21. **Ackland G.J.** Theoretical study of titanium surfaces and defects with a new many-body potential // *Philos. Mag. A.* 1992. Vol. 66. No. 6. Pp. 917–932.

22. **Cleri F., Rosato V.** Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Phys. Rev. B.* 1993. Vol. 48. No. 1. Pp. 22–33.

23. **Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S.** Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // *Phys. Rev. B.* 1986. Vol. 33. No. 12. Pp. 7983–7991.

24. **Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I.** The embedded-atom method: a review of theory and applications // *Mater. Sci. Rep.* 1993. Vol. 9. No. 7–8. Pp. 251–310.

25. **Mishin Y., Asta M., Li J.** Atomistic modeling of interfaces and their impact on microstructure and properties // *Acta Mater.* 2010. Vol. 58. No. 4. Pp. 1117–1151.

26. **Lang L., Yang K., Tian Z., Deng H., Gao**

F., Hu W., Mo Y. Development of a Ni-Mo interatomic potential for irradiation simulation // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2019. Vol. 27. No. 4. P. 045009.

27. **Kavousi S., Novak B.R., Baskes M.I., Asle Zaeem M., Moldovan D.** Modified embedded-atom method potential for high-temperature crystal-melt properties of Ti-Ni alloys and its application to phase field simulation of solidification // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2020. Vol. 28. No. 1. P. 015006.

28. **Kim Y.-M., Lee B.-J., Baskes M.I.** Modified embedded-atom method interatomic potentials for Ti and Zr // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 74. No. 1. P. 014101.

29. **Ryu S., Weinberger C.R., Baskes M.I., Cai W.** Improved modified embedded-atom method potentials for gold and silicon // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2009. Vol. 17. No. 7. P. 075008.

30. **Lewis L.J., Jensen P., Barrat J.-L.** Melting, freezing, and coalescence of gold nanoclusters // *Phys. Rev. B.* 1997. Vol. 56. No. 4. Pp. 2248–2257.

31. **Nordlund K., Kuronen A.** Non-equilibrium properties of GaAs interatomic potentials // *Nucl. Instrum. Meth. B.* 1999. Vol. 159. No. 3. Pp. 183–186.

32. **Wang Z.W., Palmer R.E.** Determination of the ground-state atomic structures of size-selected Au nanoclusters by electron-beam-induced transformation // *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 108. No. 24. P. 245502.

33. **Sushko G.B., Solov'yov I.A., Solov'yov A.V.** Molecular dynamics for irradiation driven chemistry: application to the FEBID process // *Eur. Phys. J. D.* 2016. Vol. 70. No. 10. P. 217.

34. **Huth M., Porrati F., Schwab C., Winhold M., Sachser R., Dukic M., Adams J., Fantner G.** Focused electron beam induced deposition: a perspective // *Beilstein J. Nanotechnol.* 2012. Vol. 3. Pp. 597–619.

35. **Sturgeon J.B., Laird B.B.** Adjusting the melting point of a model system via Gibbs-Duhem integration: application to a model of aluminum // *Phys. Rev. B.* 2000. Vol. 62. No. 22. Pp. 14720–14727.

36. **Ackland G.J.** Temperature dependence in interatomic potentials and an improved poten-

tial for Ti // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2012. Vol. 402. P. 012001

37. **Mendelev M.I., Underwood T.L., Ackland G.J.** Development of an interatomic potential for the simulation of defects, plasticity and phase transformations in titanium // *J. Chem. Phys.* 2016. Vol. 145. No. 15. P. 154102.

38. **Sushko G.B., Verkhovtsev A.V., Kexel C., Korol A.V., Schramm S., Solov'yov A.V.** Reconciling simulated melting and ground-state properties of metals with a modified embedded-atom method potential // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2016. Vol. 28. No. 14. P. 145201.

39. **Gupta R.P.** Lattice relaxation at a metal surface // *Phys. Rev. B.* 1981. Vol. 23. No. 12. Pp. 6265–6270.

40. **Kexel C., Verkhovtsev A.V., Sushko G.B., Korol A.V., Schramm S., Solov'yov A.V.** Toward the exploration of the NiTi phase diagram with a classical force field // *J. Phys. Chem. C.* 2016. Vol. 120. No. 43. Pp. 25043–25052.

41. **Finnis M.W., Sinclair J.E.** A simple empirical N-body potential for transition metals // *Philos. Mag. A.* 1984. Vol. 50. No. 1. Pp. 45–55.

42. **Ackland G.J., Finnis M.W., Vitek V.** Validity of the second moment tight-binding model // *J. Phys. F: Met. Phys.* 1988. Vol. 18. No. 8. Pp. L153–L157.

43. **Goringe C.M., Bowler D.R., Hernandez E.** Tight-binding modelling of materials // *Rep. Prog. Phys.* 1997. Vol. 60. No. 12. Pp. 1447–1512.

44. **Daw M.S., Baskes M.I.** Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals // *Phys. Rev. Lett.* 1983. Vol. 50. No. 17. Pp. 1285–1288.

45. **Dzugutov M.** Glass formation in a simple monatomic liquid with icosahedral inherent local order // *Phys. Rev. A.* 1992. Vol. 46. No. 6. Pp. 2984–2987.

46. **Solov'yov I.A., Yakubovich A.V., Nikolaev P.V., Volkovets I., Solov'yov A.V.** MBN Explorer – a universal program for multiscale computer simulations of complex molecular structure and dynamics // *J. Comput. Chem.* 2012. Vol. 33. No. 30. Pp. 2412–2439.

47. **Sushko G.B., Solov'yov I.A., Solov'yov A.V.** Modeling MesoBioNano systems with MBN Studio made easy // *J. Mol. Graph. Model.* 2019.

Vol. 88. May. Pp. 247–260.

48. **Pawlow P.** Über die Abhängigkeit des Schmelzpunktes von der Oberflächenenergie eines festen Körpers // *Z. Phys. Chem.* 1909. Vol. 65. Pp. 1–35.

49. **Calvo F.** Thermodynamics of nanoalloys // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015. Vol. 17. No. 42. Pp. 27922–27939.

50. **Киттель Ч.** Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. 791 с.

51. **Baskes M.I.** Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // *Phys. Rev. B.* 1992. Vol. 46. No. 5. Pp. 2727–2742.

52. **McGervey J.D., Triftshäuser W.** Vacancy-formation energies in copper and silver from positron annihilation // *Phys. Lett. A.* 1973. Vol. 44. No. 1. Pp. 53–54.

53. **Simmons R.O., Balluffi R.W.** Measurement of the equilibrium concentration of lattice vacancies in silver near the melting point // *Phys. Rev.* 1960. Vol. 119. No. 2. Pp. 600–605.

54. **Doyama M., Kogure Y.** Embedded atom potentials in fcc metals // *Radiat. Eff. Defects Solids.* 1997. Vol. 142. No. 1–4. Pp. 107–114.

55. **Jongenburger P.** Energy of formation of vacancies in copper and gold // *Phys. Rev.* 1957. Vol. 106. No. 1. Pp. 66–69.

56. **Щестопал В.О.** Теплоемкость и образование вакансий в титане при высоких температурах // *Физика твердого тела.* 1965. Т. 7. Вып. 11. С. 3461–3462.

57. **Johnson R.A.** Many-body effects on calculated defect properties in h.c.p. metals // *Philos. Mag. A.* 1991. Vol. 63. No. 5. Pp. 865–872.

58. **Lai W.S., Liu B.X.** Lattice stability of some Ni–Ti alloy phases versus their chemical composition and disordering // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2000. Vol. 12. No. 5. Pp. L53–L60.

59. **Baskes M.I., Johnson R.A.** Modified embedded atom potentials for HCP metals // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 1994. Vol. 2. No. 1. Pp. 147–163.

60. **Raji A.T., Scandolo S., Mazzarello R., Nsengiyumva S., Härting M., Britton D.T.** Ab initio pseudopotential study of vacancies and self-interstitials in HCP titanium // *Philos. Mag.* 2009. Vol. 89. No. 20. Pp. 1629–1645.

61. **Le Bacq O., Willaime F., Pasturel A.** Un-



relaxed vacancy formation energies in group-IV elements calculated by the full-potential linear Muffin-tin orbital method: invariance with crystal structure // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. No. 13. Pp. 8508–8515.

62. **Korzhavii P.A., Abrikosov I.A., Johansson B., Ruban A.V., Skriver H.L.** First-principles cal-

culations of the vacancy formation energy in transition and noble metals // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 59. No. 18. Pp. 11693–11703.

63. **Mattsson T.R., Mattsson A.E.** Calculating the vacancy formation energy in metals: Pt, Pd, and Mo // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 66. No. 21. P. 214110.

Статья поступила в редакцию 13.05.2020, принята к публикации 04.06.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВЕРХОВЦЕВ Алексей Валерьевич – Ph.D., научный сотрудник Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN), г. Франкфурт-на-Майне, Германия.

60438, Германия, г. Франкфурт-на-Майне, Альтенхёфераллее, 3
verkhovtsev@mbnexplorer.com

КОРОЛЬ Андрей Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент, научный сотрудник Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN), г. Франкфурт-на-Майне, Германия.

60438, Германия, г. Франкфурт-на-Майне, Альтенхёфераллее, 3
korol@mbnexplorer.com

СУШКО Геннадий Борисович – Ph.D., научный сотрудник Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN), г. Франкфурт-на-Майне, Германия.

60438, Германия, Франкфурт-на-Майне, Альтенхёфераллее, 3
sushko@mbnexplorer.com

ШРАММ Штефан – Ph.D., профессор Центра научных вычислений Франкфуртского университета им. Гёте.

60438, Германия, Франкфурт-на-Майне, Макс-фон-Лауэ штрассе, 1

СОЛОВЬЁВ Андрей Владимирович – доктор физико-математических наук, профессор Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN), г. Франкфурт-на-Майне, Германия.

60438, Германия, г. Франкфурт-на-Майне, Альтенхёфераллее, 3
solovyov@mbnresearch.com

DOI: 10.18721/JPM.13304
УДК 519.632

ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О ДИФФУЗИИ В ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ЕМКОСТИ С ВНУТРЕННИМ ИСТОЧНИКОМ, ПОЛУЧЕННЫЕ МЕТОДОМ БЫСТРЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ

**А.Д. Чернышов¹, Д.С. Сайко¹, В.В. Горяйнов²,
С.Ф. Кузнецов¹, О.Ю. Никифорова¹**

¹ Воронежский государственный университет инженерных технологий,
г. Воронеж, Российская Федерация;

² Воронежский государственный технический университет,
г. Воронеж, Российская Федерация

Методом быстрых разложений решается в общем виде задача диффузии в теле прямоугольной формы с граничными условиями 1-го рода и внутренним источником вещества, зависящим от координат точек прямоугольника. Получено точное решение, содержащее свободные параметры, изменяя которые можно получить множество новых точных решений. В качестве примера показаны точные решения задачи с постоянным внутренним источником. Из анализа точных решений следует, что распределения концентрации и диффузионных потоков будут симметричны относительно плоскости $y = b/2$ при условии равенства нулю концентрации вещества в углах прямоугольной области. Изучение перепада диффузионных потоков вдоль координатных осей показало, что на перепад несимметричных потоков влияет постоянный внутренний источник и не влияет концентрация вещества в углах области.

Ключевые слова: точное решение, диффузия, внутренний источник, прямоугольная форма, быстрое разложение

Ссылка при цитировании: Чернышов А.Д., Сайко Д.С., Горяйнов В.В. Кузнецов С.Ф., Никифорова О.Ю. Точные решения задачи о диффузии в прямоугольной емкости с внутренним источником, полученные методом быстрых разложений // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 42–55. DOI: 10.18721/JPM.13304

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

THE DIFFUSION PROBLEM IN A RECTANGULAR CONTAINER WITH AN INTERNAL SOURCE: EXACT SOLUTIONS OBTAINED BY THE FAST EXPANSION METHOD

**A.D. Chernyshov¹, D.S. Sajko¹, V.V. Goryainov²,
S.F. Kuznetsov¹, O.Yu. Nikiforova¹**

¹ Voronezh State University of Engineering Technology, Voronezh, Russian Federation;

² Voronezh State Technical University, Voronezh, Russian Federation

The diffusion problem in a rectangular-shaped body with the Dirichlet's boundary conditions and an internal substance source depending on the rectangle points' coordinates has been solved generally by the fast expansion method (FEM). The exact solution containing free parameters was obtained, and by changing them one could get many new exact solutions. Exact solutions to the problem with a constant internal source were shown as an example. From our analysis of the exact solutions it follows that the concentration and diffusion fluxes distributions should be symmetrical relative to the plane $y = b/2$, provided that the substance concentration in the corners of the rectangular area is equal to zero. An investigation into the difference in the diffusion fluxes along the coordinate axes showed that the

constant internal source affected the difference in the nonsymmetrical fluxes, and the concentration of the substance in the area corners had no effect.

Keywords: exact solution, diffusion, internal source, rectangular shape, fast expansion method

Citation: Chernyshov A.D., Sajko D.S., Goryainov V.V., Kuznetsov S.F., Nikiforova O.Yu., The diffusion problem in a rectangular container with an internal source: exact solutions obtained by the fast expansion method, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 42–55. DOI: 10.18721/JPM.13304

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

Введение

Для решения плоских задач диффузии применяются различные методы, например метод коллокации и наименьших квадратов повышенной точности. В статье [1] для приближенного и однозначного задания границы области по ее дискретным данным, в прямоугольной системе координат строится параметрический двойной сплайн, в качестве компонент которого взяты два кубических сплайна. Численно-аналитическое представление решения двумерных и трехмерных краевых задач получено в работе [2] с помощью интегральных преобразований Фурье – Лапласа. В статье [3] изложен метод построения точных решений уравнений нелинейной диффузии в одномерном координатном пространстве на основе использования специального принципа суперпозиции. Для решения задач диффузии в сплошных средах в статье [4] предложен приближенный самосогласованный метод решения системы функциональных уравнений, полученных на основе спектрального разложения корреляции Эйлера несущей среды. Методы конечных разностей используются в работах [5 – 8]. В статьях [9 – 11] применяются квадратурные методы, а в [12, 13] используется метод, основанный на использовании вейвлетов Хаара.

В данной работе методом быстрых разложений [14] получены некоторые точные решения задачи о диффузии в теле прямоугольной формы с граничными условиями первого рода и внутренним источником вещества, зависящим от координат точек прямоугольника.

Постановка задачи

Рассмотрим задачу диффузии, когда тело имеет прямоугольную форму Ω . Для неизвестной концентрации $C(x, y)$ явление диффузии можно описать с помощью дифференциального уравнения второго порядка в частных производных по переменным x, y с заданным внутренним источником вещества $F(x, y)$ (уравнение Пуассона):

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + F(x, y) = 0, \quad (1)$$

$$(x, y) \in \Omega, \quad 0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq b.$$

Граничные условия зададим в виде

$$\begin{aligned} C|_{x=0} &= f_1(y), \quad C|_{y=0} = f_2(x), \\ C|_{x=a} &= f_3(y), \quad C|_{y=b} = f_4(x). \end{aligned} \quad (2)$$

Решение задачи о распределении концентрации вещества $C(x, y)$ будем представлять простейшей зависимостью из теории быстрых разложений [14 – 16] при помощи полиномов, имеющих вид

$$\begin{aligned} P_1(x) &= 1 - \frac{x}{a}, \quad P_2(x) = \frac{x}{a}, \\ P_3(x) &= \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6a} - \frac{ax}{3}, \quad P_4(x) = \frac{x^3}{6a} - \frac{ax}{6}, \\ P_1(y) &= 1 - \frac{y}{b}, \quad P_2(y) = \frac{y}{b}, \\ P_3(y) &= \frac{y^2}{2} - \frac{y^3}{6b} - \frac{by}{3}, \quad P_4(y) = \frac{y^3}{6b} - \frac{by}{6}, \\ (x, y) &\in \Omega \quad (0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq b). \end{aligned}$$

Вывод предполагаемого точного решения $C(x, y)$ запишем конечным выражением, которое используется для быстрого разложения [14 – 16], т. е. состоящим из полиномиальной и конечной тригонометрической частей:

$$C(x, y) = \sum_{i=1}^4 A_i(y) P_i(x) + A_5(y) \sin \pi \frac{x}{a} + A_6(y) \sin 2\pi \frac{x}{a}, \quad (3)$$

где

$$A_i(y) = \sum_{j=1}^4 A_{i,j} P_j(y) + A_{i,5} \sin \pi \frac{y}{b} + A_{i,6} \sin 2\pi \frac{y}{b}, \\ i = 1 \div 6, \quad 0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq b.$$

Вид выражения (3) привлекателен тем, что подобной формой можно с высокой точностью аппроксимировать широкий класс гладких функций из пространства Соболева – Лиувилля, заданных в граничных условиях и в качестве внутреннего источника, имеющих практическое значение.

Функции, входящие в граничные условия (2), и внутренний источник $F(x, y)$ концентрации вещества, запишем конечными суммами по аналогии с зависимостью (3):

$$f_1(y) = \sum_{j=1}^4 f_{1,j} P_j(y) + f_{1,5} \sin \pi \frac{y}{b} + f_{1,6} \sin 2\pi \frac{y}{b}, \\ f_2(x) = \sum_{j=1}^4 f_{2,j} P_j(x) + f_{2,5} \sin \pi \frac{x}{a} + f_{2,6} \sin 2\pi \frac{x}{a}, \quad (4) \\ f_3(y) = \sum_{j=1}^4 f_{3,j} P_j(y) + f_{3,5} \sin \pi \frac{y}{b} + f_{3,6} \sin 2\pi \frac{y}{b}, \\ f_4(x) = \sum_{j=1}^4 f_{4,j} P_j(x) +$$

$$+ f_{4,5} \sin \pi \frac{x}{a} + f_{4,6} \sin 2\pi \frac{x}{a}. \\ F(x, y) = \sum_{i=1}^4 \left(\sum_{j=1}^4 F_{i,j} P_j(y) + F_{i,5} \sin \pi \frac{y}{b} + F_{i,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) P_i(x) + \\ + \left(\sum_{j=1}^4 F_{5,j} P_j(y) + F_{5,5} \sin \pi \frac{y}{b} + F_{5,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) \sin \pi \frac{x}{a} + \\ + \left(\sum_{j=1}^4 F_{6,j} P_j(y) + F_{6,5} \sin \pi \frac{y}{b} + F_{6,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) \sin 2\pi \frac{x}{a}. \quad (5)$$

В равенствах (4) и (5) коэффициенты f_{ij} и F_{ij} считаем известными величинами. Коэффициенты A_{ij} из выражения (3) считаем пока неизвестными. Их надо найти при помощи точного выполнения граничных условий (2) и дифференциального уравнения (1).

Решение (3) краевой задачи (1), (2) должно удовлетворять условиям согласований граничных условий (2) и дифференциального уравнения (1) в угловых точках:

$$f_1(0) = f_2(0), \quad f_2(a) = f_3(0), \\ f_3(b) = f_4(a), \quad f_1(b) = f_4(0), \\ C_{xx}(0,0) + C_{yy}(0,0) + F(0,0) = 0, \\ C_{xx}(a,0) + C_{yy}(a,0) + F(a,0) = 0, \quad (6) \\ C_{xx}(0,b) + C_{yy}(0,b) + F(0,b) = 0, \\ C_{xx}(a,b) + C_{yy}(a,b) + F(a,b) = 0.$$

Условия (6) следуют из независимости величины концентрации $C(x, y)$ от направления подхода к углам прямоугольной области.

Таким образом, приходим к следующей задаче:

Требуется найти такое решение уравнения (1) с заданным внутренним источником в виде (5), которое должно точно удовлетворять

граничным условиям (2) и условиям согласованной (6).

Решение задачи

Вначале подставим предполагаемое точное решение задачи в форме (3) в граничные условия (2):

$$\begin{aligned}
 & \sum_{j=1}^4 f_{1,j} P_j(y) + f_{1,5} \sin \pi \frac{y}{b} + \\
 & + f_{1,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} = \sum_{j=1}^4 A_{1,j} P_j(y) + \\
 & + A_{1,5} \sin \pi \frac{y}{b} + A_{1,6} \sin 2\pi \frac{y}{b}, \\
 & \sum_{j=1}^4 f_{2,j} P_j(x) + f_{2,5} \sin \pi \frac{x}{a} + \\
 & + f_{2,6} \sin 2\pi \frac{x}{a} = \sum_{i=1}^4 A_{i,1} P_i(x) + \\
 & + A_{5,1} \sin \pi \frac{x}{a} + A_{6,1} \sin 2\pi \frac{x}{a}, \quad (7) \\
 & \sum_{j=1}^4 f_{3,j} P_j(y) + f_{3,5} \sin \pi \frac{y}{b} + \\
 & + f_{3,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} = \sum_{j=1}^4 A_{2,j} P_j(y) + \\
 & + A_{2,5} \sin \pi \frac{y}{b} + A_{2,6} \sin 2\pi \frac{y}{b}, \\
 & \sum_{j=1}^4 f_{4,j} P_j(x) + f_{4,5} \sin \pi \frac{x}{a} + \\
 & + f_{4,6} \sin 2\pi \frac{x}{a} = \sum_{i=1}^4 A_{i,2} P_i(x) + \\
 & + A_{5,2} \sin \pi \frac{x}{a} + A_{6,2} \sin 2\pi \frac{x}{a}.
 \end{aligned}$$

Полученные равенства (7) относительно неизвестных A_{ij} должны выполняться для $\forall (x, y) \in \Omega_0$.

Далее подставим $C(x, y)$ из выражения (3) в дифференциальное уравнение (1):

$$\begin{aligned}
 & \sum_{i=1}^4 \left(\sum_{j=1}^4 A_{i,j} P_j(y) + A_{i,5} \sin \pi \frac{y}{b} + \right. \\
 & \left. + A_{i,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) P_i''(x) -
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{\pi^2}{a^2} \left(\sum_{j=1}^4 A_{5,j} P_j(y) + A_{5,5} \sin \pi \frac{y}{b} + \right. \\
 & \left. + A_{5,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) \sin \pi \frac{x}{a} - \\
 & - \frac{4\pi^2}{a^2} \left(\sum_{j=1}^4 A_{6,j} P_j(y) + A_{6,5} \sin \pi \frac{y}{b} + \right. \\
 & \left. + A_{6,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) \sin 2\pi \frac{x}{a} + \\
 & + \sum_{i=1}^4 \left(\sum_{j=1}^4 A_{i,j} P_j''(y) - A_{i,5} \frac{\pi^2}{b^2} \sin \pi \frac{y}{b} - \right. \\
 & \left. - A_{i,6} \frac{4\pi^2}{b^2} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) P_i(x) + \quad (8) \\
 & + \left(\sum_{j=1}^4 A_{5,j} P_j''(y) - A_{5,5} \frac{\pi^2}{b^2} \sin \pi \frac{y}{b} - \right. \\
 & \left. - A_{5,6} \frac{4\pi^2}{b^2} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) \sin \pi \frac{x}{a} + \\
 & + \left(\sum_{j=1}^4 A_{6,j} P_j''(y) - A_{6,5} \frac{\pi^2}{b^2} \sin \pi \frac{y}{b} - \right. \\
 & \left. - A_{6,6} \frac{4\pi^2}{b^2} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) \sin 2\pi \frac{x}{a} + \\
 & + \sum_{i=1}^4 \left(\sum_{j=1}^4 F_{i,j} P_j(y) + F_{i,5} \sin \pi \frac{y}{b} + \right. \\
 & \left. + F_{i,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) P_i(x) + \\
 & + \left(\sum_{j=1}^4 F_{5,j} P_j(y) + F_{5,5} \sin \pi \frac{y}{b} + \right. \\
 & \left. + F_{5,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) \sin \pi \frac{x}{a} + \\
 & + \left(\sum_{j=1}^4 F_{6,j} P_j(y) + F_{6,5} \sin \pi \frac{y}{b} + \right. \\
 & \left. + F_{6,6} \sin 2\pi \frac{y}{b} \right) \sin 2\pi \frac{x}{a} = 0.
 \end{aligned}$$

Уравнение (8) должно выполняться при любых

$$0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b.$$

В равенствах (7) и (8) линейно независимыми являются следующие функции:

$$\begin{aligned} &P_1(x), P_2(x), P_3(x), P_4(x), \\ &P_1(y), P_2(y), P_3(y), P_4(y), \\ &\sin \pi \frac{x}{a}, \sin \pi \frac{y}{b}, \\ &\sin 2\pi \frac{x}{a}, \sin 2\pi \frac{y}{b}. \end{aligned} \quad (9)$$

Функциональную систему (7), (8) сведем к системе линейных алгебраических уравнений путем приравнивания коэффициентов в равенствах (7) и (8) слева и справа перед линейно независимыми функциями (9), учитывая следующие равенства [14, 15]:

$$P_1'' = P_2'' = 0, \quad P_3'' = P_1, \quad P_4'' = P_2.$$

Полученная система линейных алгебраических уравнений будет переопределенной, но благодаря выполнению условий согласований (6) данная система имеет решение. Из анализа алгебраической системы следует, что условия согласований (6) выполняются автоматически, так как все алгебраические соотношения, получаемые из (6), входят в систему линейных алгебраических уравнений. Для нахождения неизвестных A_{ij} необходимо решить 36 алгебраических уравнений, а остальные уравнения мы используем для составления соотношений между коэффициентами

$$f_{i,j} (i = 1 \div 4, j = 1 \div 6)$$

и

$$F_{i,j} (i = 1 \div 6, j = 1 \div 6).$$

Таким образом, значения коэффициентов A_{ij} найдем из следующих равенств:

$$\begin{aligned} &A_{1,k} = f_{1,k}, \quad A_{2,k} = f_{3,k}, \quad k = 1 \div 6, \\ &A_{3,1} = f_{2,3}, \quad A_{3,2} = f_{4,3}, \\ &A_{3,3} = -F_{1,3}, \quad A_{3,4} = -F_{1,4}, \\ &A_{3,5} = \frac{\pi^2}{b^2} f_{1,5} - F_{1,5}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &A_{3,6} = \frac{4\pi^2}{b^2} f_{1,6} - F_{1,6}, \\ &A_{4,1} = f_{2,4}, \quad A_{4,2} = f_{4,4}, \\ &A_{4,3} = -F_{4,1}, \quad A_{4,4} = -F_{2,4}, \\ &A_{4,5} = \frac{\pi^2}{b^2} f_{3,5} - F_{2,5}, \\ &A_{4,6} = \frac{4\pi^2}{b^2} f_{3,6} - F_{2,6}, \\ &A_{5,1} = f_{2,5}, \quad A_{5,2} = f_{4,5}, \\ &A_{5,3} = \frac{\pi^2}{a^2} f_{2,5} - F_{5,1}, \\ &A_{5,4} = \frac{\pi^2}{a^2} f_{4,5} - F_{5,2}, \\ &A_{5,5} = F_{5,5} / \left(\frac{\pi^2}{a^2} + \frac{\pi^2}{b^2} \right), \\ &A_{5,6} = F_{5,6} / \left(\frac{\pi^2}{a^2} + \frac{4\pi^2}{b^2} \right), \\ &A_{6,1} = f_{2,6}, \quad A_{6,2} = f_{4,6}, \\ &A_{6,3} = \frac{4\pi^2}{a^2} f_{2,6} - F_{6,1}, \\ &A_{6,4} = \frac{4\pi^2}{a^2} f_{4,6} - F_{6,2}, \\ &A_{6,5} = F_{6,5} / \left(\frac{4\pi^2}{a^2} + \frac{\pi^2}{b^2} \right), \\ &A_{6,6} = F_{6,6} / \left(\frac{4\pi^2}{a^2} + \frac{4\pi^2}{b^2} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Подставив коэффициенты из равенств (10) в выражение (3), мы будем иметь точное решение задачи.

При задании граничных условий (2) и внутреннего источника (5) должны выполняться следующие условия:

$$\begin{aligned} &f_{1,1} = f_{2,1}, \quad f_{2,2} = f_{3,1}, \\ &f_{3,2} = f_{4,2}, \quad f_{1,2} = f_{4,1}, \\ &F_{3,3} = F_{3,4} = F_{4,3} = F_{4,4} = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} &f_{1,3} = -f_{2,3} - F_{1,1}, \quad f_{1,4} = -f_{4,3} - F_{1,2}, \\ &f_{3,3} = -f_{2,4} - F_{2,1}, \quad f_{3,4} = -f_{4,4} - F_{2,2}. \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned}
 F_{1,3} &= F_{3,1}, & F_{1,4} &= F_{3,2}, \\
 F_{4,1} &= F_{2,3}, & F_{2,4} &= F_{4,2}, \\
 f_{1,5} &= \frac{b^2}{\pi^2} \left(\frac{b^2}{\pi^2} F_{3,5} + F_{1,5} \right), \\
 f_{1,6} &= \frac{b^2}{4\pi^2} \left(\frac{b^2}{4\pi^2} F_{3,6} + F_{1,6} \right), \\
 f_{2,5} &= \frac{a^2}{\pi^2} \left(\frac{a^2}{\pi^2} F_{5,3} + F_{5,1} \right), \\
 f_{2,6} &= \frac{a^2}{4\pi^2} \left(\frac{a^2}{4\pi^2} F_{6,3} + F_{6,1} \right), \\
 f_{3,5} &= \frac{b^2}{\pi^2} \left(\frac{b^2}{\pi^2} F_{4,5} + F_{2,5} \right), \\
 f_{3,6} &= \frac{b^2}{4\pi^2} \left(\frac{b^2}{4\pi^2} F_{4,6} + F_{2,6} \right), \\
 f_{4,5} &= \frac{a^2}{\pi^2} \left(\frac{a^2}{\pi^2} F_{5,4} + F_{5,2} \right), \\
 f_{4,6} &= \frac{a^2}{4\pi^2} \left(\frac{a^2}{4\pi^2} F_{6,4} + F_{6,2} \right).
 \end{aligned} \tag{13}$$

Следовательно, решение (10) имеет место, когда выполнены условия (11) – (13).

Пример построения точных решений и их анализ

Пусть в прямоугольной емкости действует постоянный внутренний источник. Этот вариант внутреннего источника можно получить из выражений (5) и условия (12) при выполнении равенств

$$\begin{aligned}
 F_1(y) &= F_2(y), \\
 F_3(y) &= F_4(y) = \\
 &= F_5(y) = F_6(y) = 0.
 \end{aligned} \tag{14}$$

Условие $F_1(y) = F_2(y)$ в равенствах (14) означает равенство коэффициентов

$$F_{1,1} = F_{1,2} = F_{2,1} = F_{2,2} = Q \tag{15}$$

с одновременным равенством нулю остальных коэффициентов:

$$\begin{aligned}
 F_{1,3} &= F_{1,4} = F_{1,5} = F_{1,6} = \\
 &= F_{2,3} = F_{2,4} = F_{2,5} = F_{2,6} = 0.
 \end{aligned} \tag{16}$$

Таким образом, при выполнении равенств (14) – (16) имеем постоянный внутренний источник

$$F(x, y) = Q. \tag{17}$$

Запишем граничные условия, которые будут выполняться для источника (17). Для этого, с учетом равенств (15) перепишем равенства (12) в виде

$$\begin{aligned}
 f_{1,3} + f_{2,3} + Q &= 0, \\
 f_{1,4} + f_{4,3} + Q &= 0, \\
 f_{2,4} + f_{3,3} + Q &= 0, \\
 f_{4,4} + f_{3,4} + Q &= 0.
 \end{aligned} \tag{18}$$

Пусть в формулах (4) только коэффициенты, входящие в равенства (18), могут быть отличны от нуля. Для этого случая возможны несколько вариантов граничных условий, соответствующих разным комбинациям значений коэффициентов в равенствах (18). Пусть

$$\begin{aligned}
 f_{1,3} = f_{1,4} = f_{2,4} = f_{4,4} &= 0, \\
 f_{2,3} = f_{4,3} = f_{3,3} = f_{3,4} &= -Q.
 \end{aligned} \tag{19}$$

Тогда, если учесть значения коэффициентов из равенств (19), то граничные условия (2) примут вид

$$\begin{aligned}
 C|_{x=0} &= 0, & C|_{x=a} &= -\frac{Q}{2}(y^2 - by), \\
 C|_{y=0} &= C|_{y=b} = -Q \left(\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6a} - \frac{ax}{3} \right).
 \end{aligned} \tag{20}$$

Подставляя в выражения (10) коэффициенты из равенств (16) и (19), получим:

$$A_{2,3} = A_{2,4} = A_{3,1} = A_{3,2} = -Q.$$

После упрощений точное решение уравнения (1), соответствующее условиям (20), с постоянным внутренним источником (17)

принимает вид

$$C(x, y) = -\frac{Q}{2}(y^2 - by)\frac{x}{a} - Q\left(\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6a} - \frac{ax}{3}\right). \quad (21)$$

По формуле (21) можно вычислить концентрацию вещества $C(x, y)$ в любой точке прямоугольной области. Из этой формулы следует, что в углах прямоугольной области $C(x, y) = 0$. Распределение $C(x, y)$ для случая

$$Q = 4, a = 1 \text{ м}, b = 2 \text{ м} \quad (22)$$

представлено на рис. 1,а. Видно, что указанное распределение, рассчитанное по формуле (21), имеет плоскость симметрии, проходящую в сечении $y = b/2$. Наибольшее значение концентрации $C(x, y) = 2$ находится в точке $(a; b/2)$; наименьшее – $C(x, y) = 0$ расположено в углах области и на границе $x = 0$ (это также следует из граничных условий (20)). Максимальная разность концентраций находится между точками кривой, полученной сечением поверхности $C(x, y)$ плоскостью $y = b/2$, и составляет

$$\Delta C(x, y) = C(a; b/2) - C(0; b/2) = 2.$$

Теперь рассмотрим случай, когда наряду с постоянным внутренним источником (17) будут задаваться концентрации вещества в углах области.

Граничные условия запишем так, чтобы выполнялись равенства (19) и чтобы коэффициенты $f_{i,j}$, входящие в условия (11), были не равны нулю. Введем обозначения

$$\begin{aligned} f_{1,1} = f_{2,1} = C_1, f_{2,2} = f_{3,1} = C_3, \\ f_{3,2} = f_{4,2} = C_4, f_{1,2} = f_{4,1} = C_2. \end{aligned} \quad (23)$$

С учетом формул (19) и (23) граничные условия запишем в виде

$$\begin{aligned} C|_{x=0} &= C_1\left(1 - \frac{y}{b}\right) + C_2\frac{y}{b}, \\ C|_{x=a} &= C_3\left(1 - \frac{y}{b}\right) + C_4\frac{y}{b} - \frac{Q}{2}(y^2 - by), \\ C|_{y=0} &= C_1\left(1 - \frac{x}{a}\right) + C_3\frac{x}{a} - Q\left(\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6a} - \frac{ax}{3}\right), \\ C|_{y=b} &= C_2\left(1 - \frac{x}{a}\right) + C_4\frac{x}{a} - Q\left(\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6a} - \frac{ax}{3}\right). \end{aligned} \quad (24)$$

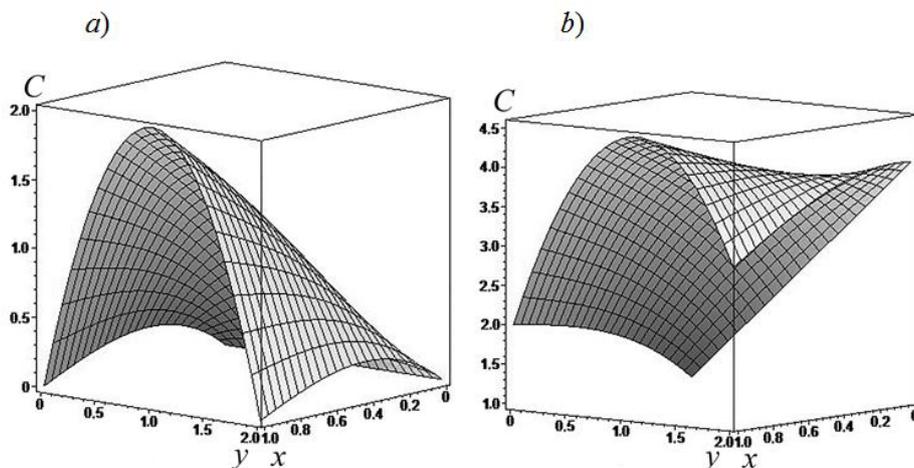


Рис. 1. Распределение концентрации вещества $C(x, y)$, построенное с применением формул (21) (а) и (25) (б)

Используя равенства (19) и (23), по формулам (10) найдем

$$\begin{aligned} A_{1,1} &= C_1, A_{1,2} = C_2, \\ A_{2,1} &= C_3, A_{2,2} = C_4, \\ A_{2,3} &= A_{2,4} = A_{3,1} = A_{3,2} = -Q. \end{aligned}$$

Следовательно, точное решение уравнения диффузии (1) с постоянным внутренним источником (17), соответствующее граничным условиям (24), принимает форму

$$\begin{aligned} C(x, y) &= \left(C_1 \left(1 - \frac{y}{b} \right) + C_2 \frac{y}{b} \right) \left(1 - \frac{x}{a} \right) + \\ &+ \left(C_3 \left(1 - \frac{y}{b} \right) + C_4 \frac{y}{b} \right) \frac{x}{a} - \\ &- \frac{Q}{2} (y^2 - by) \frac{x}{a} - Q \left(\frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6a} - \frac{ax}{3} \right). \end{aligned} \quad (25)$$

Распределение концентрации $C(x, y)$ для частных значений параметров

$$\begin{aligned} Q &= 4, C_1 = 1, C_2 = 4, C_3 = 2, C_4 = 3, \\ a &= 1 \text{ м}, b = 2 \text{ м} \end{aligned} \quad (26)$$

показано на рис. 1, б. Видно, что распределение $C(x, y)$, вычисленное по формуле (25), не имеет плоскостей симметрии. Наибольшее значение концентрации $C(x, y) = 4,5$ находится в точке $(a; b/2)$, а наименьшее, $C(x, y) = 1$, – в точке $(0; 0)$.

Подставляя в решение (25) значения $x = a/2$ и $y = b/2$, вычислим значение концентрации в центре области:

$$\begin{aligned} C\left(\frac{a}{2}, \frac{b}{2}\right) &= \\ &= \frac{C_1 + C_2 + C_3 + C_4}{4} + \frac{Q}{16} (a^2 + b^2). \end{aligned}$$

Вычислим диффузионные потоки вещества по следующим формулам [17]:

$$q_x(x, y) = -D \frac{\partial C(x, y)}{\partial x}, \quad (27)$$

$$q_y(x, y) = -D \frac{\partial C(x, y)}{\partial y}. \quad (27)$$

где D – коэффициент диффузии.

Подставляя в эти формулы точное решение (21), будем иметь:

$$\begin{aligned} q_x(x, y) &= \\ &= DQ \left(\frac{1}{2a} (y^2 - by) + \left(x - \frac{x^2}{2a} - \frac{a}{3} \right) \right), \end{aligned} \quad (28)$$

$$q_y(x, y) = DQ \frac{x}{2a} (2y - b). \quad (29)$$

При подстановке решения (25) в формулы (27) получим:

$$\begin{aligned} q_x(x, y) &= \frac{D}{a} \left(C_1 \left(1 - \frac{y}{b} \right) + C_2 \frac{y}{b} \right) - \\ &- \frac{D}{a} \left(C_3 \left(1 - \frac{y}{b} \right) + C_4 \frac{y}{b} \right) + \\ &+ DQ \left(\frac{1}{2a} (y^2 - by) + \left(x - \frac{x^2}{2a} - \frac{a}{3} \right) \right). \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} q_y(x, y) &= D \left(\frac{C_1}{b} - \frac{C_2}{b} \right) \left(1 - \frac{x}{a} \right) + \\ &+ D \left(\frac{C_3}{b} - \frac{C_4}{b} \right) \frac{x}{a} + DQ \frac{x}{2a} (2y - b). \end{aligned} \quad (31)$$

Диффузионные потоки вещества, показанные на рис. 2, построены по формулам (28) и (29) при использовании данных (22). Коэффициент диффузии в расчетах был равен $D = 4 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$.

Приведенные данные на рис. 2 позволяют заключить, что при диффузии под действием только внутреннего источника Q диффузионный поток вещества $q_x(x, y)$ имеет такую же плоскость симметрии, как и соответствующее ему распределение концентрации $C(x, y)$; т. е. плоскость симметрии проходит в сечении $y = b/2$.

При отношении $b/a = 1 - 4$ виды распределения концентрации вещества $C(x, y)$ и

диффузионного потока $q_x(x, y)$ в прямоугольной области качественно будут похожи на распределения, приведенные на рис. 1 и 2. Если длина какой-либо из сторон (a или b) прямоугольника будет больше другой в десять и более раз, то такая разница приведет к качественному изменению распределений концентрации вещества $C(x, y)$ и диффузионного потока $q_x(x, y)$, по сравнению с распределениями, приведенными на рис. 1 и 2, *a*.

Например, если в данных (26) изменить только значение переменной y с двух до десяти метров, то графики $C(x, y)$ и $q_x(x, y)$, построенные по формулам (25) и (28), будут иметь вид, показанный на рис. 3.

Если же в данных (26) изменить только значение переменной x (например, взять десять метров вместо одного), то распределения $C(x, y)$ и $q_x(x, y)$, построенные по формулам (25) и (28), примут вид, показанный на рис. 4.

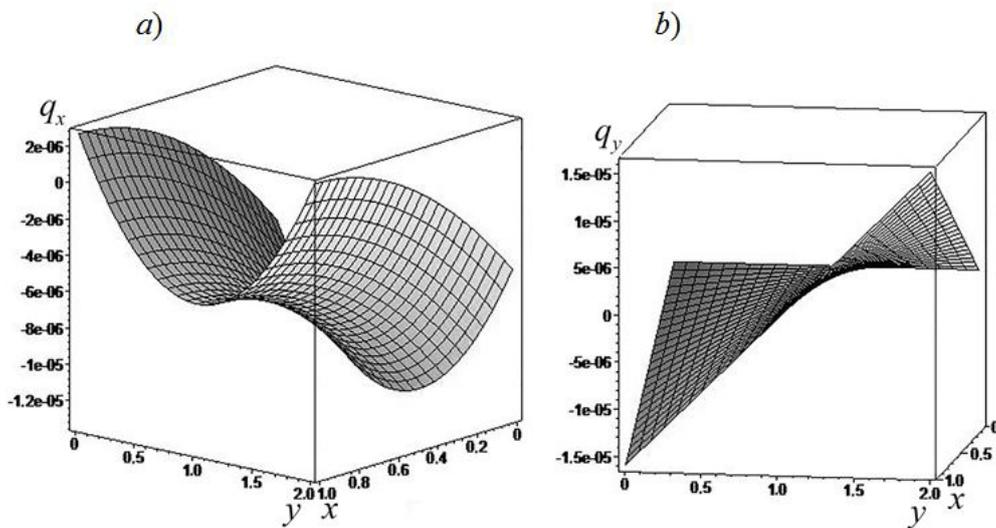


Рис. 2. Графическое представление диффузионных потоков вещества $q(x, y)$, построенное по формулам (28) (*a*) и (29) (*b*); $D = 4 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$

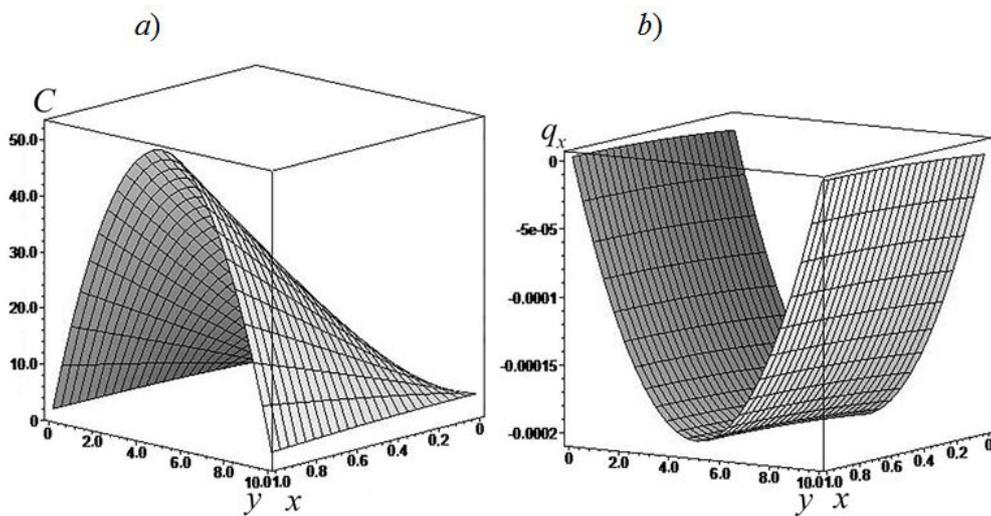


Рис. 3. Распределения концентрации вещества $C(x, y)$ (*a*) и диффузионных потоков вещества $q(x, y)$ (*b*) при значении $b/a = 10$

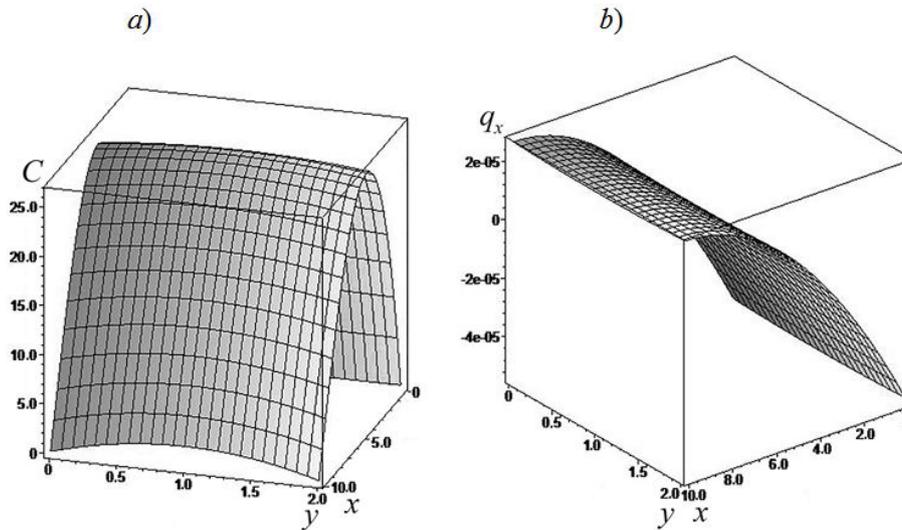


Рис. 4. Распределения концентрации вещества $C(x, y)$ (a) и диффузионных потоков вещества $q(x, y)$ (b) при значении $b/a = 1/5$

На рис. 3,a и 4,a видно, что концентрации вещества в углах области малы, по сравнению с максимальной концентрацией, и теперь вид распределения $C(x, y)$, построенного по формуле (24) (см. рис. 3,a), качественно сходен с видом распределения $C(x, y)$, построенного по формуле (21) (см. рис. 1,a).

Анализ данных, представленных на рис. 2, 3,b и 4,b, позволяет сделать вывод, что представляет интерес исследование перепада диффузионных потоков вдоль координатных осей. На рис. 2,a видно, что перепад потока между границами $x = 0$ и $x = a$ в любых сечениях

$$y = \text{const} \quad (0 \leq y \leq b),$$

то есть постоянная величина; она определяется по формуле

$$\Delta q_x = q_x(0, y) \Big|_{y=\text{const}} - q_x(a, y) \Big|_{y=\text{const}} = -\frac{DQa}{2}. \quad (32)$$

На рис. 2,b видно, что наибольшее значение диффузионный поток $q_y(x, y)$ принимает в сечении $x = a$. Перепад потока $q_y(x, y)$ при $x = a$ между границами $y = 0$ и $y = b$ определим по формуле

$$\Delta q_y = q_y(a, 0) - q_y(a, b) = -DQb. \quad (33)$$

Равенства (32) и (33) справедливы как для симметричных диффузионных потоков $q_x(x, y)$, $q_y(x, y)$, рассчитанных по формулам (28) и (29), так и для несимметричных, рассчитанных по формулам (30), (31). Таким образом, из равенств (32) и (33) следует, что на перепады Δq_x и Δq_y несимметричных потоков $q_x(x, y)$ и $q_y(x, y)$ влияет постоянный внутренний источник, но не влияют концентрации вещества в углах области.

Заключение

Приведенные примеры показывают, что метод быстрых разложений позволяет получать не только приближенные решения [18 – 20], но и точные. С помощью аналитического решения уравнения диффузии, найденного в данной статье, можно получать его точные решения для различных граничных условий, причем не только для постоянного внутреннего источника, но и для переменного. Подбор коэффициентов граничных условий (2) и внутреннего источника (5) следует вести с учетом формул (11) – (13).

Из анализа полученных точных решений следует, что при равенстве нулю concentra-

ций вещества в углах прямоугольной области распределения концентрации $C(x, y)$ и диффузионных потоков вещества $q_x(x, y)$, $q_y(x, y)$ будут симметричны относительно

плоскости $y = b/2$. Если же концентрации в углах не равны нулю, то распределения $C(x, y)$, $q_x(x, y)$, $q_y(x, y)$ не обладают подобной симметрией.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Беляев В.А., Шапеев В.П.** Решение задачи Дирихле для уравнения Пуассона методом коллокации и наименьших квадратов в области с дискретно заданной границей // Вычислительные технологии. 2018. Т. 23. № 3. С. 15–30.
2. **Сыромятников П.В.** Матричный метод решения нестационарных задач конвекции-диффузии в полуограниченных многослойных и градиентных средах // Наука Юга России. 2018. Т. 14. № 4. С. 3–13.
3. **Журавлев В.М.** Принцип суперпозиции и точные решения уравнения нелинейной диффузии // Теоретическая и математическая физика. 2015. Т. 183. № 1. С. 36–50.
4. **Деревич И.В.** Спектральная модель диффузии тяжелой инерционной примеси в случайном поле скорости сплошной среды // Теплофизика и аэромеханика. 2015. Т. 22. № 2. С. 151–170.
5. **Гадиева С.С., Гарахманов П.Ф.** Применение методов конечных разностей для решение модельных уравнений тепломассопереноса // Вестник Дагестанского государственного университета. Серия 1: Естественные науки. 2017. Т. 32. № 4. С. 38–46.
6. **Поляков С.В.** Экспоненциальные разностные схемы с двойным интегральным преобразованием для решения уравнений конвекции-диффузии // Математическое моделирование. 2012. Т. 24. № 12. С. 29–32.
7. **Аввакумов А.В., Вабищевич П.Н., Васильев А.О., Стрижов В.Ф.** Численное моделирование нестационарных задач диффузии нейтронов // Математическое моделирование. 2017. Т. 29. № 7. С. 44–62.
8. **Арутюнян Р.В.** Моделирование стохастических процессов фильтрации в решетчатых системах // Математическое моделирование и численные методы. 2017. № 4 (16). С. 17–30.
9. **Zhong H., He Y.** Solution of Poisson and Laplace equations by quadrilateral quadrature element // International Journal of Solids and Structures. 1998. Vol. 35. No. 21. Pp. 2805–2819.
10. **El-Sherbeny A.M., El-Hassani R.M.I., El-Badry H., Abdallah M.I.** Solving 2D-Poisson equation using modified cubic B-spline differential quadrature method // Ain Shams Engineering Journal. 2018. Vol. 9. No. 4. Pp. 2879–2885.
11. **Ghasemi M.** Spline-based DQM for multi-dimensional PDEs: Application to biharmonic and Poisson equations in 2D and 3D // Computers & Mathematics with Applications. 2017. Vol. 73. No. 7. Pp. 1576–1592.
12. **Shi Z., Cao Y.-y., Chen Q.-j.** Solving 2D and 3D Poisson equations and biharmonic equations by the Haar wavelet method // Applied Mathematical Modelling. 2012. Vol. 36. No. 11. Pp. 5143–5161.
13. **Zhi S., Cao Y.-y.** A spectral collocation method based on Haar wavelets for Poisson equations and biharmonic equations // Mathematical and Computer Modelling. 2011. Vol. 54. No. 11–12. Pp. 2858–2868.
14. **Чернышов А.Д.** Метод быстрых разложений для решения нелинейных дифференциальных уравнений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2014. Т. 54. № 1. С. 13–24.
15. **Чернышов А.Д., Горяйнов В.В.** О выборе оптимального порядка граничной функции в быстром разложении // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии. 2011. № 1. С. 60–65.
16. **Чернышов А.Д., Горяйнов В.В., Лешонков О.В., Соболева Е.А., Никифорова О.Ю.** Сравнение скорости сходимости быстрых разложений с разложениями в классический ряд Фурье // Вестник Воронежского государственного



ного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии. 2019. № 1. С. 27–34.

17. **Франк-Каменецкий Д.А.** Диффузия и теплопередача в химической кинетике: М.: Наука, 1987. 502 с.

18. **Чернышов А.Д., Горяйнов В.В., Марченко А.Н.** Исследование температурных полей в прямоугольной пластине с внутренним источником, зависящим от температуры, при помощи быстрых разложений // Теплофизика и аэромеханика. 2016. Т. 23. № 2. С. 247–256.

19. **Чернышов А.Д., Попов В.М., Горяйнов В.В., Лешонков О.В.** Исследование контактного термического сопротивления в конечном цилиндре с внутренним источником методом быстрых разложений и проблема согласования граничных условий // Инженерно-физический журнал. 2017. Т. 90. № 5. С. 1288–1297.

20. **Chernyshov A.D., Goryainov V.V., Danshin A.A.** Analysis of the stress field in a wedge using the fast expansions with pointwise determined coefficients // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series. 2018. Vol. 973. P. 012002.

Статья поступила в редакцию 30.12.2019, принята к публикации 02.07.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЧЕРНЫШОВ Александр Данилович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры высшей математики и информационных технологий Воронежского государственного университета инженерных технологий, г. Воронеж, Российская Федерация.

394000, Российская Федерация, г. Воронеж, пр. Революции, 19
chernyshovad@mail.ru

САЙКО Дмитрий Сергеевич — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой высшей математики и информационных технологий Воронежского государственного университета инженерных технологий, г. Воронеж, Российская Федерация.

394000, Российская Федерация, г. Воронеж, пр. Революции, 19
dmsajko@mail.ru

ГОРЯЙНОВ Виталий Валерьевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики и механики Воронежского государственного технического университета, г. Воронеж, Российская Федерация.

394006, Российская Федерация, г. Воронеж, ул. 20-летия Октября, 84
gorvit77@mail.ru

КУЗНЕЦОВ Сергей Федорович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики и информационных технологий Воронежского государственного университета инженерных технологий, г. Воронеж, Российская Федерация.

394000, Российская Федерация, г. Воронеж, пр. Революции, 19
sfs134@mail.ru

НИКИФОРОВА Ольга Юрьевна — старший преподаватель кафедры высшей математики и информационных технологий Воронежского государственного университета инженерных технологий, г. Воронеж, Российская Федерация.

394000, Российская Федерация, г. Воронеж, пр. Революции, 19
niki22@mail.ru

REFERENCES

1. **Belyaev V.A., Shapeev V.P.**, Solving the Dirichlet problem for the Poisson equation by the least squares collocation method with given discrete boundary domain, *Computational Technologies*. 23 (3) (2018) 15–30. (in Russian)
2. **Syromyatnikov P.V.**, A matrix method for solving non-stationary convection-diffusion problems in semibounded multilayer and gradient mediascience in the South of Russia, *Science in the South of Russia*. 14 (4) (2018) 3–13 (in Russian).
3. **Zhuravlev V.M.**, Superposition principle and exact solutions of a nonlinear diffusion equation, *Theoretical and Mathematical Physics*. 183 (1) (2015) 478–490.
4. **Derevich I.V.**, Spectral diffusion model of heavy inertial particles in a random velocity field of the continuous medium, *Thermophysics and Aeromechanics*. 22 (2) (2015) 143–162.
5. **Gadieva S.S., Gahramanov P.F.**, Application of methods of finite differences for solving model equations of thermal association, *Herald of Dagestan State University, Ser. Natural Sciences*. 32 (4) (2017) 38–46 (in Russian).
6. **Polyakov S.V.**, Exponential difference schemes with double integral transformation for solving convection-diffusion equations, *Mathematical Models and Computer Simulations*. 5 (4) (2013) 338–3402.
7. **Avvakumov A.V., Vabishchevich P.N., Vasilev A.O., Strizhev V.F.**, Numerical modeling of neutron diffusion non-stationary problems, *Matem. Mod.* 29 (7) (2017) 44–62 (in Russian).
8. **Arutyunyan R.V.**, Modeling of stochastic filtration processes in lattice systems, *Matematicheskoe Modelirovanie i Chislennyye Metody*. 4 (16) (2017) 17–30 (in Russian).
9. **Zhong H., He Y.**, Solution of Poisson and Laplace equations by quadrilateral quadrature element, *International Journal of Solids and Structures*. 35 (21) (1998) 2805–2819.
10. **El-Sherbeny A.M., El-Hassani R.M.I., El-Badry H., Abdallah M.I.**, Solving 2D-Poisson equation using modified cubic B-spline differential quadrature method, *Ain Shams Engineering Journal*. 9(4) (2018) 2879–2885.
11. **Ghasemi M.**, Spline-based DQM for multi-dimensional PDEs: Application to biharmonic and Poisson equations in 2D and 3D, *Computers & Mathematics with Applications*. 73 (7) (2017) 1576–1592.
12. **Shi Z., Cao Y.-y., Chen Q.-j.**, Solving 2D and 3D Poisson equations and biharmonic equations by the Haar wavelet method, *Applied Mathematical Modelling*. 36 (11) (2012) 5143–5161.
13. **Zhi S., Cao Y.-y.**, A spectral collocation method based on Haar wavelets for Poisson equations and biharmonic equations, *Mathematical and Computer Modelling*. 54 (11–12) (2011) 2858–2868.
14. **Chernyshov A.D.**, Method of fast expansions for solving nonlinear differential equations, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 54 (1) (2014) 11–21.
15. **Chernyshov A.D., Gorjajnov V.V.**, About a choice of an optimum order of boundary function in rapid expansion, *Proceedings of Voronezh State University, Series: Systems Analysis and Information Technologies*. (1) (2011) 60–65. (in Russian)
16. **Chernyshov A.D., Goryainov V.V., Leshonkov O.V., et al.**, Comparison of the rate of convergence of fast expansions with expansions in the classical Fourier series, *Proceedings of Voronezh State University, Series: Systems Analysis and Information Technologies*. (1) (2019) 27–34. (in Russian)
17. **Frank-Kamenetskii D.A.**, Diffusion and heat exchange in chemical kinetics, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 2015.
18. **Chernyshov A.D., Goryaynov V.V., Marchenko A.N.**, Study of temperature fields in a rectangular plate with a temperature-dependent internal source with the aid of fast expansions, *Thermophysics and Aeromechanics*. 23 (2) (2016) 237–245.
19. **Chernyshov A.D., Popov V.M., Goryainov V.V., Leshonkov O.V.**, Investigation of contact thermal resistance in a finite cylinder with an internal source by the fast expansion method and the problem of consistency of boundary, *Engineering Physics and Thermophysics*. 90 (5) (2017) 1288–1297.

20. **Chernyshov A.D., Goryainov V.V., Dan-shin A.A.**, Analysis of the stress field in a wedge using the fast expansions with pointwise determined coefficients, IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series. 973 (2018) 012002.

Received 30.12.2019, accepted 02.07.2020.

THE AUTHORS

CHERNYSHOV Alexander D.

Voronezh State University of Engineering Technology
19 Revolutsii Pr., Voronezh, 394000, Russian Federation
chernyshovad@mail.ru

SAJKO Dmitrij S.

Voronezh State University of Engineering Technology
19 Revolutsii Pr., Voronezh, 394000, Russian Federation
dmsajko@mail.ru

GORYAINOV Vitalij V.

Voronezh State Technical University
84, 20 let Oktyabrya St., Voronezh, 394006, Russian Federation
gorvit77@mail.ru

KUZNETSOV Sergei F.

Voronezh State University of Engineering Technology
19 Revolutsii Pr., Voronezh, 394000, Russian Federation
sfs134@mail.ru

NIKIFOROVA Olga Yu.

Voronezh State University of Engineering Technology
19 Revolutsii Pr., Voronezh, 394000, Russian Federation
niki22@mail.ru

DOI: 10.18721/JPM.13305
УДК 532.517

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЦИРКУЛЯЦИИ ВОЗДУХА В ПОМЕЩЕНИИ ПРИ ПОДАЧЕ ИЗ ПЛОСКОЙ ЩЕЛИ. I. Отработка применения вихререзающего подхода с использованием периодической постановки

М.А. Засимова¹, Н.Г. Иванов¹, Д. Марков²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Софийский технический университет, София, Болгария

Представлены методика и результаты численного моделирования турбулентного течения воздуха в тестовом помещении на основе вихререзающего подхода – метода моделирования крупных вихрей с пристенным моделированием. Вентиляция помещения осуществляется плоской воздушной струей, подаваемой из расположенного под потолком на торцевой стенке щелевого отверстия, при значении числа Рейнольдса $Re = 5233$. Геометрия помещения и параметры течения соответствуют классическому тестовому эксперименту (Nielsen et al., 1978), однако задача ставилась как периодическая, что справедливо для помещения, сильно вытянутого в поперечном направлении. Расчеты в программном пакете ANSYS Fluent выполнены с использованием весьма подробных сеток размерностью до $6 \cdot 10^7$ ячеек. Подробно описаны результаты методических расчетов, направленных на оценку адекватности выполненного численного моделирования, в частности проведен анализ сеточной зависимости и дана оценка колмогоровского масштаба для рассматриваемого течения.

Ключевые слова: турбулентное течение, плоская струя, метод моделирования крупных вихрей, вентиляция

Ссылка при цитировании: Засимова М.А., Иванов Н.Г., Марков Д. Численное моделирование циркуляции воздуха в помещении при подаче из плоской щели. I. Отработка применения вихререзающего подхода с использованием периодической постановки // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 56–74. DOI: 10.18721/JPM.13305

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

NUMERICAL MODELING OF AIR DISTRIBUTION IN A TEST ROOM WITH 2D SIDEWALL JET. I. Foundations for eddy resolving approach application based on periodical formulation

M.A. Zasimova¹, N.G. Ivanov¹, D. Markov²

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

² Technical University of Sofia, Sofia, Bulgaria

The paper presents the methods and results of numerical modeling of turbulent airflow in a test room based on the vortex-resolving wall-modeled large eddy simulation approach. The room ventilation is provided by a plain air jet at $Re = 5233$. The jet is supplied from a slit placed at a side wall under the ceiling. The room geometry and airflow parameters correspond to the experimental benchmark test by Nielsen et al. (1978), but with the periodicity boundary conditions in the transverse direction. Calculations were carried out with the ANSYS Fluent software using fine grids consisting of up to $6 \cdot 10^7$ cells. The paper presents detailed analysis of parametric computations aimed at the evaluation of numerical

simulation adequacy. In particular, the grid dependency study was performed and the Kolmogorov scale was estimated.

Keywords: turbulent airflow, plain jet, Large Eddy Simulation, ventilation

Citation: Zasimova M.A., Ivanov N.G., Markov D., Numerical modeling of air distribution in a test room with 2D sidewall jet. I. Foundations for eddy resolving approach application based on periodical formulation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 56–74. DOI: 10.18721/JPM.13305

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

Введение

Одна из задач, решаемых при проектировании и модернизации зданий – это организация систем отопления, вентиляции и кондиционирования (ОВК) воздуха, которые устанавливаются для обеспечения микроклимата помещений. Комфорт и безопасность в обитаемых помещениях обеспечивается поддержанием параметров воздушной среды (скорости движения воздуха, его температуры, концентрации содержащихся в нем вредных примесей и др.) в требуемом диапазоне, что во многом определяется схемой воздухообмена, заложенной в основу системы вентиляции. Все большую актуальность при этом приобретает повышение точности оценки состояния воздушной среды, обеспечиваемого разрабатываемой системой вентиляции.

В последние годы при проектировании вентиляционных систем все чаще используются методы вычислительной гидродинамики, позволяющие проводить трехмерное моделирование турбулентных струйных течений. В инженерной практике стали широко применяться подходы, дающие оценку параметров течения на основе численного решения осредненных по Рейнольдсу стационарных или нестационарных уравнений Навье – Стокса (*англ.* RANS/URANS: Steady/Unsteady Reynolds Averaged Navier – Stokes). RANS/URANS-подходы применялись, например, при проектировании и/или модернизации систем вентиляции плавательного бассейна [1], ледовой арены [2], университетской аудитории, представляющей историческую и архитектурную цен-

ность [3], интерьера Исаакиевского собора в Санкт-Петербурге [4].

При разработке систем жизнеобеспечения и поддержания комфорта применение методов вычислительной гидродинамики оказывается еще более важным, чем при проектировании систем вентиляции зданий, так как в этом случае практически каждый раз предлагаемое решение является уникальным. Пример решения таких задач – расчет вентиляции кабин пилотов и салонов пассажирских самолетов [5, 6]. На протяжении двух последних десятилетий с помощью RANS/URANS-подходов проводится оценка работоспособности и эффективности систем жизнеобеспечения космических аппаратов. В частности, проведены расчеты состояния атмосферы Международной космической станции (МКС) в штатных условиях [7], а также после применения углекислотного огнетушителя в американском сегменте МКС [8].

Несмотря на примеры успешного решения прикладных вентиляционных задач, вопрос о точности результатов, полученных с применением RANS/URANS-подходов при расчете воздухораспределения в помещениях, остается открытым. Оценка степени неопределенности результатов RANS/URANS-расчетов может осуществляться либо при непосредственном сравнении получаемых в расчетах результатов с данными физического эксперимента, либо с помощью сравнения RANS/URANS-результатов с данными, полученными с использованием более точных вихререзающих подходов к описанию турбулентных течений.

В качестве вихреразрешающего подхода можно применить метод прямого численного моделирования (*англ.* DNS: Direct Numerical Simulation), основанный на первых принципах. При использовании DNS-подхода решаются полные уравнения Навье – Стокса, что при правильном применении метода позволяет описать все масштабы турбулентности. Как известно, DNS-подход требует колоссальных вычислительных затрат и его применение ограничено весьма умеренными значениями числа Рейнольдса. Альтернативой, позволяющей проводить численные исследования с использованием обозримых вычислительных затрат, служит метод моделирования крупных вихрей (*англ.* LES: Large Eddy Simulation). При использовании LES-подхода решаются отфильтрованные уравнения Навье – Стокса, что позволяет описывать поведение крупных вихрей при полуэмпирическом моделировании вихрей малых масштабов. Метод LES в настоящее время не только позволяет проводить фундаментальные исследования, в том числе направленные на оценку точности RANS-моделирования, но и начинает применяться при решении прикладных задач [9], в том числе при моделировании вентиляционных течений, характеризующихся относительно умеренными значениями числа Рейнольдса, а также, в большинстве случаев, не слишком высокими требованиями к пристенному разрешению.

В литературе представлены работы, в которых моделирование систем ОВК осуществлялось при помощи подхода LES. Впервые моделирование воздухообмена LES-подходом представлено в работе [10], где рассматривалась вентиляция в тестовом помещении простой формы, для которого имеются экспериментальные данные [11]. Результаты решения более сложной задачи о течении в относительно загроможденном помещении, снабженном системой вытесняющей вентиляции, представлены в статье [12]. В работе [13] представлены оценки воздухораспределения, проведенные с помощью LES, во входящем в состав МКС орбитальном моду-

ле “Columbus”, снабженном многоструйной системой вентиляции; при этом результаты расчетов также сопоставлялись с экспериментальными данными. Позднее с помощью подхода LES проведено определение параметров воздухообмена в аудиторном зале университета [14] и в помещениях жилого дома [15].

Практическое применение подхода LES нуждается в отработке на основе решения тестовых задач. Настоящая работа посвящена описанию и отработке методики применения подхода LES с пристенным моделированием (*англ.* WMLES: Wall Modeled LES). В качестве объекта исследования выбрана известная тестовая задача о вентиляционном течении в помещении при подаче плоской воздушной струи из щелевого отверстия, расположенного под потолком [11]. Для этого теста имеются подробные экспериментальные данные по профилям компонент скорости и их пульсаций, измеренных с помощью лазерной доплеровской анемометрии (*англ.* LDA: Laser Doppler Anemometry). Тестовое помещение [11] представляло собой прямоугольный параллелепипед квадратного поперечного сечения, однако в настоящей работе ставится трехмерная задача с постановкой условий периодичности в поперечном направлении, то есть из рассмотрения исключаются боковые стенки.

Данная постановка позволяет правильно воспроизвести структуру течения лишь в центральной части помещения, не затрагивая особенностей трехмерной структуры вторичных течений. Но явное преимущество такой «квазидвумерной» упрощенной постановки состояло в том, что она дала возможность провести серию параметрических расчетов с существенной оптимизацией вычислительных затрат.

В настоящей работе излагаются результаты систематических методических расчетов и выработанные на их основе рекомендации по применению метода WMLES.

Эффект боковых стенок рассматривается во второй части настоящего исследования, публикуемой в отдельной статье [16],

где проводится детальное сопоставление с экспериментальными данными результатов расчетов в полной постановке, без предположения о периодичности течения [11].

Постановка задачи

Геометрия помещения. Рассматривается течение воздуха в области прямоугольной формы (рис. 1). Система координат выбрана таким образом, что x – продольное направление, y – вертикальное, а z – поперечное. Начало системы координат расположено в углу помещения. Высота помещения, принятая за масштаб длины, равна $H = 3$ м. Длина помещения составляет $L = 9$ м, так что $L/H = 3$. Помещение предполагается безграничным в поперечном z -направлении, при этом вычисления проводятся для трех значений ширины W расчетной области, так что W/H принимается равным $1/6$, $1/3$ и 1 . Воздух подается в помещение через входное щелевое отверстие высотой $h_{in} = 0,056H = 0,168$ м и шириной W ; это отверстие расположено непосредственно под потолком на одной из торцевых стенок. Выходное щелевое отвер-

стие, находящееся вблизи пола на противоположной стенке, имеет высоту $h_{out} = 0,16H = 0,48$ м и ширину W . К отверстию примыкает канал длиной $0,5H$, включенный в расчетную область, для того чтобы предотвратить формирование возвратных токов на выходной границе области.

Физические параметры среды и граничные условия. Рассматривается изотермическое движение воздуха, описываемого моделью несжимаемой жидкости с постоянными физическими свойствами: плотность $\rho = 1,23$ кг/м³, динамическая вязкость $\mu = 1,79 \cdot 10^{-5}$ Па·с.

На вход в помещение подается воздух со среднерасходной скоростью, равной $V_{in} = 0,455$ м/с. Число Рейнольдса, построенное по высоте входной щели, составляет $Re = \rho h_{in} V_{in} / \mu = 5233$. Для задания граничных условий на входе предварительно, также на основе метода WMLES, была решена вспомогательная задача о течении воздуха в плоском канале высотой h_{in} , поперечные размеры расчетной области при этом соответствуют выбранному значению W/H . В качестве

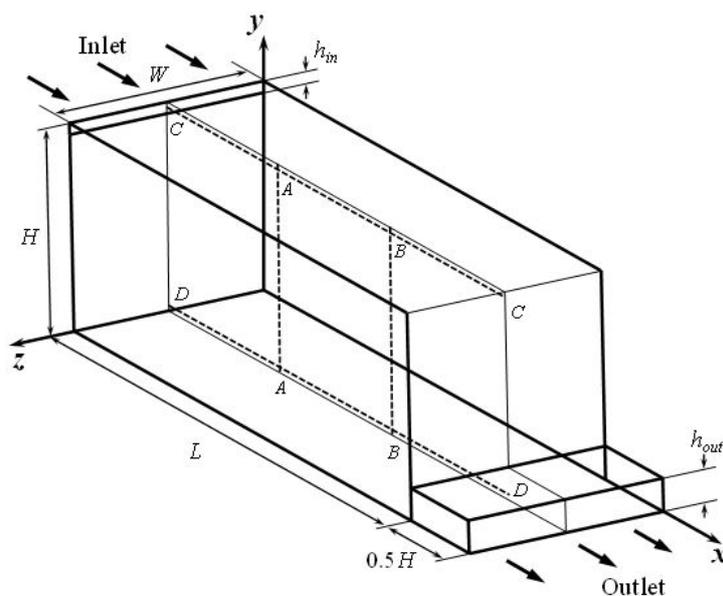


Рис. 1. Геометрия расчетной области для отношения ширины помещения к его высоте $W/H = 1$

профилей скорости на входе в помещение использовались распределения скорости в сечении $x/h_{in} = 18$ от входа в канал (на входе в канал задавался однородный профиль), извлеченные из осредненного во времени решения. Для варианта с поперечным размером $W/H = 1/6$ дополнительно проводились расчеты с заданием на входе в помещение однородного профиля скорости, а также входного профиля, извлеченного из решения задачи о течении в канале в сечении $x/h_{in} = 60$.

На боковых границах по z -направлению задавались периодические граничные условия. На выходной границе задавались мягкие граничные условия. Остальные границы расчетной области – твердые стенки, на которых задавались условия прилипания.

Моделирование турбулентности. Моделирование турбулентного течения воздуха осуществлялось на основе вихреразрешающего подхода WMLES, который базируется на решении отфильтрованных уравнений Навье – Стокса (см., например, статью [9]). Актуальные переменные f при этом заменяются на сумму отфильтрованных и подсеточных переменных:

$$f = \tilde{f} + f'.$$

Величина \tilde{f} определяется выражением

$$\tilde{f}(x, t) = \int_{vol} G(x - x', \Delta) f(x', t) dx'^3, \quad (1)$$

где $G(x - x', \Delta)$ – функция фильтра (фильтрующая функция), которая определяет размер и структуру мелкомасштабной турбулентности (например, коробчатый фильтр); x – координата рассматриваемой точки, Δ – характерный размер фильтра (ширина фильтра).

Вихри, размер которых меньше, чем ширина фильтра, не разрешаются.

Для несжимаемой жидкости с постоянными физическими свойствами отфильтрованные уравнения Навье – Стокса можно записать в следующем виде:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{V} = 0; \\ \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) = \\ = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot p + 2\nu(\nabla \cdot \underline{S}) - \nabla \cdot \underline{\tau}^{SGS}, \end{cases} \quad (2)$$

где \mathbf{V} – вектор скорости с компонентами (V_x, V_y, V_z) ; \underline{S} – тензор скоростей деформации, $\underline{\tau}^{SGS}$ – слагаемое, полученное в результате пространственной фильтрации уравнений.

Для определения подсеточных напряжений используется обобщенная гипотеза Буссинеска:

$$\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = -2\nu_{SGS} S_{ij}, \quad (3)$$

где ν_{SGS} , m^2/c – подсеточная турбулентная вязкость, подлежащая определению с помощью той или иной подсеточной модели.

Классическая подсеточная модель – алгебраическая модель Смагоринского, предложенная еще в 1963 году [17]. В этой модели, на основании анализа размерностей, подсеточная вязкость выражается через размер фильтра и модуль тензора скоростей деформации:

$$\nu_{SGS} = (C_S \Delta)^2 S,$$

где $C_S = 0,2$ – эмпирическая константа Смагоринского.

Роль фильтра при практической реализации LES-подхода играет расчетная сетка, при этом величина Δ обычно определяется как кубический корень из объема ячейки сетки.

В настоящих расчетах использовался подход WMLES S-Omega, практическая реализация которого базируется на информации, приведенной в статье [18]. По сравнению с классической моделью Смагоринского, для определения подсеточной вязкости здесь используется модифицированный подсеточный линейный масштаб и демпфирующий

множитель (аналогичный множителю Ван Дрифта в модели Прандтля для RANS-подхода), а вместо модуля тензора скоростей деформаций S используется разность $|S - \Omega|$:

$$v_{SGS} = \min \left\{ (\kappa d_w)^2, (C_s \Delta)^2 \right\} |S - \Omega| \times \left(1 - \exp \left\{ \left(-y^+ / 25 \right)^3 \right\} \right), \quad (4)$$

где $C_s = 0,2$ – эмпирическая константа Смагоринского; S , c^{-1} , Ω , c^{-1} , – модули тензоров скоростей деформации и завихренности

$$S = (2S_{ij}S_{ij})^{0,5}, \quad \Omega = (2\Omega_{ij}\Omega_{ij})^{0,5};$$

$\kappa = 0,41$ – постоянная Кармана; d_w , м, – расстояние до ближайшей стенки, y^+ – нормированное расстояние от центра первой пристенной ячейки до стенки ($y^+ = d_w u_\tau / \nu$, при этом $u_\tau = (\tau_w / \rho)^{0,5}$, м/с, – динамическая скорость, τ_w , Па, – касательное напряжение на стенке).

Размер фильтра Δ , входящий в выражение (4), которое дает определение подсеточного линейного масштаба, определяется по формуле

$$\Delta = \min \left\{ \max (C_w d_w, C_w \Delta_{\max}, \Delta_{wn}), \Delta_{\max} \right\}, \quad (5)$$

где Δ_{\max} , м, – максимальный размер ячейки сетки (для ортогонального шестигранника он определяется как максимальная длина ребра); Δ_{wn} , м, – шаг сетки по направлению нормали к стенке; $C_w = 0,15$ – эмпирическая константа.

Поскольку из решения вспомогательной задачи о течении воздуха в плоском канале для задания входных граничных условий извлекались лишь осредненные величины, для определения актуальных пульсационных характеристик (турбулентного контента) во входном сечении использовался один из доступных генераторов синтетической турбулентности – метод вихрей (Vortex Method) [19]. При активации генератора синтетической турбулентности требуется

определить интенсивность турбулентности на входной границе. В настоящих расчетах было задано значение $I = 4\%$.

Вычислительные аспекты задачи. Численное моделирование проводилось в гидродинамическом коде общего назначения ANSYS Fluent 16.2*, в котором дискретизация определяющих уравнений осуществляется по методу конечных объемов. Использовались параметры вычислительного алгоритма, обеспечивающие дискретизацию по пространству и времени со вторым порядком точности. При аппроксимации конвективных слагаемых в уравнении движения использовалась центральная схема (опция “Central Differencing” в пакете ANSYS Fluent).

Использовался безытерационный алгоритм, который отвечает продвижению во времени по методу дробных шагов (опция NITA: Non-Iterative Time-Advancement). Шаг по времени Δt , равный 0,006 с, выбран так, чтобы максимальное значение числа Куранта на самой подробной сетке во всех ячейках расчетной области было меньше единицы. Расчеты показали, что увеличение временного шага с 0,006 до 0,010 с не влияет на осредненные характеристики течения, однако в тех вариантах, когда локальное число Куранта оказывается большим единицы, приходилось отказываться от использования опции NITA. Дело в том, что обеспечить эволюцию решения во времени по методу дробных шагов оказывалось невозможным, невязки начинали неограниченно расти. Для контроля за развитием нестационарного течения в расчетной области были специально размещены точки мониторинга, которые позволяли определять переход к статистически установившемуся режиму течения.

В расчетах использовались квазиструктурированные равномерные сетки без сгущения с одинаковыми кубическими ячейками, построенными в сеточном генераторе ICEM CFD. Число ячеек варьировалось в диапазоне от 3 до 58 млн. Данные о сетках, использованных в расчетах, приведены в табл. 1.

* ANSYS Inc. ANSYS Fluent 16.2 User's Guide, 2015.

Т а б л и ц а 1

Значения параметров использованных расчетных сеток

Параметр	Обозначение	Значение параметра для сетки					
		1-й	2-й	3-й	4-й	5-й	6-й
Относительная протяженность расчетной области вдоль оси z	W/H	1/6				1/3	1
Число разбиений вдоль координатной оси	N_x	536	751	1070	1446	1070	751
	N_y	179	252	354	482	354	252
	N_z	30	43	59	80	119	250
Общее число ячеек (округленно), млн.	$N_x \times N_y \times N_z$	3	8	23	58	46	48
Размер ячейки, мм $\times 10^3$	Δ	16,8	12,0	8,4	6,2	8,4	12,0
	Δ/H	5,6	4,0	2,8	2,1	2,8	4,0

Основная серия расчетов для исследования сеточной зависимости решения была выполнена с использованием самой узкой области с $W/H = 1/6$. Наиболее грубая (исходная) сетка состояла из 3 млн. ячеек, при этом размер каждой кубической ячейки был равен $\Delta = 16,8$ мм. Построение более подробных сеток осуществлялось путем постепенного увеличения размерности исходной сетки в $\sqrt{2}$, 2 и $2\sqrt{2}$ раза по каждому направлению. Таким образом, общее количество ячеек для четырех последовательно измельченных сеток составило 3, 8, 23 и 58 млн. ячеек (см. табл. 1, с 1-й по 4-ю сетки).

Для исходной сетки общей размерностью 3 млн. ячеек нормированное расстояние y^+ от центра первой пристенной ячейки до стенки в среднем не превышает единицы, при этом максимальные значения, расположенные вблизи входной щели, достигают $y^+ = 20$.

Расчеты проводились с использованием ресурсов суперкомпьютерного центра «Политехнический» (<http://scc.spbstu.ru>). Задачи запускались на кластере «Политехник – РСК Торнадо» с пиковой производительностью 943 Тфлопс. Кластер содержит 668 двухпроцессорных узлов (Intel(R) Xeon(R) E5 2697v3), каждый узел содержит 14 ядер. Одна задача максимально распараллеливалась на 512 ядер, при этом для накопления нестационарной статистики требовалось минимум три недели реального времени (258 000 ядрочасов).

Результаты расчетов и их обсуждение

Оценка соотношения между разрешаемой и моделируемой турбулентностью.

Охарактеризовать обоснованность применения вихреразрешающего подхода позволяет оценка отношения разрешаемой к моделируемой составляющих энергетического спектра турбулентности. В определенной степени об этом позволяет судить величина подсеточной (*англ.* SGS: SubGrid-Scale) вязкости, которая отражает вклад моделируемой турбулентности. На рис. 2, *a – d* изображены моментальные поля подсеточной вязкости, отнесенной к молекулярной, в нескольких сечениях помещения. Представлены результаты расчетов для базовой (самой узкой) расчетной области с $W/H = 1/6$ (на сетке 8 млн. ячеек) и для варианта с отношением $W/H = 1$. Среднее значение относительной подсеточной вязкости для всей расчетной области примерно равно трем, при этом максимальное значение не превышает семи. Примечательно, что распределения величины v_{SGS}/ν для разных значений ширины расчетной области качественно различаются при малых значениях x (см. рис. 2, *c*): пространственное распределение величины v_{SGS}/ν для отношения $W/H = 1$ свидетельствует о больших поперечных масштабах турбулентных вихрей, сопоставимых с продольным масштабом; при $W/H = 1/6$ такие вихри не могут сформироваться в силу наложения условий периодичности; зависимость реше-

ния от поперечного размера расчетной области обсуждается ниже.

Моделируемую подсеточную кинетическую энергию турбулентности можно оценить по следующей формуле [20]:

$$k_{SGS} = 2C\Delta^2 |S|^2,$$

где $C = 0,1$.

На рис. 2,е показано распределение мгновенного поля подсеточной кинетической энергии турбулентности k_{SGS} , отнесенной к средней разрешенной кинетической энергии турбулентности $\langle k \rangle$, которая определяется как

$$\langle k \rangle = \left[\left\langle (V'_x)^2 \right\rangle + \left\langle (V'_y)^2 \right\rangle + \left\langle (V'_z)^2 \right\rangle \right] / 2.$$

В области струи вклад подсеточной кинетической энергии в полную кинетическую энергию, равную $\langle k \rangle + k_{SGS}$, составляет менее 3%. В области возвратного течения, характеризующейся пониженными скоростями, вклад подсеточной кинетической энергии в полную кинетическую энергию еще меньше и в среднем не превышает 1%. В целом можно заключить, что доля моделируемой турбулентности невелика, и основной вклад составляет разрешаемая турбулентность.

Оценка величины колмогоровского масштаба. Важная характеристика при модели-

ровании турбулентных течений – это колмогоровский масштаб η (м), отражающий характерный размер минимальных вихрей, в которых происходит диссипация кинетической энергии за счет действия сил вязкого трения. Этот масштаб определяет минимальные требования к пространственному разрешению при прямом численном моделировании, которое должно полностью разрешить весь энергетический спектр турбулентности. Величина колмогоровского масштаба определяется по формуле

$$\eta = \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}, \quad (6)$$

где ε , m^2/c^3 , – скорость диссипации кинетической энергии турбулентности на единицу массы; v , m^2/c , – кинематический коэффициент вязкости.

При распространении припотолочной струи локальные значения колмогоровского масштаба принимают минимальные значения в области пристенного пограничного слоя в начальной зоне распространения струи. Тем не менее, степень разрешения вихрей в области пристенного пограничного слоя в рамках настоящей работы явным образом не рассматривается; ниже лишь проводится обсуждение качества предсказания трения на стенке посредством сопостав-

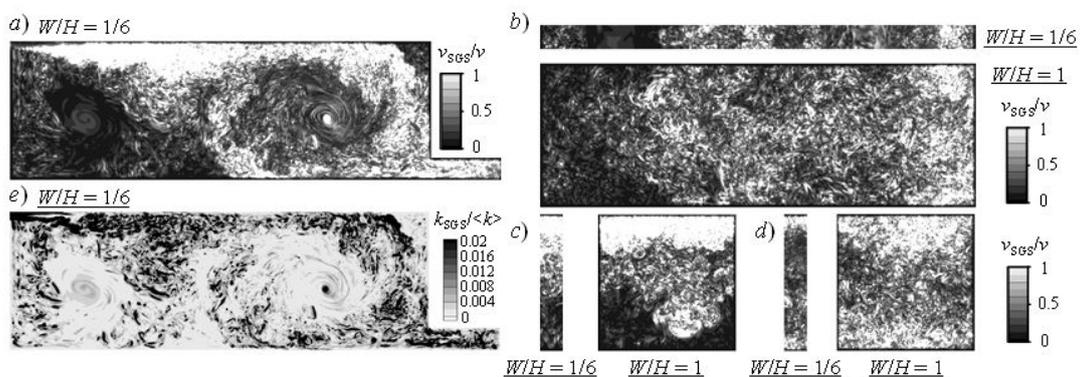


Рис. 2. Поля отношения подсеточной вязкости к молекулярной в сечениях $z = 0,25$ м (а), $y = 1,5$ м (b), $x = 3,0$ м (c) и $x = 6,0$ м (d); e – поле подсеточной кинетической энергии турбулентности, отнесенной к разрешаемой кинетической энергии турбулентности, в сечении $z = 0,25$ м (указаны значения W/H)

ления решений, получаемых на различных сетках. Количественные оценки колмогоровского масштаба осуществляются, прежде всего, для слоя смешения, степень разрешения которого представляется чрезвычайно важной для адекватного предсказания структуры вентиляционного течения. Оценки величины η проводятся на основе расчетных данных для базовой (самой узкой) расчетной области с $W/H = 1/6$, при этом используются два различных способа определения местной скорости диссипации кинетической энергии турбулентности.

I способ оценки величины ϵ . Данный способ определения ϵ для последующей оценки величины колмогоровского масштаба η основан на привлечении данных дополнительного стационарного RANS-расчета. Для этого случая использовалась квазиструктурированная сетка размерностью 141 тыс. ячеек со сгущениями в области слоя смешения и к стенкам помещения, так что величина y^+ была меньше единицы (решение на данной сетке принимается сеточно-независимым). На входной границе задавалось однородное распределение скорости ($V_{in} = 0,455$ м/с). Для замыкания RANS-постановки привлекалась полуэмпирическая модель турбулентности $k-\epsilon$ RNG, что позволило непосредственно извлечь поле ϵ из полученного численного решения.

Как оказалось, структуры течения, предсказываемые в RANS- и в WMLES- расчетах, в базовой расчетной области при $W/H = 1/6$ заметно различаются. Об этом свидетельствует сопоставление полей среднего модуля скорости, полученных с помощью указанных подходов (рис. 3, *a* и *b*). Как будет показано далее, различия структуры течения связаны с тем, что результаты WMLES-расчетов при $W/H = 1/6$ существенно зависят от размера расчетной области в трансверсальном направлении. Распределение η , рассчитанное на основе такого «рассогласованного» распределения ϵ , приведено на рис. 3, *c*.

Дополнительно была решена вспомогательная двумерная RANS-задача, в которой было задано «замороженное» поле скорости, извлеченное из WMLES-расчета; было рассмотрено среднее поле в центральном сечении помещения, $z = 0,25$ м (см. рис. 3, *b*). В «замороженной» постановке уравнения движения не решались, были лишь рассчитаны характеристики турбулентности (также с привлечением RNG-модели $k-\epsilon$). Полученное таким образом поле ϵ также использовалось для расчета поля η (см. рис. 3, *d*).

На рис. 3, *c* видно, что в распределении η , рассчитанном по полю ϵ , соответствующему совместному RANS-расчету распределений скорости и характеристик турбулентности,

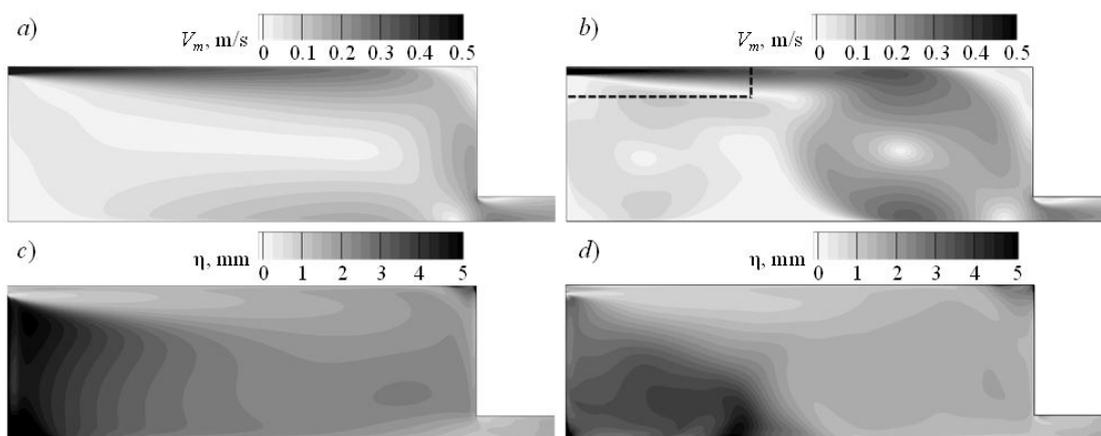


Рис. 3. Результаты RANS- (*a*) и WMLES- (*b*) расчетов полей модуля средней скорости, а также RANS-расчетов распределений колмогоровского масштаба, полученные через поля ϵ , соответствующие двум различным картинам течения (*c, d*); на рис. 3, *b* пунктиром отмечена часть сечения для анализа данных в слое смешения

локальное значение колмогоровского масштаба меняется в пределах от $\eta_{\min} = 0,42$ мм в области слоя смешения струи до $\eta_{\max} = 13,3$ мм в области низкоскоростного течения (см. рис. 3,с, нижний левый угол). Распределение колмогоровского масштаба, построенного по полю ε , соответствующему «замороженному» WMLES-полю скорости, приведено на рис. 3,д. Распределение локальных значений η в этом случае заметно отличается от картины, показанной на рис. 3,с, но минимальное значение практически не меняется: $\eta_{\min} = 0,43$ мм; локализация области малых значений η при этом также не изменяется, а максимальное значение η в этом случае составило $\eta_{\max} = 34$ мм.

Таким образом, при проведении прямого численного моделирования течения в области $W/H = 1/6$ с использованием равномерной сетки из кубических элементов с линейным размером η_{\min} , размерность сетки должна составлять не менее 182 млрд. ячеек. Для DNS-расчетов в области $W/H = 1$, описанной в экспериментальной работе [11], потребуется сетка общей размерностью минимум в 1100 млрд. ячеек, при этом для обеспечения значений числа Куранта, меньших единицы, значение шага по времени не должно превышать 10^{-3} с. Необходимо принять во внимание, что указанные оценки не учитывают уменьшение η в пограничном слое пристенной струи и в реальности для проведения DNS-расчетов потребуются сетки еще большей размерности.

Результаты проведенных оценок сведены в табл. 2, где для четырех рассмотренных вариантов приведены значения отношения линейного размера ячейки расчетной сетки к локальным минимальному и максимальному значениям колмогоровского масштаба.

И способ оценки величины ε . Данный способ определения ε основан на непосредственном использовании данных, полученных с помощью подхода LES. Последний основан на интерпретации уравнения для кинетической энергии турбулентности:

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial t} + \overline{V_j} \frac{\partial k}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{V_j' k'} &= \\ &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \delta_{jk} \left(\overline{V_k p'} \right) + \\ + \nu \frac{\partial^2 k}{\partial x_j^2} - \overline{V_j' V_k'} \frac{\partial \overline{V_k}}{\partial x_j} - \nu \frac{\partial \overline{V_k'}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{V_k}}{\partial x_j}, \end{aligned} \quad (7)$$

где последнее слагаемое как раз и представляет выражение для скорости ее диссипации,

$$\varepsilon = \nu \frac{\partial \overline{V_k'}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{V_k'}}{\partial x_j}. \quad (8)$$

Подход DNS позволяет полностью разрешить энергетический спектр турбулентности, поэтому скорость диссипации, непосредственно вычисленная по формуле (8), будет при этом определена точно. Скорость диссипации имеет максимум в высокочастотной части энергетического спектра, а в методе LES высокочастотная часть спектра моделируется с привлечением подсеточной вязкости и значение разрешенной скорости диссипации, вычисленное по формуле (8), окажется заниженным, по сравнению с точным значением ε . При проведении LES-расчетов на последовательно измельчаемых сетках, обеспечивающих лучшее разрешение высокочастотной области спектра, величина ε будет увеличиваться. Соответственно, значения η будут уменьшаться, приближаясь к точному значению.

Оценку η , проведенную на основе непосредственного расчета ε по формуле (8), иллюстрирует рис. 4,а,б, где изолиниями показаны распределения отношения линейного размера ячеек сеток, состоящих из 8 и 58 млн. ячеек, к локальным значениям колмогоровского масштаба. Соответствующие минимальные значения η_{\min} для различных сеток приведены в табл. 2: с измельчением сетки от 3 до 58 млн. ячеек (размер кубических элементов уменьшается почти в 3 раза) величина колмогоровского масштаба уменьшается на 33%.

Т а б л и ц а 2

Результаты оценок величины колмогоровского масштаба по методам I–IV

Номер сетки	Величина	Расчетное значение			
		I	II	III	IV
1-я ($\Delta = 16,8$ мм)	η_{\min} , мм	0,42	0,43	1,41	0,56
	η_{\max} , мм	13,3	34,0	8,7	–
	Δ/η_{\min}	40	39	12	30
	Δ/η_{\max}	1,3	0,5	1,9	–
2-я ($\Delta = 12,0$ мм)	η_{\min} , мм	0,42	0,43	1,27	0,63
	η_{\max} , мм	13,3	34,0	9,0	–
	Δ/η_{\min}	29	28	9	19
	Δ/η_{\max}	0,90	0,35	1,30	–
3-я ($\Delta = 8,4$ мм)	η_{\min} , мм	0,42	0,43	1,14	0,64
	η_{\max} , мм	13,3	34,0	9,8	–
	Δ/η_{\min}	20	20	7	13
	Δ/η_{\max}	0,60	0,25	0,90	–
4-я ($\Delta = 6,2$ мм)	η_{\min} , мм	0,42	0,43	1,06	0,64
	η_{\max} , мм	13,3	34,0	9,2	–
	Δ/η_{\min}	15	14	6	10
	Δ/η_{\max}	0,50	0,18	0,70	–

П р и м е ч а н и я. 1. О методах: I, II – определяли отношения размера ячейки Δ к минимуму (η_{\min}) и максимуму (η_{\max}) значений локального колмогоровского масштаба (КМ), вычисленных по данным RANS-расчетов поля скорости и характеристик турбулентности (I), а также в «замороженном» WMLES-поле скорости (II); III, IV – строили КМ по разрешенной в LES-расчете скорости диссипации (8) (III), а также по скорости диссипации, оценка которой проведена на основе выражения (9) (IV).

2. Нумерация сеток соответствует табл. 1.

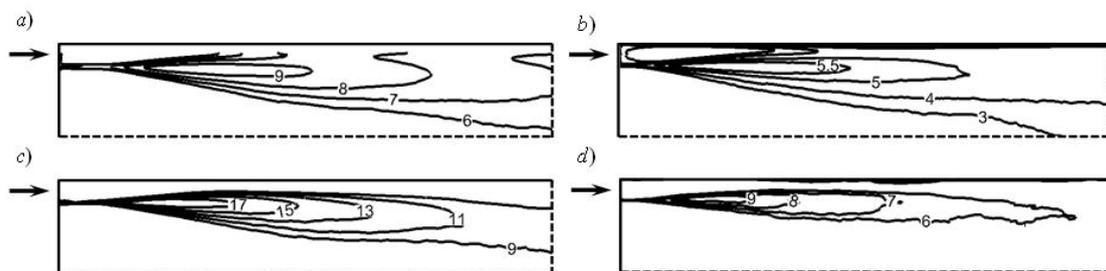


Рис. 4. Распределения отношения линейного размера ячейки расчетной сетки к колмогоровскому масштабу, рассчитанному непосредственно на основе оценки ϵ по данным LES-расчетов (a,b), а также его оценки на основе выражения (9) (c,d).

Показаны данные для области струи.

Размерность сеток составляла 8 млн. (a,b) и 58 млн. ячеек (c,d)

Оценка скорости диссипации кинетической энергии турбулентности по данным LES-расчетов может быть также проведена по методике, предложенной в работе [22]; указанная методика уже была успешно применена в работе [23] при рассмотрении задачи струйного течения. Согласно данным статьи [22], вместо непосредственной оценки величины ε по данным LES можно провести расчет всех остальных слагаемых в уравнении (7), что даст косвенную, но более точную оценку ε (сумма всех рассчитанных слагаемых должна быть подставлена в уравнение (6) для определения η). Полученное таким образом значение колмогоровского масштаба не должно заметно меняться при изменении размерности расчетной сетки.

Для оценки η в слое смешения можно ограничиться вычислением лишь одного члена в генерационном слагаемом, входящем в уравнение (7), который вносит определяющий вклад в генерацию турбулентности в этой области:

$$\overline{V'_y V'_x} \frac{\partial \overline{V}_x}{\partial y} = (\overline{V_y V_x} - \overline{V}_y \overline{V}_x) \frac{\partial \overline{V}_x}{\partial y}. \quad (9)$$

Расчет слагаемого (9) по данным WMLES-расчетов позволил получить еще одну оценку ε и, соответственно, колмогоровского масштаба. Распределения отношения линейного размера ячеек сеток, состоящих из 8 и 58 млн. ячеек, к локальным значениям рассчитанного таким образом поля η приведены на рис. 4, *c, d* соответственно. Расчетные минимальные значения η_{\min} для различных сеток приведены в последнем столбце табл. 2: при переходе от сетки к сетке они практически не меняются, стремясь с измельчением сетки к значению $\eta_{\min} = 0,64$ мм. Обоснованное проведение DNS при этом требует использования расчетной сетки размерностью 51 млрд. ячеек для $W/H = 1/6$ (306 млрд. ячеек для $W/H = 1$).

Исследование зависимости решения от параметров сетки. Серия параметрических расчетов для оценки степени влияния на решение входных граничных условий также

была проведена для расчетной области $W/H = 1/6$. На рис. 5 *a, b* представлены осредненные во времени распределения коэффициента трения C_f вдоль верхней и нижней стенок в ее среднем сечении (дополнительного пространственного осреднения не проводилось). Видно, что количественное предсказание величины коэффициента трения зависит от степени пространственного разрешения, особенно на верхней стенке. Имеет место монотонный рост трения по мере измельчения сетки. Отличия решений, полученных на исходной (3 млн. ячеек) и на первой измельченной (8 млн. ячеек) сетках достигают 15%; при дальнейшем измельчении сетки сеточная зависимость снижается. Наблюдается и некоторое качественное влияние пространственного разрешения на предсказываемую структуру течения, о чем свидетельствуют локальные различия распределений трения. Так, в окрестности верхней стенки при $x > 7$ м происходит отсоединение пристенной струи, приводящее к формированию рециркуляционной зоны (см. рис. 5, *a*). Положение точки отрыва зависит от размерности расчетной сетки: на самой грубой сетке отрыв происходит примерно на 1 м ближе ко входу, чем на сетке с самым подробным пространственным разрешением. Положение точек отрыва и присоединения потока на нижней стенке также несколько зависят от сетки (см. рис. 5, *b*).

На рис. 5, *c* представлены распределения осредненной продольной скорости вдоль расположенных в срединном сечении вертикальных линий: *A-A* при значении $x/H = 1,0$ и *B-B* при $x/H = 2,0$ (показаны пунктиром на рис. 1). Видна зависимость значений скорости в струе от пространственного разрешения: чем мельче сетка, тем выше максимальная скорость в струе, причем как в сечении *A-A* (область I), так и в сечении *B-B* (область II). Некоторая сеточная зависимость видна и в зоне возвратного течения (сечение *B-B*, область II).

Результаты расчетов на сетках, состоящих из 23 и 58 млн. ячеек, близки между собой как по профилям скорости, так и по распре-

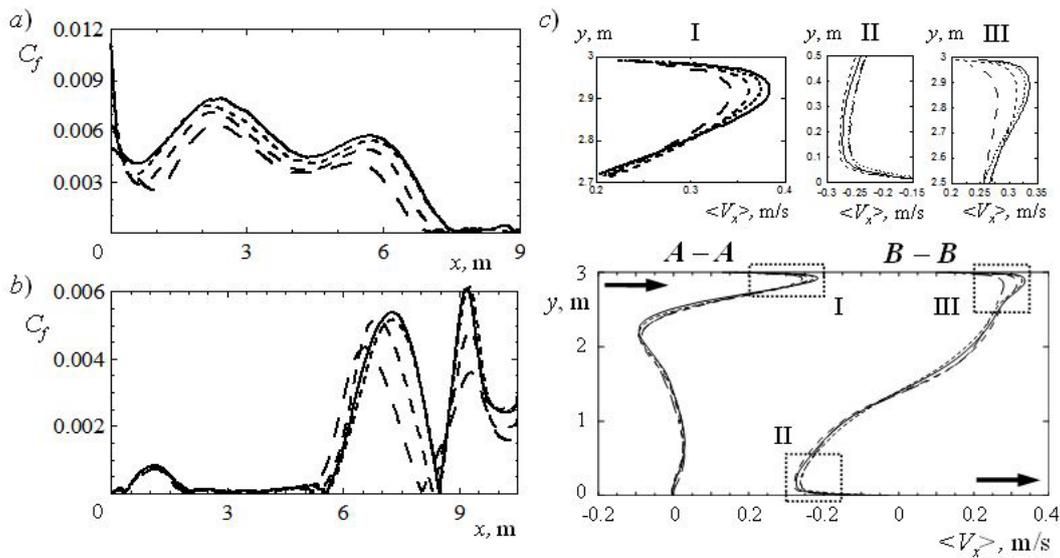


Рис. 5. Распределения коэффициента трения вдоль верхней (a) и нижней (b) стенок, а также профили скорости вдоль линий A-A и B-B (c).
 Размерности использованных сеток, млн. ячеек: 3, 8, 23 (длинный, средний и короткий пунктиры соответственно) и 58 (сплошная линия)

делению трения. Таким образом, для сетки размерностью 23 млн. ячеек решение можно трактовать как практически не зависящее от сетки. При использовании ячеек с линейным размером 12 мм (сетка из 8 млн. ячеек) сеточная зависимость решения более выражена, однако было принято решение использовать именно такие ячейки при увеличении поперечного размера расчетной области. При использовании более мелкой сетки с линейным размером ячеек 8 мм в расчетах для $W/H = 1$ потребовалось бы использовать сетку, состоящую примерно из 140 млн. ячеек, что было неприемлемым при имеющихся вычислительных ресурсах.

Влияние входных граничных условий. Серия параметрических расчетов для оценки степени влияния на решение входных граничных условий была также проведена для области $W/H = 1/6$ (сетка размерностью 8 млн. ячеек). Рассматривалось три различных профиля скорости (однородный и профили, извлеченные из решения задачи о течении в канале в сечении 18 и 60 калибров от входа в канал). Для профиля, взятого в сечении 18 калибров, был дополнительно рассчитан ва-

риант без использования генератора синтетической турбулентности.

Влияние входных граничных условий иллюстрирует рис. 6, где приведены распределения осредненной продольной компоненты скорости вдоль расположенных в срединном сечении тех же вертикальных линий A-A и B-B. Зависимость осредненной структуры течения от профиля скорости на входе иллюстрирует рис. 6,а (все представленные здесь распределения получены с использованием генератора синтетической турбулентности). Видно, что при задании на входе развитого профиля скорость в струе несколько выше: отличия в сечении A-A (область I) составляют примерно 10%, ниже по потоку также выражено расслоение распределений скорости. Возвратное течение при задании однородного профиля также характеризуется меньшей интенсивностью (см. рис. 6,а, сечение B-B, область II). Отметим, что два решения, полученные для двух различных входных распределений скорости, отличных от однородного профиля, очень близки друг к другу.

Сопоставление распределений скорости, полученных для одного и того же входного

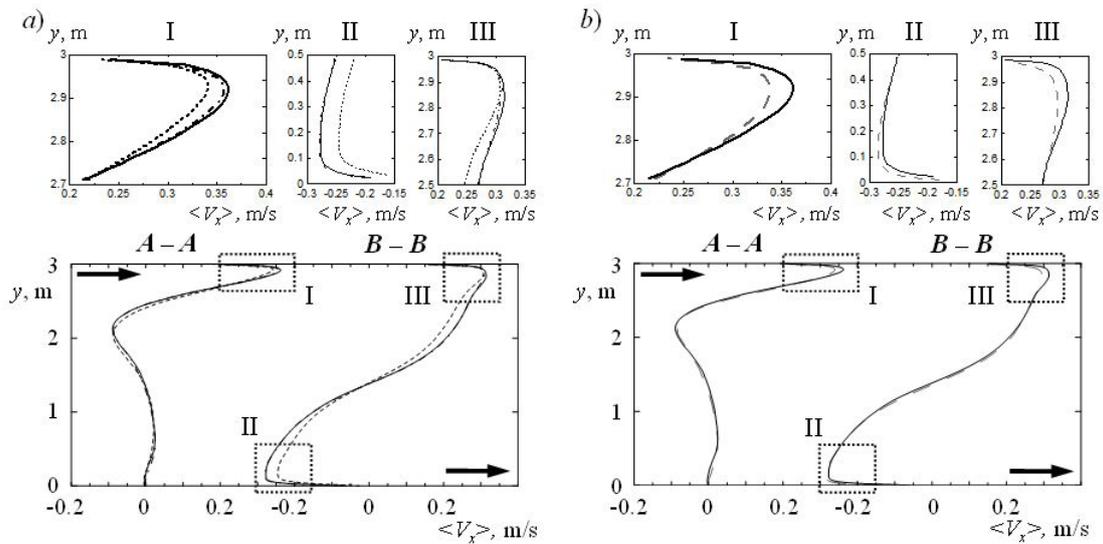


Рис. 6. Зависимости осредненной структуры течения (продольная скорость вдоль линий $A-A$ и $B-B$) от разных профилей скорости на входе (а) и от использования генератора синтетической турбулентности (отключен – длинный пунктир) для одного и того же входного профиля $x/h_{in} = 18$ (b); а – профили скорости на входе: однородный (короткий пунктир), при $x/h_{in} = 18$ и 60 (сплошная и штрихпунктирная линии соответственно)

профиля с использованием генератора синтетической турбулентности и без него приведено на рис. 6, b. Видно, что в том случае, когда генератор турбулентности не используется, скорость в ядре струи оказывается несколько ниже, причем степень влияния генератора примерно соответствует переходу от однородного к развитому профилю. Однако на описание общей циркуляции воздуха в помещении, в том числе на уровень скоростей в зоне возвратного течения, применение генератора синтетической турбулентности влияния практически не оказывает.

Влияние протяженности расчетной области в поперечном направлении. Известно, что при моделировании периодических течений с использованием вихререзающих подходов, на решение может существенно влиять недостаточная протяженность расчетной области в направлении периодичности. Чтобы исследовать влияние этого параметра в рассматриваемой задаче, была проведена серия расчетов, в которых относительная ширина расчетной области принималась равной $W/H = 1/6$ (базовый вариант, для которого выше представлено исследование сеточной

зависимости и влияния граничных условий на входе), а также $W/H = 1/3$ и 1.

Структура осредненного течения, полученная в периодической постановке для трех указанных значений W/H , показана на рис. 7, a – c; на рис. 7, d приведена структура течения, рассчитанная в полной постановке, с учетом боковых стенок [16]. Видно, что при значениях $W/H = 1/6$ и $1/3$ реализуется двухвихревая картина течения: интенсивное вторичное течение занимает лишь правую половину расчетной области, а в левой формируется менее интенсивный вторичный вихрь с противоположным направлением вращения. Увеличение размера расчетной области в направлении периодичности изменяет картину осредненного течения: пара крупных вихрей трансформируется в один, занимающий практически всю расчетную область (см. рис. 7, c). Отметим, что структура течения, полученная в периодической постановке при $W/H = 1$, практически совпадает с картиной течения в среднем сечении (см. рис. 7, d), рассчитанной в полной постановке, с боковыми стенками.

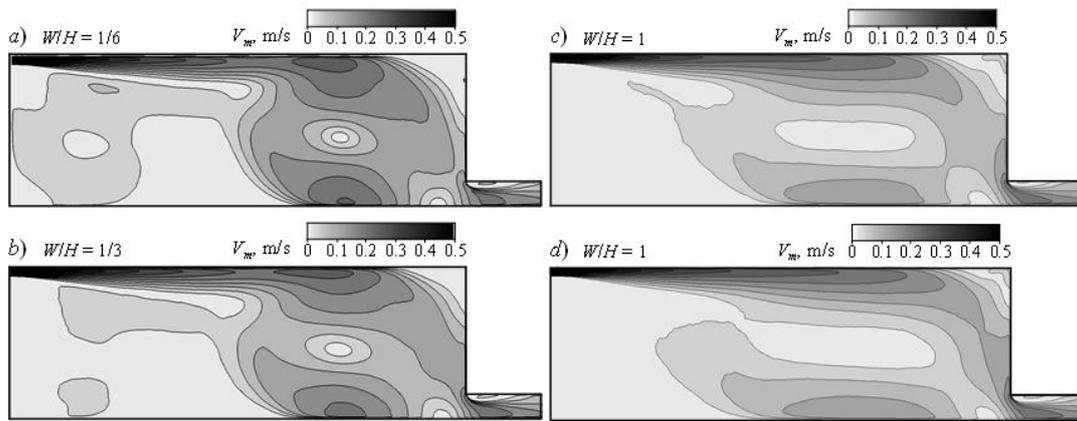


Рис. 7. Поля модуля средней скорости в срединном продольном сечении, полученные при двух постановках задачи: периодической ($a - c$) и полной, с боковыми стенками [16] (d). Указаны значения W/H

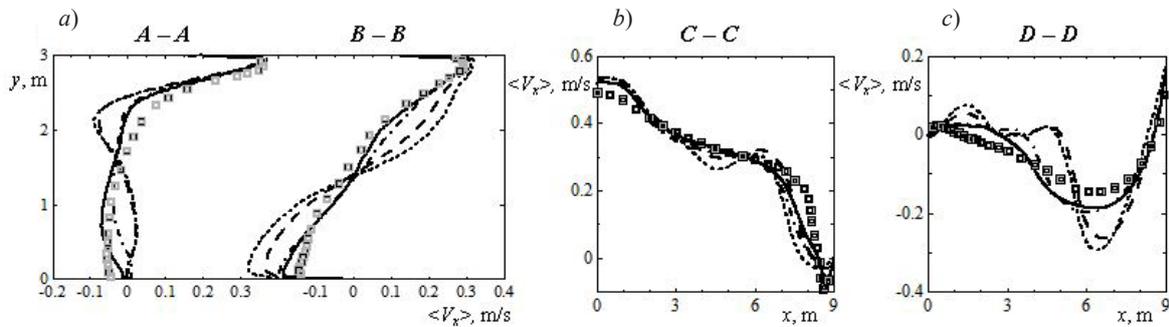


Рис. 8. Расчетные (линии) и экспериментальные [11] (символы) профили средней продольной скорости в четырех сечениях, полученные в полной постановке с боковыми стенками [16] (сплошные линии) и в периодической постановке (остальные линии) при разных значениях W/H : 1/6 (короткий пунктир), 1/3 (длинный пунктир) и 1 (штрихпунктир)

Влияние протяженности расчетной области в направлении периодичности демонстрируют также профили скорости, показанные на рис. 8 в сопоставлении с экспериментальными данными [11]. Линии, расположенные здесь в срединном сечении, были выше показаны пунктиром на рис. 1: $A-A$ и $B-B$ – вертикальные линии; $C-C$ и $D-D$ – горизонтальные линии при значениях $y/H = 0,972$ и $0,028$ соответственно.

На рис. 8 видно, что профили, полученные для $W/H = 1$ в периодической и полной постановках, практически полностью совпадают. Эти расчеты хорошо воспроизводят картину течения, которая наблюдалась экспериментально [11] (количественные различия

расчетных результатов в полной постановке и экспериментальных данных, полученные для области возвратного течения, обсуждаются в статье [16]). Следует заключить, что при $W/H \geq 1$ структура течения воспроизводится правильно для области, безграничной в z -направлении. При меньшей протяженности расчетной области, условия периодичности существенно влияют на форму и протяженность вихрей в поперечном направлении, при этом обнаруживается своего рода анизотропия. Развитие крупномасштабных в поперечном направлении вихревых структур при $W/H = 1$ можно наблюдать на представленных выше мгновенных полях подсеточной вязкости (см. рис. 2, c, d). При прове-



дении моделирования в расчетной области меньшего поперечного размера воспроизведение таких вихрей в численном решении невозможно, что и приводит к заметным изменениям в осредненных полях.

Несмотря на то, что в базовом варианте с $W/H = 1/6$ структура осредненного течения зависит от размера расчетной области, она отражает все характерные особенности рассматриваемого течения, а именно: распространение пристенной турбулентной струи, развитие слоя смешения и формирование крупных вихревых структур, определяющих течение в целом. Таким образом, методические результаты по влиянию сетки и входных граничных условий, полученные при $W/H = 1/6$, можно распространить на все рассмотренные варианты.

Заключение

На основе вихреразрешающего подхода WMLES проведено численное моделирование турбулентного течения воздуха в помещении, вентилируемом плоской воздушной струей, подаваемой из расположенного под потолком щелевого отверстия, при числе Рейнольдса $Re = 5 \cdot 10^3$. Задача ставилась в периодической постановке, описывающей квазидвумерное течение в помещении, сильно вытянутом в поперечном направлении. Расчеты проводились в гидродинамическом коде общего назначения ANSYS Fluent, обе-

спечивающем второй порядок дискретизации по времени и пространству.

В ходе серии расчетов, выполненных на сетках с линейным размером кубической ячейки в диапазоне от 6 до 16 мм, проведен анализ зависимости решения от сетки; признана приемлемой базовая сетка с линейным размером ячейки 12 мм. Оценки колмогоровского масштаба показали, что для базовой сетки минимальные значения колмогоровского масштаба в слое смешения локально примерно в 20 раз меньше линейного размера ячейки.

Установлено, что применение генератора синтетической турбулентности при задании входных граничных условий практически не оказывает влияния на описание общей циркуляции воздуха в помещении, в том числе на уровень скоростей в зоне возвратного течения.

Показано, что протяженность расчетной области в поперечном направлении заметно влияет на результаты расчетов при $W/H < 1$. При проведении расчетов в области протяженностью $W/H \geq 1$ осредненная структура квазидвумерного течения в помещении, вытянутом в поперечном направлении, воспроизводится правильно.

Исследование выполнено при поддержке Программы повышения конкурентоспособности ведущих университетов Российской Федерации (Проект 5-100-2020).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Денисихина Д.М., Луканина М.А., Самолетов М.В. Математическое моделирование микроклимата в помещении бассейна // Вентиляция, отопление, кондиционирование воздуха, теплоснабжение и строительная теплофизика (АВОК). 2012. № 6. С. 56–61.
2. Palmowska A., Lipska B. Experimental study and numerical prediction of thermal and humidity conditions in the ventilated ice rink arena // Building and Environment. 2016. Vol. 108. 1 November. Pp. 171–182.
3. Lipska B., Trzeciakiewicz Z., Ferdyn-Grygierek J., Popiolek Z. The improvement of thermal comfort and air quality in the historic Assembly hall of a university // Indoor and Built Environment. 2012. Vol. 21. No. 2. Pp. 332–337.
4. Никулин Д.А., Стрелец М.Х., Чумаков Ю.С. Результаты компьютерного моделирования аэродинамики и температурного состояния интерьера Исаакиевского собора // Сб. научных трудов «Кафедра IV». Исаакиевский собор между прошлым и будущим. СПб.: Изд-во Исаакиевского собора, 2008. С. 404–424.

5. **Усачов А.Е.** Численное исследование системы вентиляции пассажирского салона перспективного самолета // Ученые записки ЦАГИ. 2009. Т. XL. № 4. С. 56–62.
6. **You R., Chen J., Lin C.H., Wei D., Sun H., Chen Q.** Investigating the impact of gaspers on cabin air quality in commercial airliners with a hybrid turbulence model // Building and Environment. 2017. Vol. 111. January. Pp. 110–122.
7. **Son C.H., Turner E.H., Smirnov E.M., Ivanov N.G., Telnov D.S.** Integrated computational fluid dynamics carbon dioxide concentration study for the international space station // SAE Transactions. Journal of Aerospace. 2005. Vol. 114. Pp. 89–94.
8. **Ivanov N.G., Telnov D.S., Smirnov E.M., Son C.H.** Propagation of CO₂ field after fire extinguisher discharge: a numerical study // AIAA Techn. Paper AIAA 2011-5078. 2011. 8 p. (<https://arc.aiaa.org/doi/abs/10.2514/6.2011-5078>).
9. **Piomelli U.** Large eddy simulations in 2030 and beyond // Phil. Trans. R. Soc. A. 2014. Vol. 372. No. 2022. P. 20130320.
10. **Davidson L., Nielsen P.V.** Large eddy simulations of the flow in a three dimensional ventilated room // Proc. of the 5th International Conference on Air Distribution in Rooms ‘ROOMVENT-96’ (Yokohama, Japan, July 17–19). 1996. Vol. 2. Pp. 161–168.
11. **Nielsen P.V., Restivo A., Whitelaw J.H.** The velocity characteristics of ventilated room // J. Fluids Engineering. 1978. Vol. 100. No. 3. Pp. 291–298.
12. **Jiang Y., Su M., Chen Q.** Using large eddy simulation to study airflows in and around buildings // ASHRAE Transactions. 2003. Vol. 109. No. 2. Pp. 517–526.
13. **Smirnov E.M., Ivanov N.G., Telnov D.S., Son C.H.** CFD modeling of cabin air ventilation in the International Space Station: a comparison of RANS and LES data with test measurements for the Columbus Module // International Journal of Ventilation. 2006. Vol. 5. No. 2. Pp. 219–228.
14. **Durrani F.** Using large eddy simulation to model buoyancy-driven natural ventilation. School of Civil and Building Engineering, Loughborough University, UK. 2013. Ph. D. Thesis. 187 p.
15. **Hawendi S., Gao S.** Impact of windward inlet-opening positions on fluctuation characteristics of wind-driven natural cross ventilation in an isolated house using LES // International Journal of Ventilation. 2018. Vol. 17. No. 2. Pp. 93–119.
16. **Засимова М.А., Иванов Н.Г., Марков Д.** Численное моделирование циркуляции воздуха в помещении при подаче из плоской щели. II. LES-расчеты для помещения конечной ширины // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. № 3. С. 75–92.
17. **Smagorinsky J.** General circulation experiments with the primitive equations. I. The basic experiment // Monthly Weather Review. 1963. Vol. 91. No. 3. Pp. 99–164.
18. **Shur M.L., Spalart P.R., Strelets M.K., Travin A.K.** A hybrid RANS-LES approach with delayed-DES and wall-modelled LES capabilities // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2008. Vol. 29. No. 6. Pp. 1638–1649.
19. **Mathey F.** Aerodynamic noise simulation of the flow past an airfoil trailing-edge using a hybrid zonal RANS-LES // Computers & Fluids. 2008. Vol. 37. No. 7. Pp. 836–843.
20. **Sagaut P.** Large Eddy Simulation for incompressible flows: An introduction. 3rd Ed. Heidelberg: Springer, 2006. 556 p.
21. **Wilcox D.C.** Turbulence modeling for CFD. 3rd Ed. La Canada: DCW Industries, Inc., 2006. 515 p.
22. **Dejoan A., Leschziner M.A.** Large eddy simulation of a plane turbulent wall jet // Physics of Fluids. 2005. Vol. 17. No. 2. P. 025102.
23. **Guseva E.K., Strelets M.Kh., Travin A.K., Burnazzi M., Knopp T.** Zonal RANS-IDDES and RANS computations of turbulent wake exposed to adverse pressure gradient // Journal of Physics: Conf. Series. 2018. Vol. 1135. International Conference PhysicA.SPb/2018 23–25 October 2018, Saint Petersburg, Russia. P. 012092.

Статья поступила в редакцию 20.04.2020, принята к публикации 13.07.2020.

**СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ**

ЗАСИМОВА Марина Александровна – ассистент 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
zasimova_ma@spbstu.ru

ИВАНОВ Николай Георгиевич – 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
ivanov_ng@spbstu.ru

МАРКОВ Детелин – PhD, доцент Софийского технического университета, г. София, Болгария.

1000, Болгария, г. София, бульвар Климента Орхидского, 8
detmar@tu-sofia.bg

REFERENCES

1. **Denisikhina D.M., Lukanina M.A., Samoletov M.V.**, Matematicheskoe modelirovanie microclimata v pomeshchenii basseina [Mathematical modeling of indoor climate in a swimming pool], AВОK: Ventilation, Heating, Air Conditioning, Heat Supply and Building Thermophysics. 6 (2012) 56–61 (in Russian).
2. **Palmowska A., Lipska B.**, Experimental study and numerical prediction of thermal and humidity conditions in the ventilated ice rink arena, Building and Environment. 108 (1 November) (2016) 171–182.
3. **Lipska B., Trzeciakiewicz Z., Ferdyn-Grygierek J., Popiolek Z.**, The improvement of thermal comfort and air quality in the historic assembly hall of a university, Indoor and Built Environment. 21 (2) (2012) 332–337.
4. **Niculin D.A., Strelets M.K., Chumakov Yu.S.**, Rezultaty komputernogo modelirovaniya aerodinamiki i temperaturnogo sostoyaniya interiera Isakievskogo sobora [Results of numerical modelling of the airflow and thermal comfort of St. Isaac's Cathedral interior], In the sci. collection of articles “Kafedra IV”: “St. Isaac's Cathedral between the past and the future”, Published by St. Isaac's Cathedral (2008) 404–424 (in Russian).
5. **Usachov A.E.**, Chislennoe issledovanie sistemy ventilatsii passazhirskogo salona perspektivnogo samoleta [Numerical study of ventilation system of passenger cabin of a perspective aircraft], Scientific Notes of TsAGI. 40 (4) (2009) 56–62 (in Russian).
6. **You R., Chen J., Lin C.H., et al.**, Investigating the impact of gaspers on cabin air quality in commercial airliners with a hybrid turbulence model, Building and Environment. 111 (January) (2017) 110–122.
7. **Son C.H., Turner E.H., Smirnov E.M., et al.**, Integrated computational fluid dynamics carbon dioxide concentration study for the International Space Station, SAE Transactions, Journal of Aerospace. 114 (2005) 89–94.
8. **Ivanov N.G., Telnov D.S., Smirnov E.M., Son C.H.**, Propagation of CO₂ field after fire extinguisher discharge: a numerical study, AIAA Techn. Paper AIAA 2011-5078 (2011) 8 p.
9. **Piomelli U.**, Large eddy simulations in 2030 and beyond, Phil. Trans. R. Soc. A. 372 (2022) (2014) 20130320.
10. **Davidson L., Nielsen P.V.**, Large eddy simulations of the flow in a three dimensional ventilated room, Proc. of the 5th International Conference on Air Distribution in Rooms ‘ROOMVENT-96’ (Yokohama, Japan, July 17–19, 1996). 2 (1996) 161–168.
11. **Nielsen P.V., Restivo A., Whitelaw J.H.**,

The velocity characteristics of ventilated room, *J. Fluids Engineering*. 100 (3) (1978) 291–298.

12. **Jiang Y., Su M., Chen Q.**, Using large eddy simulation to study airflows in and around buildings, *ASHRAE Transactions*. 109 (2) (2003) 517–526.

13. **Smirnov E.M., Ivanov N.G., Telnov D.S., Son C.H.**, CFD modeling of cabin air ventilation in the International Space Station: a comparison of RANS and LES data with test measurements for the Columbus Module, *Int. J. of Ventilation*. 5 (2) (2006) 219–228.

14. **Durrani F.**, Using large eddy simulation to model buoyancy-driven natural ventilation, Ph. D. Thesis, School of Civil and Building Engineering, Loughborough University, UK, 2013.

15. **Hawendi S., Gao S.**, Impact of windward inlet-opening positions on fluctuation characteristics of wind-driven natural cross ventilation in an isolated house using LES, *International Journal of Ventilation*. 17 (2) (2018) 93–119.

16. **Zasimova M.A., Ivanov N.G., Markov D.**, Numerical modeling of air distribution in a test room with 2D sidewall jet. II. LES-computations for the room with finite width, *St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics*. 13 (3) (2020) 75–92.

17. **Smagorinsky J.**, General circulation exper-

iments with the primitive equations. I. The basic experiment, *Monthly Weather Review*. 91 (3) (1963) 99–164.

18. **Shur M.L., Spalart P.R., Strelets M.K., Travin A.K.**, A hybrid RANS LES approach with delayed-DES and wall-modelled LES capabilities, *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 29 (6) (2008) 1638–1649.

19. **Mathey F.**, Aerodynamic noise simulation of the flow past an airfoil trailing-edge using a hybrid zonal RANS-LES, *Computers & Fluids*. 37 (7) (2008) 836–843.

20. **Sagaut P.**, Large eddy simulation for incompressible flows: An introduction, 3rd Ed. Springer, Heidelberg (2006).

21. **Wilcox D.C.**, Turbulence modeling for CFD, 3rd Ed., DCW Industries, Inc., La Canada (2006).

22. **Dejoan A., Leschziner M.A.**, Large eddy simulation of a plane turbulent wall jet, *Physics of Fluids*. 17 (2) (2005) 025102.

23. **Guseva E.K., Strelets M.Kh., Travin A.K., et al.**, Zonal RANS-IDDES and RANS computations of turbulent wake exposed to adverse pressure gradient, *Journal of Physics: Conf. Series*. 1135, International Conference PhysicA.SPb/2018 23–25 October 2018, Saint Petersburg, Russia (2018) 012092.

Received 20.04.2020, accepted 13.07.2020.

THE AUTHORS

ZASIMOVA Marina A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

zasimova_ma@spbstu.ru

IVANOV Nikolay G.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

ivanov_ng@spbstu.ru

MARKOV Detelin

Technical University of Sofia

8 Kliment Ohridsky boulevard, Sofia, 1000, Bulgaria

detmar@tu-sofia.bg

DOI: 10.18721/JPM.13306
 УДК 532.517

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЦИРКУЛЯЦИИ ВОЗДУХА В ПОМЕЩЕНИИ ПРИ ПОДАЧЕ ИЗ ПЛОСКОЙ ЩЕЛИ. II. LES-расчеты для помещения конечной ширины

М.А. Засимова¹, Н.Г. Иванов¹, Д. Марков²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
 Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Софийский технический университет, София, Болгария

Представлены результаты численного моделирования турбулентного течения воздуха в тестовом помещении на основе вихреразрешающего подхода – метода моделирования крупных вихрей с пристенным моделированием. Вентиляция помещения осуществляется плоской воздушной струей, подаваемой из расположенного под потолком на торцевой стенке щелевого отверстия, при $Re = 5233$. Задача ставилась в постановке, максимально полно воспроизводящей условия тестовых экспериментов (Nielsen et al., 1978, 1990). Рассмотрены две геометрические конфигурации, отличающиеся шириной входного отверстия. Расчеты в программном пакете ANSYS Fluent выполнены с использованием сетки размерностью 48 млн. ячеек. Показано, что результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными в пристенной струе, однако наблюдается заметное рассогласование результатов расчетов и эксперимента в зоне обратного течения (обитаемой зоне), характеризующейся малыми скоростями.

Ключевые слова: турбулентное течение, плоская струя, метод моделирования крупных вихрей, вентиляция

Ссылка при цитировании: Засимова М.А., Иванов Н.Г., Марков Д. Численное моделирование циркуляции воздуха в помещении при подаче из плоской щели. II. LES-расчеты для помещения конечной ширины // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 75–92. DOI: 10.18721/JPM.13306

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

NUMERICAL MODELING OF AIR DISTRIBUTION IN A TEST ROOM WITH 2D SIDEWALL JET. II. LES-computations for the room with finite width

M.A. Zasimova¹, N.G. Ivanov¹, D. Markov²

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

² Technical University of Sofia, Sofia, Bulgaria

The paper presents the results of numerical modeling of turbulent airflow in a test room based on the vortex-resolving wall-modeled large eddy simulation approach. The room ventilation is provided by a plain air jet at $Re = 5233$. The jet is supplied from a slit placed at a side wall under the ceiling. The problem formulation reproduces the test experiment conditions (Nielsen et al., 1978, 1990) as completely as possible. Two configurations with various air supply slit width are considered. Calculations are carried out with the ANSYS Fluent software using the grid consisting of 48 million cells. The paper demonstrates that in the near-wall jet zone the computational results agree well with the experimental data, but visible disagreement is obtained in the recirculation flow region (occupied zone) with relatively low velocities.

Keywords: turbulent airflow, plain jet, large eddy simulation, ventilation

Citation: Zasimova M.A., Ivanov N.G., Markov D. Numerical modeling of air distribution in a test room with 2D sidewall jet. II. LES-computations for the room with finite width, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 75–92. DOI: 10.18721/JPM.13306

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

Введение

При разработке и оптимизации систем отопления, вентиляции и кондиционирования (ОВК) воздуха в помещениях жилых, общественных и производственных сооружений необходимо правильно организовывать воздухообмен, обеспечивая комфортные для человека условия микроклимата. Широко используются расчетные методы воздухообмена, основанные на интегральных оценках и балансовых соотношениях, отвечающих различным условиям раздачи приточного воздуха [1]. Такие методы разрабатываются на основе эмпирических подходов и могут быть настроены лишь на определенный тип течения (распространение свободной затопленной струи, распространение пристенной струи и др.). В связи с этим балансовые расчетные методы не всегда способны обеспечить полную и количественно достоверную информацию даже об интегральных параметрах течения для реальных условий, например для помещений со сложной геометрией. Кроме того, в прикладных задачах подача воздуха в помещение обычно осуществляется с помощью диффузоров различных типов, а описание особенностей диффузоров в расчетных методах затруднено. Для получения полной картины течения, включающей информацию о средних и локальных характеристиках потока, необходимо привлечение более точных подходов к описанию турбулентного движения воздуха.

Важную для обоснования проектных решений информацию о пространственной структуре течения, типичной для вентиляционных задач, можно получить на основе численного моделирования многомерных задач гидрогазодинамики. Один из наиболее распространенных подходов к численному моделированию турбулентных течений – ре-

шение стационарных или нестационарных осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье – Стокса [2], замкнутых полуэмпирической моделью турбулентности. Такой подход в литературе часто называют сокращенно RANS/URANS (Steady/Unsteady Reynolds-Averaged Navier – Stokes). Отметим, что, согласно литературным данным для свободных струйных течений, хорошо зарекомендовали себя двухпараметрические модели турбулентности типа k - ε [3], а также модель Секундова [4] с одним дифференциальным уравнением, однако для расчетов сложных струйных течений валидация RANS-данных продолжает оставаться актуальной задачей.

Среди методов предсказания параметров турбулентных потоков высокую точность имеют вихреразрешающие подходы, позволяющие получать не только осредненные, но и актуальные поля физических величин. К классическим вихреразрешающим подходам относится, прежде всего, метод прямого численного моделирования, основанный на непосредственном решении полных уравнений Навье – Стокса (DNS: Direct Numerical Simulation). Другой вихреразрешающий подход – метод моделирования крупных вихрей (LES: Large Eddy Simulation), в котором решаются отфильтрованные уравнения Навье – Стокса, что позволяет разрешать крупные вихри, но требует полуэмпирического моделирования вихрей малых масштабов.

Применение вихреразрешающих подходов сопряжено с чрезвычайно большими вычислительными затратами, однако LES-подход, по сравнению с DNS, требует сравнительно меньших вычислительных ресурсов, особенно если не претендовать на разрешение пристеночных областей, а применять там технологии моделирования, основанные на RANS-подходе. На протяжении двух по-



следних десятилетий активно развиваются гибридные RANS-LES-подходы, к числу которых относится и LES с пристенным моделированием (WMLES: Wall Modeled LES). Детальное описание вихреразрешающих подходов представлено, например, в работах [5, 6].

Оценки степени неопределенности при применении вихреразрешающих моделей LES и RANS-LES, как и для других подходов к моделированию турбулентности, включающих ту или иную степень эмпиризма, можно получить при решении тестовых задач, для которых имеются достоверные и хорошо описанные экспериментальные данные.

В настоящей работе представлены результаты валидационных расчетов для широко известной тестовой задачи о вентиляционном течении в помещении при подаче воздушной струи из щелевого отверстия, расположенного под потолком [7, 8]. Серия лабораторных экспериментов, описанных в работах [7, 8], была направлена на изучение турбулентного течения воздуха в модели вентилируемого помещения. Для измерений с контролируемой точностью полей скорости и пульсационных характеристик применялся метод лазерной доплеровской анемометрии (LDA: Laser Doppler Anemometry). Данные измерений хорошо документированы и доступны как в графическом виде в публикациях [7, 8], так и в виде базы данных на сайте <http://www.cfd-benchmarks.com/>.

Настоящая статья представляет собой продолжение работы [9], где методика применения подхода WMLES была отработана на основе расчетов в упрощенной периодической постановке. В отличие от статьи [9], здесь рассматривается полная постановка задачи, включающая боковые стенки и максимально соответствующая условиям эксперимента.

За время, прошедшее с момента опубликования экспериментальных данных [7], неоднократно предпринимались попытки воспроизведения качественной картины течения и количественных данных по профилям скорости с помощью методов вычислительной гидроаэродинамики. На указанном выше сайте, помимо собственно экспери-

ментальных данных, размещены и наиболее известные данные расчетов, выполненных различными научными группами за период 1991 – 2013 гг. для условий, соответствующих тесту [7]. Необходимо отметить, что в литературе отсутствуют результаты численного моделирования для условий экспериментального исследования [8] с уменьшенной шириной входного щелевого отверстия.

В таблице приведены краткие сведения о работах [10 – 30], в которых представлены результаты численного моделирования воздухообмена в модели помещения, приближенной к данным статьи [7]. Расчеты выполнялись в двумерной, квазидвумерной (с заданием условий периодичности в поперечном направлении) и трехмерной постановках. В указанных статьях подробно изложены результаты методических расчетов, показано влияние моделей турбулентности и различных численных параметров на получаемое решение.

В таблице представлены данные об общих размерностях расчетных сеток, которые были использованы в численных расчетах, описанных в статьях [10 – 30]. Естественно, размерности сеток постепенно увеличиваются со временем: так, самая грубая расчетная сетка, использовавшаяся в расчетах в 1991 г., состоит из 100 контрольных объемов, а наиболее подробная сетка – приблизительно из $4,8 \cdot 10^7$ ячеек (2018 год).

По данным таблицы видно, что модельная задача численно решалась как с помощью RANS-подхода, замыкаемого полуэмпирическими моделями турбулентности (такими как k - ϵ , k - ω , k - ω SST и др.), так и с помощью вихреразрешающего LES-подхода в сочетании с различными подсеточными моделями. До недавнего времени лишь три группы авторов (Davidson et al. [17, 18], Bennetsen [19], Voight [20]) выполнили расчеты для модельной задачи [7] с помощью LES-подхода, однако, на весьма грубых, с точки зрения современных представлений, расчетных сетках (с размерностью менее полумиллиона ячеек). Важно отметить, что, как теперь понятно [9], на таких сетках для обсуждаемой задачи нет

**Сведения о публикациях,
в которых численно моделируется эксперимент [7]**

Номер	Авторы	Год	Страна	Метод	Код	Расчетная сетка
<i>2D-постановка задачи</i>						
[10]	Heikkinen, Piira	1991	Финляндия	RANS (k - ϵ)	WISH	28×17 , 45×26
[11]	Vogl, Renz	1991	Германия	RANS (k - ϵ)	Fluent	56×62
[12]	Skalicky, Morgenstern, Auge, Hanel, Rosler	1992	Германия	RANS (k - ϵ)	Psiom2D ResCUE	64×32 , 128×64
[14]	Chen	1995	США	RANS (k - ϵ , k - ϵ RNG)	PHOENICS	50×45 , 100×70
[15]	Chen	1996	США	RANS (k - ϵ ; RSTM -IP, -GY, -QI)	PHOENICS	50×45 ,
[16]	Peng, Davidson, Holmberg	1996	Швеция	RANS (LRN k - ϵ)	CALC-BFC	50×47 , 102×132
[19]	Bennetsen	1999	Дания	RANS (k - ϵ , k - ω , ASM, DSM)	CFX 4.2	72×48 , 144×96
[20]	Voight	2001	Дания	RANS (k - ϵ , RNG, LS; k - ω , SST)	EllipSys	192×128 , 288×192
[23]	Mora, Gadgil, Wurtz	2003	США, Франция	RANS (k - ϵ), Zonal models: PL, PL-SDF, SD-SDF	SPARK, Star CD	10×10 , 40×40
[25]	Rong, Nielsen	2008	Дания	RANS (k - ϵ ; k - ω , BSL, SST)	CFX 11.0	4 736, 18 944, 28 800 cells
[26]	Dreau, Heiselberg, Nielsen	2013	Дания	RANS (k - ϵ , low-Re, realizable; k - ω , SST)	CFX 11.0 Star-CCM+	4 068, 4 793, 16 658 cells
[29]	Yuce, Pulat	2018	Турция	RANS (k - ϵ ; k - ω)	Fluent 16.2	4 000 – 43 100 cells
<i>3D-задача с условием периодичности</i>						
[13]	Rosler, Hanel	1993	Германия	RANS (k - ϵ)	ResCUE	$64 \times 28 \times 4$, $128 \times 48 \times 4$
[20]	Voight	2001	Дания	RANS (k - ϵ LS, k - ω , k - ω BSLREV)	EllipSys	$96 \times 64 \times 16$
[27]	Ivanov, Zasimova	2018	Россия	WMLES S-Omega	Fluent 16.2	$751 \times 252 \times 250$

Продолжение

Номер	Авторы	Год	Страна	Метод	Код	Расчетная сетка
<i>3D-постановка задачи</i>						
[17]	Davidson, Nielsen	1996	Швеция, Дания	LES (Smagorinsky, dynamic Germano)	SLAP	$72 \times 42 \times 52$, $102 \times 52 \times 52$
[18]	Davidson	1996	Швеция	RANS (k - ϵ), LES (Smagorinsky, dynamic Germano)	CALC-BFC	$72 \times 42 \times 52$, $102 \times 52 \times 52$
[19]	Bennetsen	1999	Дания	RANS (k - ϵ , RNG; k - ω , ASM, DSM), LES (MS, Smagorinsky, dynamic Germano)	CFX 4.2, LESROOM	$96 \times 64 \times 32$, $84 \times 72 \times 72$ (RANS); $64 \times 64 \times 32$, $96 \times 64 \times 64$ (LES)
[20]	Voight	2001	Дания	RANS (k - ϵ LS, k - ω BSLREV), LES (Mixed Scale, Smagorinsky,	EllipSys	$96 \times 64 \times 16$ (RANS); $72 \times 48 \times 36$, $96 \times 64 \times 48$ (LES)
[21]	Jiang, Chen	2001	США	LES (Smagorinsky, Filtered	PHOENICS	$66 \times 18 \times 34$, $66 \times 34 \times 34$
[22]	Jiang, Mingde, Chen	2003		Dynamic, Small-Scale model)		
[24]	Ivanov	2005	Бельгия, Россия	RANS (k - ϵ , LS, SA)	SINF, FINE	$37 \times 41 \times 29$, $73 \times 81 \times 57$
[27] [28]	Ivanov, Zsimeva	2018	Россия	WMLES S-Omega	Fluent 16.2	$751 \times 252 \times 250$
[30]	Van Hoof, Blocken	2019	Бельгия	RANS	Fluent 15.0	212 160 – 1 697 280 cells

Обозначения: RSTM – Reynolds-Stress Models [6], LRN – Low Reynolds Number correction, BSL – Baseline revised, LS – Launder Sharma k - ϵ model, ASM – Algebraic Stress Model, DSM – Differential Reynolds Stress Model.

возможности с достаточной степенью точности описать поведение трехмерных турбулентных структур.

Если обобщить результаты численного моделирования для экспериментальных условий [7], известные авторам из литературы, то можно сделать вывод о том, что в целом получаемая картина осредненного течения согласуется с экспериментом, однако локальные характеристики оказываются неточными. В настоящее время появилась возможность

проведения на весьма подробных сетках (размерностью до $10^7 - 10^8$ ячеек) аккуратного численного моделирования турбулентных течений на основе различных вихререзающих подходов, в том числе подхода WMLES.

В настоящей работе представляются результаты численного моделирования турбулентного течения воздуха в замкнутом помещении на основе вихререзающего подхода WMLES для условий, приближенных к экспериментам [7, 8].

Постановка задачи

Геометрия помещения. Рассматривается течение воздуха в помещении, имеющем форму прямоугольного параллелепипеда с размерами $3H \times H \times H$. Схема помещения изображена на рис. 1, *a*, начало системы координат расположено в нижнем углу помещения. За масштаб длины взята высота помещения $H = 3$ м.

На торцевой стенке помещения под потолком располагается вход в расчетную область – приточное щелевое отверстие шириной w_{in} и высотой $h_{in} = 0,056H = 0,168$ м. В соответствии с различными условиями проведения экспериментов [7, 8], рассмотрены две геометрические конфигурации, которые различаются шириной входного отверстия.

В первом варианте ширина отверстия совпадает с шириной помещения, $w_{in} = H$; такая постановка задачи соответствует условиям эксперимента [7].

Во втором варианте ширина отверстия уменьшена в два раза и равна $w_{in} = 0,5H$, отверстие располагается по центру относительно боковых стенок помещения (см. рис. 1, *a*); та-

кая постановка соответствует условиям эксперимента [8].

На противоположной торцевой стенке, вблизи пола, находится вытяжное щелевое отверстие прямоугольной формы шириной H и высотой $h_{out} = 0,16H = 0,48$ м, через которое осуществляется отбор воздуха из помещения. К отверстию примыкает выходящий вентиляционный канал, имеющий форму прямоугольного параллелепипеда с размерами $0,50H \times 0,16H \times 1,0H$, установленный с целью предотвращения формирования возвратного течения на поверхности вытяжного отверстия.

Пунктирами на рис. 1, *a* показаны линии, вдоль которых представлены экспериментальные данные в работах [7, 8]. Вертикальные линии *A-A* расположены при $x = 1,0H$, а *B-B* – при $x = 2,0H$; горизонтальные линии *C-C* расположены при $y = 0,972H$ (на расстоянии $h_{in}/2$ от потолка, что соответствует среднему сечению щелевого входа), а *D-D* – при $y = 0,028H$ (на расстоянии $h_{in}/2$ от пола). Нижние индексы «1» в обозначениях соответствуют центральному сечению помеще-

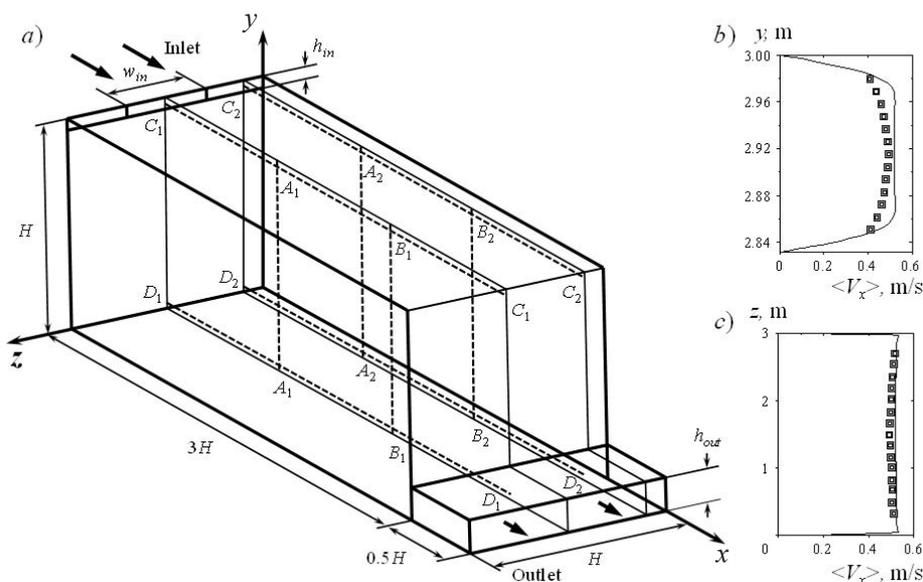


Рис. 1. Геометрическая модель помещения (*a*), на которой показаны дополнительные линии, вдоль которых доступны экспериментальные данные; расчетные (линии) и экспериментальные (символы) распределения продольной скорости на входе в помещение по двум осям (*b*, *c*) для варианта с $w_{in} = 3$ м; сечения при $z = 3,000$ м (*b*) и $y = 2,916$ м (*c*)

ния ($z = 0,5H$), а «2» – боковому сечению ($z = 0,1H$).

Следует отметить, что для снижения погрешностей в измерении скорости, лабораторные эксперименты [7, 8] были выполнены в уменьшенной модели помещения: ширина и высота модели были одинаковы и составляли $H = 0,0893$ м, а длина – $0,268$ м, однако изложение материала как в исходных работах [7, 8], так и в описаниях последующих численных исследований проводилось для отмасштабированных до натуральных условий данных.

Граничные условия. Задача рассматривается в изотермическом приближении, что соответствует условиям эксперимента, где обеспечивалось однородное поле температуры в помещении. Для описания движения воздуха использовалась модель несжимаемой жидкости с постоянными физическими свойствами: плотность $\rho = 1,23$ кг/м³, динамическая вязкость $\mu = 1,79 \cdot 10^{-5}$ Па·с.

На вход в помещение подается воздух со среднерасходной скоростью равной $V_{in} = 0,455$ м/с (для первого варианта с широким входным отверстием это значение соответствует объемному расходу 825 м³/ч). Число Рейнольдса, построенное по высоте входного отверстия, составляет $Re = \rho h_{in} V_{in} / \mu = 5,23 \cdot 10^3$.

Экспериментальные распределения скорости во входном сечении вдоль центральных продольной и поперечной линий показаны символами на рис. 1, b, c. Отметим, что в работах [7, 8] не приводятся сведения о подводящем вентиляционном тракте, т. е. о том, каким образом было сформировано входное поле скорости.

В настоящей работе профили скорости на входе были извлечены из дополнительного WMLES-решения соответствующей задачи о течении воздуха в прямом вентиляционном канале с размерами $L_{duct} \times h_{in} \times w_{in}$. Длина канала задавалась равной $L_{duct} = 2,0H = 6$ м, а его поперечное сечение соответствовало входному отверстию с размерами $h_{in} \times w_{in}$.

На выходной границе расчетной области задавались мягкие граничные условия. Остальные границы расчетной области – твердые стенки, на которых задавались условия прилипания.

Математическая модель. Моделирование турбулентного течения воздуха осуществлялось на основе вихреразрешающего подхода WMLES, который базируется на решении отфильтрованных уравнений Навье – Стокса (см., например, статью [31]). В результате применения процедуры фильтрации актуальные переменные f в уравнениях Навье – Стокса заменяются на сумму «отфильтрованных» и «подсеточных» переменных $f = \tilde{f} + f'$. Величина \tilde{f} определяется выражением

$$\tilde{f}(x, t) = \int_{Vol} G(x - x', \Delta) f(x', t) dx'^3, \quad (1)$$

где $G(x - x', \Delta)$ – функция фильтра (фильтрующая функция), которая определяет размер и структуру мелкомасштабной турбулентности (например, коробчатый фильтр); x, m , – координата рассматриваемой точки; Δ, m , – характерный размер фильтра (ширина фильтра).

Вихри, размер которых меньше, чем ширина фильтра, не разрешаются.

Для несжимаемой жидкости с постоянными физическими свойствами отфильтрованные уравнения можно записать в следующем виде:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{V} = 0; \\ \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{V}\mathbf{V}) = \\ = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot p + 2\nu(\nabla \cdot \underline{\underline{S}}) - \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}^{SGS}, \end{cases} \quad (2)$$

где \mathbf{V} – вектор скорости с компонентами (V_x, V_y, V_z); $\underline{\underline{S}}$ – тензор скоростей деформации, $\underline{\underline{\tau}}^{SGS}$ – слагаемое, получившееся в результате пространственной фильтрации уравнений.

Для определения подсеточных напряжений используется обобщенная гипотеза Буссинеска:

$$\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = -2\nu_{SGS} S_{ij}, \quad (3)$$

где ν_{SGS} – подсеточная турбулентная вязкость, подлежащая определению с помощью какой-либо полуэмпирической подсеточной модели.

В расчетах использовался подход WMLES S-Omega, реализация которого базируется на данных статьи [32]. По сравнению со стандартной моделью Смагоринского, для определения подсеточной вязкости используется модифицированный подсеточный линейный масштаб и демпфирующий множитель (аналогичный множителю Ван Дрифта в модели Прандтля для RANS-подхода), а вместо модуля тензора скоростей деформаций S используется разность $|S - \Omega|$:

$$\nu_{SGS} = \min \left\{ (\kappa d_w)^2, (C_s \Delta)^2 \right\} |S - \Omega| \times \left(1 - \exp \left\{ \left(-y^+ / 25 \right)^3 \right\} \right), \quad (4)$$

где $C_s = 0,2$ – эмпирическая константа Смагоринского; $S, c^{-1}, \Omega, c^{-1}$, – модули тензоров скоростей деформации и завихренности

$$(S = (2S_{ij}S_{ij})^{0,5}, \Omega = (2\Omega_{ij}\Omega_{ij})^{0,5});$$

$\kappa = 0,41$ – постоянная Кармана; d_w , м, – расстояние до ближайшей стенки, y^+ – нормированное расстояние от центра первой пристенной ячейки до стенки.

Величина Δ определяется по формуле

$$\Delta = \min \left\{ \max (C_w d_w, C_w \Delta_{max}, \Delta_{wn}), \Delta_{max} \right\}, \quad (5)$$

где Δ_{max} , м, – максимальный размер ячейки сетки (для ортогонального шестигранника он определяется как максимальная длина ребра); Δ_{wn} , м, – шаг сетки по направлению нормали к стенке; $C_w = 0,15$ – эмпирическая константа.

Поскольку из решения вспомогательной

задачи о течении воздуха в плоском канале для задания входных граничных условий извлекались лишь осредненные величины, для определения актуальных пульсационных характеристик (турбулентного контента) во входном сечении использовался один из доступных генераторов синтетической турбулентности – метод вихрей (Vortex Method) [33]. При активации генератора синтетической турбулентности требуется определить интенсивность турбулентности на входной границе; было задано значение $I = 4\%$.

Вычислительные аспекты задачи. Численное моделирование проводилось в гидродинамическом коде общего назначения ANSYS Fluent 16.2*, в котором дискретизация определяющих уравнений осуществляется по методу конечных объемов. Использовалась равномерная сетка, состоящая из кубических элементов и построенная в сеточном генераторе ICEM CFD. Размерность сетки составила примерно 48 млн. ячеек ($751 \times 252 \times 250$), при этом линейный размер ячейки составил $\Delta = 12$ мм.

Использовались параметры вычислительного алгоритма, обеспечивающие дискретизацию по пространству и времени со вторым порядком точности. При аппроксимации конвективных слагаемых в уравнении движения использовалась центральная схема (опция “Central Differencing” в пакете ANSYS Fluent). Применялся безытерационный алгоритм, который отвечает продвижению во времени по методу дробных шагов (опция NITA: Non-Iterative Time-Advancement). Шаг по времени Δt , равный 0,01 с, был выбран так, чтобы максимальное значение числа Куранта в расчетной области было меньше единицы. Дополнительные расчеты показали, что уменьшение временного шага до 0,006 с не влияет на осредненные характеристики течения. Обоснование выбора сетки и прочие методические аспекты применения метода моделирования крупных вихрей рассмотрены в первой части настоящего исследования [9], где рассматривалась периодическая задача в

* ANSYS Inc. ANSYS Fluent 16.2 User's Guide, 2015.

отсутствие влияния боковых стенок.

Для контроля за развитием нестационарного течения в различных областях помещения были размещены точки мониторинга, которые позволили определить переход к статистически установившемуся режиму течения. Следует отметить высокую чувствительность пульсационных характеристик течения к длине промежутка осреднения. Для накопления представительной статистики требовалось рассчитывать выборки продолжительностью от 1500 с (150 тыс. временных шагов) до 3000 с. Осредненные характеристики, рассчитанные за меньшие периоды осреднения, оказывались существенно зависящими от выборки.

Расчеты проводились с использованием ресурсов суперкомпьютерного центра «Политехнический» (<http://www.scc.spbstu.ru>). Задачи запускались на кластере «Политехник – РСК Торнадо» с пиковой производительностью 943 Тфлопс. Кластер содержит 668 двухпроцессорных узлов (Intel(R) Xeon(R) E5 2697v3), каждый узел содержит 14 ядер. Одна задача максимально распараллеливалась на 512 ядер, при этом для накопления нестационарной статистики требовалось как минимум три недели реального времени (258 000 ядрочасов).

Результаты расчетов и их обсуждение

Описание структуры течения (вариант 1, $w_{in} = H$). Структуру течения в помещении иллюстрирует рис. 2, на котором в нескольких сечениях помещения приведены мгновенные, т. е.

$$V = (V_x^2 + V_y^2 + V_z^2)^{0,5},$$

и средние, а именно

$$V_m = \left(\langle V_x \rangle^2 + \langle V_y \rangle^2 + \langle V_z \rangle^2 \right)^{0,5},$$

поля модуля скорости для первого варианта расчета, с шириной входного отверстия, совпадающей с шириной помещения ($w_{in} = H$). Здесь и далее символы $\langle \dots \rangle$ означают осреднение по времени.

Вблизи потолка развивается пристенная турбулентная струя воздуха (верхние области полей на рис. 2), которая практически симметрична относительно срединного сечения помещения. По мере распространения струи от входного отверстия до противоположной торцевой стенки значения скорости падают примерно в два раза (от $V_{in} = 0,455$ до $0,200$ м/с). Сталкиваясь с противоположной от входа стенкой, струя разворачивается, и в нижней области помещения формируется

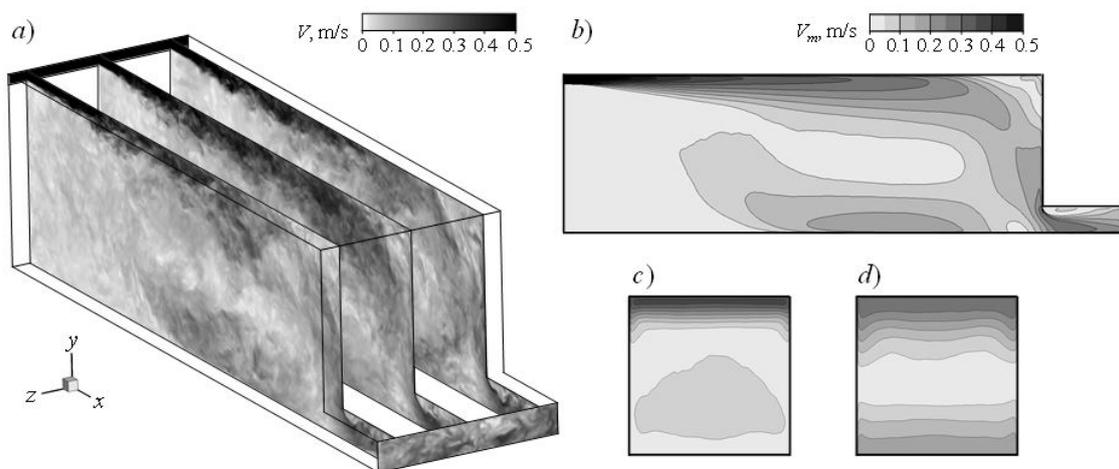


Рис. 2. Мгновенные поля скорости в продольных сечениях $z = 0,3$ м, $1,5$ м и $2,7$ м в модели помещения (а), а также поля модуля средней скорости в сечениях $z = 1,5$ м (b), $x = 3,0$ м (c) и $x = 6,0$ м (d)

низкоскоростное вторичное течение, которое характеризуется значениями скорости менее 0,1 м/с.

Как следует из картин течения в поперечных сечениях (см. рис. 2, *c,d*), в большей части помещения течение однородно вдоль трансверсального z направления, несмотря на то, что сечение помещения представляет собой квадрат ($W/H = 1$). Заметные отклонения от двумерной (плоской) структуры течения наблюдаются вблизи боковых стенок помещения, а также в области пониженных скоростей рециркуляционного течения. Таким образом, упрощенная постановка задачи с наложением условия периодичности дает возможность предсказать структуру течения, однако, как показано в работе [9], для этого необходимо, чтобы периодическая расчетная область в поперечном направлении имела достаточную протяженность, т. е. при $W/H \geq 1$.

Картина течения в срединном сечении (см. рис. 2, *b*) указывает на то, что в помещении выделяются две существенно разномасштабные области: зона струйного течения, т. е. область, в которой развивается интенсивная припотолочная струя, для которой характерны высокие значения скорости воздуха, и обитаемая зона – область с низкоскоростным циркуляционным течением, где в натуральных условиях и обеспечивается подача свежего воздуха людям, находящим-

ся в помещении. Описание такого течения с помощью численного моделирования оказывается весьма непросто из-за разномасштабности течений, реализующихся в разных зонах помещения.

Разномасштабность течения демонстрируют также данные в точках мониторинга, расположенных в области струйного течения, – точка *A* с координатами 3,0, 2,8 и 1,5 м, и рециркуляционного течения – точка *B* с координатами 3,0, 0,4 и 1,5 м; на рис. 3, *a* показана эволюция продольной компоненты скорости в этих точках.

В зоне струи наблюдаются высокочастотные пульсации, при этом их амплитуда сопоставима со средним значением скорости (для точки *A* значение $\langle V_x \rangle = 0,29$ м/с, а значение максимального отклонения от этого среднего равно 0,27 м/с). Характерный временной масштаб пульсаций в точке *A* составляет менее 5 с. В области пониженных скоростей относительная амплитуда пульсаций существенно выше; характерный масштаб времени низкочастотных колебаний также оказывается на порядок выше, чем в области струи, например, в точке *B* он составляет около 150 с.

На рис. 3, *b* приведена частотная зависимость спектральной плотности энергии PSD (Power Spectral Density), рассчитанная по данным x -компоненты скорости (см. рис. 3, *a*), которая получена с помощью формулы

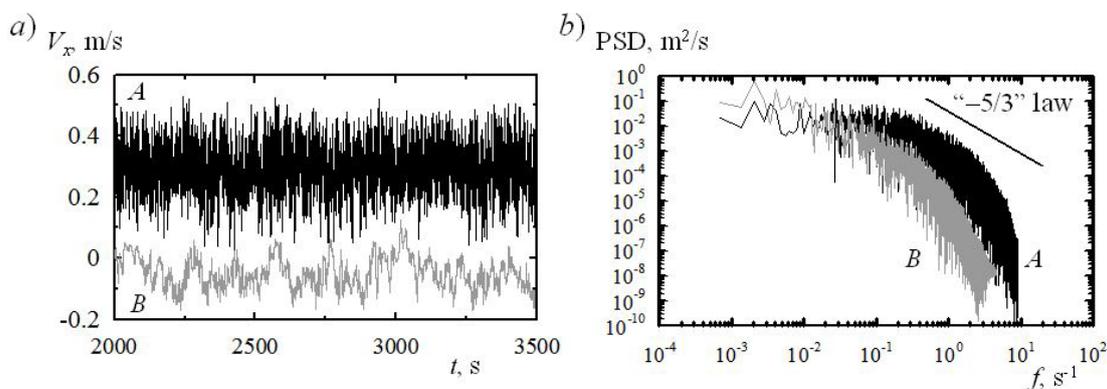


Рис. 3. Временные диаграммы x -компоненты скорости в двух точках мониторинга: точке *A* с координатами (3,0, 2,8 и 1,5 м) и точке *B* (3,0, 0,4 и 1,5 м) (*a*), а также энергетические спектры пульсаций скорости в этих точках (*b*)

$$PSD = 2A_{U_x}^2 \Delta t,$$

где A_{U_x} — амплитуда гармонических составляющих в преобразовании Фурье.

На графике добавлена прямая, отражающая убывание спектра по закону Колмогорова (обозначена как “ $-5/3$ ” law). Этот закон показывает универсальность поведения частотного энергетического спектра в области инерционного интервала $E \sim k^{-5/3}$, где E — спектральная плотность кинетической энергии, k — волновое число.

На спектральных кривых, построенных по данным в точках A и B , можно выделить участок, на котором выполняется закон Колмогорова. На графиках также видно, что энергетические спектры пульсаций заполнены более чем на две декады, что свидетельствует о принадлежности рассматриваемого течения к режиму с развитой турбулентностью.

Сопоставление с экспериментальными данными (вариант 1, $w_{in} = H$). На рис. 4 приведены профили осредненной по времени продольной (x -) компоненты скорости $\langle V_x \rangle$, и ее среднеквадратичные отклонения от среднего значения $(\langle V_x'^2 \rangle)^{0.5}$ в восьми сече-

ниях (линиях) помещения (расположения сечений см. на рис. 1, a). На графиках сведены воедино данные, полученные в ходе настоящего численного моделирования, и экспериментальные данные [7]. В верхней части рис. 4 представлены графики вдоль линий, проведенных в центральном сечении помещения, в нижней части — в боковом сечении. На графиках видно, что течение в помещении является квазидвумерным в широком диапазоне трансверсальной координаты (как и было отмечено ранее); профили скорости и ее пульсаций в центральном и боковом сечениях идентичны как качественно, так и количественно.

Результаты численных расчетов достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными в области припотолочной струи. В то же время имеет место рассогласование результатов расчетов с экспериментом в зоне возвратного течения. Расчетные профили скорости и ее пульсаций в вертикальных сечениях (линии $A-A$ и $B-B$) хорошо воспроизводят экспериментальные данные; некоторое рассогласование результатов имеется в окрестности пола помещения при $y < 1$ (см.

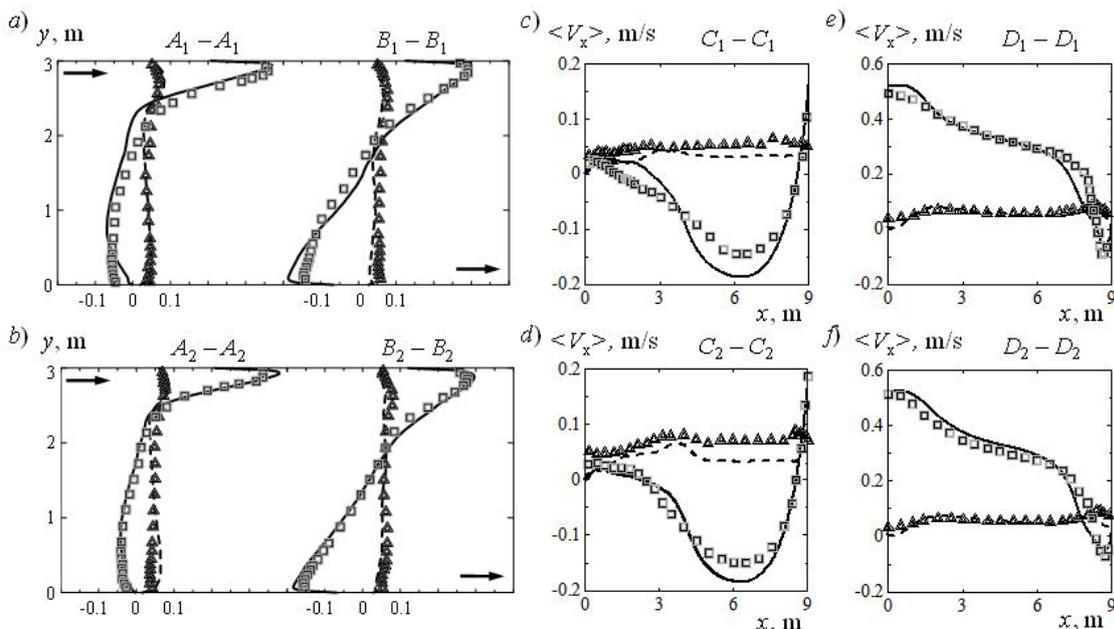


Рис. 4. Расчетные (сплошные линии) и экспериментальные (квадратные символы) профили скорости, а также профили ее пульсаций (пунктиры и треугольные символы соответственно) в нескольких сечениях геометрической модели помещения (см. рис. 1, a)

рис. 4, *a, b*). Определенное рассогласование расчетных и экспериментальных результатов можно отметить и по данным скорости и ее пульсаций в горизонтальных сечениях помещения, расположенных в зоне возвратного течения (линии *C-C* на рис. 4, *c, d*), где наблюдаются локальные максимумы скорости потока. Напротив, вдоль горизонтальных линий *D-D* (см. рис. 4, *e, f*) расчет хорошо согласуется с экспериментом.

Из сопоставления представленных результатов с данными работ прошлых лет других авторов, в которых численно моделируются условия эксперимента [7] (см. таблицу), можно заключить, что результаты настоящих исследований лучше согласуются с данными эксперимента [7] как по профилям скорости, так и по пульсационным характеристикам. Особенно наглядно это видно в области струи (сечения *D-D* на рис. 4, *e, f*), где в настоящей работе получено количественное согласие расчетных и экспериментальных данных, и при этом положение точки отрыва струи от верхней стенки предсказано точно. В области вторичного течения (сечения *C-C* на рис. 4, *c, d*) представленные расчеты предсказывают более интенсивное движение, чем наблюдалось в эксперименте – значения скорости и ее пульсаций по расчетным данным оказываются завышенными. Все опублико-

ванные ранее работы других авторов указывали на существенное рассогласование расчета и эксперимента в зоне возвратного течения с относительно низкими скоростями.

Особенности течения при уменьшении ширины входного отверстия (вариант 2, $w_{in} = 0,5H$). Особенности течения для варианта 2 с входным отверстием, ширина которого вдвое меньше ширины расчетной области, иллюстрирует рис. 5, где сопоставлены структуры течения для обоих рассмотренных вариантов. На рисунке изображены трехмерные изоповерхности Q -критерия, имеющего вид $Q = 0,5(\Omega^2 - S^2)$, на которых величина Q принимает значение, равное $0,1 \text{ с}^{-2}$; изоповерхности окрашены в соответствии со значениями модуля скорости. Уменьшение ширины входной области в два раза приводит к появлению дополнительных слоев смешения в трансверсальном (z -) направлении, развитие которых заметно в припотолочной зоне в углах помещения: в осредненном течении здесь проявляется принципиально трехмерный характер течения. При удалении от входа различия картин распространения струи сглаживаются; в области взаимодействия струи с противоположной торцевой стенкой численные решения демонстрируют практически одинаковые распределения Q -критерия.

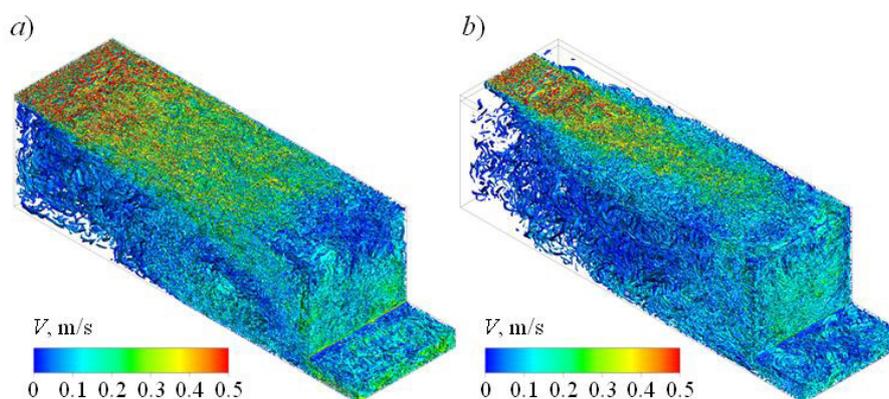


Рис. 5. Мгновенные изоповерхности Q -критерия, окрашенные в соответствии с величиной модуля скорости; построены для двух вариантов расчета: $w_{in} = H$ (a) и $0,5H$ (b)

В целом можно заключить, что глобальная структура течения для двух вариантов, которые различаются шириной входного отверстия, идентична, за исключением области в окрестности входа.

Сравнение осредненных по времени профилей x -компоненты скорости, полученных в расчетах, с экспериментальными данными [8] вдоль вертикальных линий $A-A$ и $B-B$ показано на рис. 6 (отметим, что для задачи с уменьшенной шириной входа доступен лишь весьма ограниченный набор экспериментальных данных). На рис. 6,*a* приведены распределения вдоль линий в центральном сечении, когда $z = 1,5$ м, а на рис. 6,*b* – распределения вдоль линий в боковом сечении, при $z = 0,3$ м (это значение поперечной координаты находится уже за пределами входного отверстия). На графиках видно, что в ближнем следе (линии $A-A$) результаты расчета полностью согласуются с экспериментальными данными. В области помещения, расположенной ближе к выходу (линии $B-B$), проявляются различия между расчетными и экспериментальными профилями скорости, особенно в боковом сечении. Причины отмеченного рассогласования могут проистекать как из недостатков методики численного моделирования, так и в силу неопределенности экспериментальных данных [8]. Следует отметить, что в расчетах была выявлена сильная чувствительность осредненных

характеристик течения к продолжительности выборки, использующейся для осреднения: в представляемых расчетах независимость от промежутка осреднения достигнута (при выборках, превышающих 1500 с).

В расчетах показано, что для течения с существенно трехмерной картиной осредненного течения, характерной для варианта 2, использование при осреднении достаточно продолжительной выборки имеет принципиальное значение. Сведения о методике осреднения (в том числе о продолжительности выборок), которая применялась в эксперименте, в работах [7, 8] не указаны. Известно также, что в области низкоскоростного течения погрешности измерений скорости могут резко возрастать, а именно – в этой области наблюдается большее рассогласование расчетных и экспериментальных данных.

Заключение

На основе вихреразрешающего подхода WMLES проведено численное моделирование турбулентного течения воздуха в помещении квадратного поперечного сечения, вентилируемом плоской воздушной струей, которая подается из расположенного под потолком щелевого отверстия; при этом число Рейнольдса $Re = 5 \cdot 10^3$. Задача ставилась в постановке, максимально полно воспроизводящей условия тестового эксперимента. Рассмотрены две геометрические конфигу-

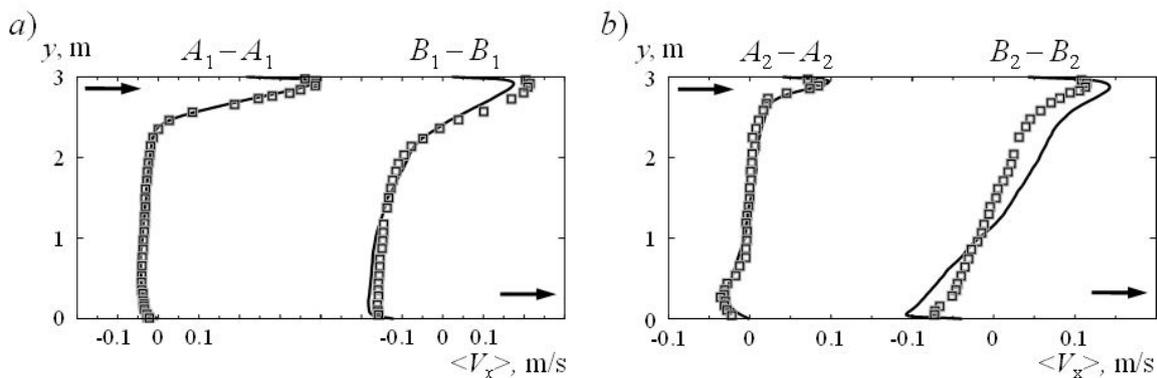


Рис. 6. Расчетные (сплошные линии) и экспериментальные [8] (символы) профили продольной компоненты скорости в сечениях $A-A$ и $B-B$ для варианта 2, $w_{in} = 0,5H$

рации, отличающиеся шириной входного отверстия. Расчеты проводились в гидродинамическом коде общего назначения ANSYS Fluent, обеспечивающем второй порядок дискретизации по времени и пространству.

Несмотря на геометрическую простоту, течение, формирующееся в помещении, сочетает множество факторов, осложняющих моделирование: под потолком помещения развивается плоская пристенная струя; после разворота нисходящая струя натекает на нижнюю стенку; определенную роль играют боковые стенки, которые формируют трехмерную структуру осредненного течения.

Показано, что результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными в пристенной струе, однако наблюдается за-

метное рассогласование результатов расчетов с экспериментом в зоне возвратного течения (обитаемой зоне), для которой характерны сравнительно малые значения скорости.

Благодарности

Авторы выражают благодарность доценту Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого А.В. Гарбаруку и директору научно-образовательного центра «Компьютерные технологии в аэродинамике и теплотехнике» того же университета В.В. Рису за ценные советы и замечания.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Программы повышения конкурентоспособности ведущих университетов Российской Федерации (Проект 5-100-2020).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Гримитлин М.И.** Распределение воздуха в помещениях. 3-е изд., доп. и испр. СПб.: АВОК Северо-Запад, 2004. 320 с.
2. **Рейнольдс О.** Динамическая теория движения несжимаемой вязкой жидкости и определение критерия // Проблемы турбулентности. Сб. переводных статей под ред. М.А. Великанова и Н.Т. Швейковского. Москва-Ленинград: ОНТИ НКТП СССР, 1936. С. 185–227.
3. **Launder В.Е., Spalding D.B.** Lectures in mathematical models of turbulence. London, New-York: Academic Press, 1972. 169 p.
4. **Гуляев А.Н., Козлов В.Е., Секундов А.Н.** К созданию универсальной однопараметрической модели для турбулентной вязкости // Известия АН СССР. Механика жидкости и газа. 1993. № 4. С. 69–81.
5. **Sagaut P.** Large Eddy Simulation for incompressible flows: An introduction. 3rd Ed. Heidelberg: Springer, 2006. 556 p.
6. **Гарбарук А.В., Стрелец М.Х., Травин А.К., Шур М.Л.** Современные подходы к моделированию турбулентности. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2016. 234 с.
7. **Nielsen P.V., Restivo A., Whitelaw J.H.** The velocity characteristics of ventilated room // J. Fluids Engineering. 1978. Vol. 100. No. 3. Pp. 291–298.
8. **Nielsen P.V.** Specification of a two dimensional test case // Aalborg: Institutet for Bygningsteknik, Aalborg Universitet, Denmark, Gul Serie. 1990. Vol. R9040. No. 8. Pp. 1–15.
9. **Засимова М.А., Иванов Н.Г., Марков Д.** Численное моделирование циркуляции воздуха в помещении при подаче из плоской щели. I. Отработка применения вихреразрешающего подхода с использованием периодической постановки // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 56–74.
10. **Heikkinen J., Piira K.** Simulation of simple (two-dimensional) test cases // Technical Research Center of Finland. Laboratory of Heating and Ventilation. Espoo, Finland. 1991. Annex report. No. AN20.1-SF-91-VTT07. 16 p.
11. **Vogl N., Renz U.** Simulation of simple test cases // Energy Conservation in Buildings and in Community Systems. Annex 20. Airflow Patterns within Buildings. No. 1. 46. Aachen, Germany, 1991. 10 p. www.cfd-benchmarks.com.
12. **Skalicky T., Morgenstern G., Auge A., Hanel B., Rosler M.** Comparative studies of se-

- lected discretization methods for the numerical solution of room air flow problems // Proc. of the 3rd International Conference on Air Distribution in Rooms 'ROOMVENT-92' (Aalborg, Denmark, September 2–4, 1992). 1992. Pp. 226–240.
13. **Rosler M., Hanel B.** Numerical computation of flow and heat transfer in air-conditioned rooms by a special velocity-pressure iteration and a multigrid method // Proc. of the 3rd International Conference on Air Distribution in Rooms 'ROOMVENT-92' (Aalborg, Denmark, September 2–4, 1992). 1992. Pp. 178–199.
14. **Chen Q.** Comparison of different $k-\varepsilon$ models for indoor air flow computations // Numerical Heat Transfer, An International Journal of Computation and Methodology, Part B. Fundamentals. 1995. Vol. 28. No. 3. Pp. 353–369.
15. **Chen Q.** Prediction of room air motion by Reynolds – Stress models // J. Building and Environment. 1996. Vol. 31. No. 3. Pp. 233–244.
16. **Peng S.-H., Davidson L., Holmberg S.** The two-equation turbulence $k-\omega$ model applied to recirculating ventilation flows. Chalmers University of Technology, Sweden. Department of Thermodynamics and Fluid Dynamics. 1996. 26 p.
17. **Davidson L., Nielsen P.V.** Large eddy simulations of the flow in a three dimensional ventilated room // Proc. of the 5th International Conference on Air Distribution in Rooms 'ROOMVENT-96' (Yokohama, Japan, July 17–19). 1996. Vol. 2. Pp. 161–168.
18. **Davidson L.** Implementation of a Large Eddy Simulation method applied to recirculating flow in a ventilated room. Aalborg University, Denmark. Department of Building Technology and Structural Engineering. 1996. 28 p.
19. **Bennetsen J.C.** Numerical simulation of turbulent airflow in livestock buildings. The Technical University of Denmark. The Department of Mathematical Modeling. Ph. D thesis. 1999. 205 p.
20. **Voight L.K.** Navier– Stokes simulations of airflow in rooms and around human body. International Center for Indoor Environment and Energy, Technical University of Denmark. Department of Energy Engineering. Ph. D thesis. 2001. 169 p.
21. **Jiang Y., Chen Q.** Study of natural ventilation in buildings by large eddy simulation // J. of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 2001. Vol. 89. No. 13. Pp. 1155–1178.
22. **Jiang Y., Su M., Chen Q.** Using large eddy simulation to study airflows in and around buildings // ASHRAE Transactions. 2003. Vol. 109. No. 2. Pp. 517–526.
23. **Mora L., Gadgil A.J., Wurtz E.** Comparing zonal and CFD model predictions of isothermal indoor airflows to experimental data // Indoor Air. 2003. Vol. 13. No. 2. Pp. 77–85.
24. **Ivanov N., Smirnov E., Lacor C.** Computational fluid dynamics analysis of pollutant dispersion in a metro carriage // Proc. of the 17th Air-Conditioning and Ventilation Conference (Prague, Czech. Republic, May 17–19, 2006). 2006. Pp. 117–122.
25. **Rong L., Nielsen P.V.** Simulation with different turbulence models in an annex 20 room benchmark test using Ansys CFX 11.0. Denmark, Aalborg University, Department of Civil Engineering, 2008. DCE Technical Report. No. 46. 16 p.
26. **Dreau J.L., Heiselberg P., Nielsen P.V.** Simulation with different turbulence models in an Annex 20 benchmark test using Star-CCM+. Denmark, Aalborg University, Department of Civil Engineering, 2013. DCE Technical Report. No. 147. 22 p.
27. **Ivanov N.G., Zasimova M.A.** Large Eddy Simulation of airflow in a test ventilated room // Journal of Physics: Conf. Series. 2018. Vol. 1038. International Conference PhysicA.SPb/2017, 24–26 October 2017, Saint-Petersburg, Russia. P. 012136.
28. **Ivanov N.G., Zasimova M.A.** Mean air velocity correction for thermal comfort calculation: assessment of velocity-to-speed conversion procedures using Large Eddy Simulation data // Journal of Physics: Conf. Series. 2018. Vol. 1135. International Conference PhysicA.SPb/2018, 23–25 October 2018, Saint-Petersburg, Russia. P. 012106.
29. **Yuce B.E., Pulat E.** Forced, natural and mixed convection benchmark studies for indoor thermal environments // International Communications in Heat and Mass Transfer. 2018. Vol. 92. March. Pp. 1–14.
30. **Van Hoof T., Blocken B.** Mixing ventilation driven by two oppositely located supply jets with a time-periodic supply velocity: A numerical analysis using computational fluid dynamics // Indoor and Built Environment. 2019. Special issue –

New Building Ventilation Technologies. November. Pp. 1–18. DOI: 10.1177/1420326X19884667

31. **Piomelli U.** Large eddy simulations in 2030 and beyond // Phil. Trans. R. Soc. A. 2014. Vol. 372. No. 2022. P. 20130320.

32. **Shur M.L., Spalart P.R., Strelets M.K., Travin A.K.** A hybrid RANS-LES approach with

delayed-DES and wall-modelled LES capabilities // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2008. Vol. 29. No. 6. Pp. 1638–1649.

33. **Mathey F.** Aerodynamic noise simulation of the flow past an airfoil trailing-edge using a hybrid zonal RANS-LES // Computers & Fluids. 2008. Vol. 37. No. 7. Pp. 836–843.

Статья поступила в редакцию 20.04.2020, принята к публикации 23.07.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗАСИМОВА Марина Александровна – ассистент 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
zasimova_ma@spbstu.ru

ИВАНОВ Николай Георгиевич – 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
ivanov_ng@spbstu.ru

МАРКОВ Детелин – PhD, доцент Софийского технического университета, г. София, Болгария.

1000, Болгария, г. София, бульвар Климента Орхидского, 8
detmar@tu-sofia.bg

REFERENCES

1. **Grimtlin M.I.**, Raspredelenie vozdukh v pomeshcheniyakh [Air distribution in the rooms], 3rd Ed., AVOK Severo-Zapad, St. Petersburg, 2004 (in Russian).

2. **Reynolds O.**, IV. On the dynamical theory of incompressible viscous fluids and the determination of the criterion, Phil. Trans. Roy. Soc. Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 186 (December) (1895) 123–164.

3. **Launder B.E., Spalding D.B.**, Lectures in mathematical models of turbulence, Academic Press, London, New-York, 1972.

4. **Guliaev A.N., Kozlov V.E., Sekundov A.N.**, A universal one-equation model for turbulent viscosity, Fluid Dynamics. 28 (4) (1993) 485–494.

5. **Sagaut P.**, Large Eddy Simulation for incompressible flows: An introduction, 3rd Ed., Springer, Heidelberg, 2006.

6. **Garbaruk A.V., Strelets M.Kh., Travin A.K.**,

Shur M.L., Sovremennyye podkhody k modelirovaniyu turbulentsnosti [Modern approaches to turbulence modelling], St. Petersburg Polytechnic University Publishing, St. Petersburg, 2016 (in Russian).

7. **Nielsen P.V., Restivo A., Whitelaw J.H.**, The velocity characteristics of ventilated room, J. Fluids Engineering. 100 (3) (1978) 291–298.

8. **Nielsen P.V.**, Specification of a two dimensional test case, Institutet for Bygningsteknik, Aalborg Universitet, Denmark, Gul Serie, Aalborg. R9040 (8) (1990)1–15.

9. **Zasimova M.A., Ivanov N.G., Markov D.**, Numerical modeling of air distribution in a test room with 2D sidewall jet. I. Foundations for eddy resolving approach application based on periodical formulation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics 13 (3) (2020) 56–74.

10. **Heikkinen J., Piira K.**, Simulation of simple (two-dimensional) test cases, Technical Research Center of Finland, Laboratory of Heating and Ventilation, Espoo, Finland, Annex report No. AN20.1-SF-91-VTT07 (1991).
11. **Vogl N., Renz U.**, Simulation of simple test cases, In: Energy Conservation in Buildings and in Community Systems, Annex 20. Airflow Patterns within Buildings. No. 1.46. Aachen, Germany, 1991. www.cfd-benchmarks.com.
12. **Skalicky T., Morgenstern G., Auge A., et al.**, Comparative studies of selected discretization methods for the numerical solution of room air flow problems, Proc. of the 3rd International Conference on Air Distribution in Rooms 'ROOMVENT-92' (Aalborg, Denmark, September 2–4, 1992), (1992) 226–240.
13. **Rosler M., Hanel B.**, Numerical computation of flow and heat transfer in air-conditioned rooms by a special velocity-pressure iteration and a multigrid method, Proc. of the 3rd International Conference on Air Distribution in Rooms 'ROOMVENT-92' (Aalborg, Denmark, September 2–4, 1992), (1992) 178–199.
14. **Chen Q.**, Comparison of different k - ϵ models for indoor air flow computations, J. Numerical Heat Transfer, An International Journal of Computation and Methodology, Part B. Fundamentals. 28 (3) (1995) 353–369.
15. **Chen Q.**, Prediction of room air motion by Reynolds–Stress models, J. Building and Environment. 31 (3) (1996) 233–244.
16. **Peng S.-H., Davidson L., Holmberg S.**, The two-equation turbulence k - ω model applied to recirculating ventilation flows, Chalmers University of Technology, Sweden, Department of Thermo- and Fluid Dynamics, 1996.
17. **Davidson L., Nielsen P.V.**, Large eddy simulations of the flow in a three dimensional ventilated room, Proc. of the 5th International Conference on Air Distribution in Rooms 'ROOMVENT-96' (Yokohama, Japan, July 17–19, 1996). 2 (1996) 161–168.
18. **Davidson L.**, Implementation of a Large Eddy Simulation method applied to recirculating flow in a ventilated room, Aalborg University, Denmark, Department of Building Technology and Structural Engineering, 1996.
19. **Bennetsen J.C.**, Numerical simulation of turbulent airflow in livestock buildings, The Technical University of Denmark, The Department of Mathematical Modeling, Ph. D thesis, 1999.
20. **Voight L.K.**, Navier – Stokes simulations of airflow in rooms and around human body, International Center for Indoor Environment and Energy, Technical University of Denmark, Department of Energy Engineering, Ph. D thesis, 2000.
21. **Jiang Y., Chen Q.**, Study of natural ventilation in buildings by large eddy simulation, J. of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 89 (13) (2001) 1155–1178.
22. **Jiang Y., Su M., Chen Q.**, Using large eddy simulation to study airflows in and around buildings, ASHRAE Transactions. 109 (2) (2003) 517–526.
23. **Mora L., Gadgil A.J., Wurtz E.**, Comparing zonal and CFD model predictions of isothermal indoor airflows to experimental data, Indoor Air. 13 (2) (2003) 77–85.
24. **Ivanov N., Smirnov E., Lacor C.**, Computational fluid dynamics analysis of pollutant dispersion in a metro carriage, Proc. of the 17th Air-Conditioning and Ventilation Conference (Prague, Czech. Republic, May 17–19, 2006) (2006) 117–122.
25. **Rong L., Nielsen P.V.**, Simulation with different turbulence models in an annex 20 room benchmark test using Ansys CFX 11.0, Denmark, Aalborg University, Department of Civil Engineering, 2008. DCE Technical Report. No. 46.
26. **Dreau J.L., Heiselberg P., Nielsen P.V.**, Simulation with different turbulence models in an Annex 20 benchmark test using Star-CCM+. Denmark, Aalborg University, Department of Civil Engineering, 2013. DCE Technical Report. No. 147.
27. **Ivanov N.G., Zasimova M.A.**, Large Eddy Simulation of airflow in a test ventilated room // Journal of Physics: Conf. Series. 1038 (2018) 012136.
28. **Ivanov N.G., Zasimova M.A.**, Mean air velocity correction for thermal comfort calculation: assessment of velocity-to-speed conversion procedures using Large Eddy Simulation data, Journal of Physics: Conf. Series. 1135 (2018). 012106.
29. **Yuce B.E., Pulat E.**, Forced, natural and mixed convection benchmark studies for indoor

thermal environments, *International Communications in Heat and Mass Transfer*. 92 (March) (2018) 1–14.

30. **Van Hoof T., Blocken B.**, Mixing ventilation driven by two oppositely located supply jets with a time-periodic supply velocity: A numerical analysis using computational fluid dynamics, *Indoor and Built Environment*, Special issue – New Building Ventilation Technologies. (November) (2019) 1–18. DOI: 10.1177/1420326X19884667

31. **Piomelli U.**, Large eddy simulations in 2030

and beyond, *Phil. Trans. R. Soc. A*. 372 (2022) (2014) 20130320.

32. **Shur M.L., Spalart P.R., Strelets M.K., Travin A.K.**, A hybrid RANS LES approach with delayed-DES and wall-modelled LES capabilities, *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 29 (6) (2008) 1638–1649.

33. **Mathey F.**, Aerodynamic noise simulation of the flow past an airfoil trailing-edge using a hybrid zonal RANS-LES, *Computers & Fluids*. 37 (7) (2008) 836–843.

Received 20.04.2020, accepted 23.07.2020.

THE AUTHORS

ZASIMOVA Marina A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

zasimova_ma@spbstu.ru

IVANOV Nikolay G.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

ivanov_ng@spbstu.ru

MARKOV Detelin

Technical University of Sofia

8 Kliment Ohridsky boulevard, Sofia, 1000, Bulgaria

detmar@tu-sofia.bg

АЛГОРИТМ ФОРМИРОВАНИЯ НАЧАЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ТОМОГРАФИИ ИОНОСФЕРЫ ПРИ МЕЖСПУТНИКОВОЙ СХЕМЕ РЕГИСТРАЦИИ ДАННЫХ

П.Н. Николаев

Самарский национальный исследовательский университет
им. академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация

В работе представлен оригинальный подход к формированию начального приближения в задаче томографии ионосферы при межспутниковой схеме регистрации данных полного электронного содержания (ПЭС). Предлагается аппроксимировать прямое преобразование Радона орбитального профиля электронной концентрации (ЭК) ионосферы сверткой функции широтного распределения максимума ЭК в профиле с функцией ядра. Такая аппроксимация позволяет оценить широтное распределение максимума ЭК по данным измерения ПЭС методом деконволюции. Получено аналитическое выражение функции ядра свертки. На основе предложенного подхода рассмотрены два варианта формирования начального приближения, использующие разную априорную информацию: об индексе солнечной активности и о высоте максимума ионизации в профиле. Проанализирована точность указанного формирования по результатам статистического моделирования, проведено сравнение с известным подходом, когда известны как высота максимума ионизации в профиле, так и концентрация на этой высоте.

Ключевые слова: спутниковый мониторинг, томография ионосферы, начальное приближение; статистическое моделирование

Ссылка при цитировании: Николаев П.Н. Алгоритм формирования начального приближения в задаче томографии ионосферы при межспутниковой схеме регистрации данных // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 93–107. DOI: 10.18721/JPM.13307

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

AN ALGORITHM OF THE INITIAL APPROXIMATION FORMATION IN THE IONOSPHERIC TOMOGRAPHY PROBLEM WITH INTER-SATELLITE DATA REGISTRATION

P.N. Nikolaev

Samara National Research University,
Samara, Russian Federation

In the paper, an original approach to the formation of the initial approximation in the ionospheric tomography problem with inter-satellite registration of total electron content is presented. The direct Radon transform of the electron density (ED)'s orbital profile is proposed to approximate using convolution of the function of latitudinal distribution of ED's maximum in the profile with the kernel function. This approximation makes it possible to estimate the latitude distribution of the ED maximum from the total electron content measurements by the deconvolution procedure. An analytical expression of the convolution kernel was obtained. Based on the proposed approach, two variants of formation of the initial approximation which used different prior information, namely, on the solar activity index and on the height of the ionization maximum in the profile, were considered. An accuracy of the mentioned formation was analyzed by the results of statistical simulation, and it

was compared with the previously known approach where both the height of the ionization maximum in the profile and ED at this height were known.

Keywords: satellite monitoring, ionospheric tomography, initial estimation, statistical modeling

Citation: Nikolaev P.N., An algorithm of the initial approximation formation in the ionospheric tomography problem with inter-satellite data registration, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 93–107. DOI: 10.18721/JPM.13307

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

Введение

В последнее десятилетие интенсивно развиваются методы исследования ионосферы, которые направлены на ее дистанционное зондирование в широком диапазоне различных позиций приемопередающих систем. Последние позволяют реконструировать ее структуры на основе алгоритмов компьютерной томографии. В случае мониторинга электронной концентрации (ЭК) ионосферы оценивается полное электронное содержание (ПЭС), которое представляет собой линейный интеграл ЭК по пути распространения электромагнитной волны и выражается в единицах TECU (Total Electron Content Units, $1 \text{ TECU} = 10^{16} \text{ эл.} \cdot \text{м}^{-2}$).

Линейный интеграл от функции распределения $f(x, y)$ вдоль прямой, находящейся на расстоянии l от начала координат и составляющей угол θ с положительным направлением оси Ox , соответствует радоновскому образу в точке (l, θ) :

$$\begin{aligned} [\tilde{R}f](l, \theta) &= p(l, \theta) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) \delta(x \cos \theta + y \sin \theta - l) dx dy. \end{aligned}$$

Решение томографической задачи заключается в нахождении оценки $f^*(x, y)$ функции $f(x, y)$ из набора интегральных характеристик, полученных под всевозможными ракурсами, и предполагает, что известно точное значение $p(l, \theta)$ для всех l и θ .

Задача радиотомографии (РТ) ионосферы обычно сводится к решению систем линейных уравнений (СЛУ) [1]. Решение СЛУ в этом случае является сложной вычислитель-

ной задачей, поскольку матрица СЛУ (проекционный оператор) содержит порядка 10^6 – 10^7 элементов, хотя и является разреженной. В работах [2, 3] был предложен подход к решению задачи томографии ионосферы при межспутниковой схеме регистрации данных ПЭС, использующий алгоритм свертки.

Задача РТ ионосферы с помощью спутников характеризуется малым количеством ракурсов получения интегральной характеристики. Несмотря на широту диапазона различных позиций приемопередающих систем, будь то использование цепочки наземных приемных станций [4, 5] или предложения по использованию приемников и передатчиков космического базирования [6, 7], получаемых ракурсов все равно недостаточно для выполнения условия единственности решения, и обратная задача томографии является некорректной.

Для того чтобы свести задачу томографии к корректной, требуется использовать начальное приближение, которое будет с какой-то степенью достоверности соответствовать распределению и величинам оцениваемых значений. Так, в случае использования цепочки наземных станций, в работах [8 – 12] для построения начального приближения используется модель IRI (*англ.* International Reference Ionosphere) и распределение Чепмена.

При использовании приемников и передатчиков на спутниках системы томографии ионосферы, в работах [7, 13] начальное приближение во всей реконструированной области задавалось постоянным значением $4 \cdot 10^{11} \text{ эл.} \cdot \text{м}^{-3}$, которое является усредненным значением модельной ЭК для всех высот и

широт в области реконструкции. Однако за счет того, что ЭК экваториальной ионосферы выше, чем у среднеширотной и полярной, а также за счет смены дня и ночи при нахождении группировки то на освещенном, то на теневом участке орбиты, точность задания такого начального приближения может составлять примерно 80 – 90 %.

В работе [13] было проведено сравнение качества реконструкции ЭК группировкой, состоящей из пяти спутников, для заданного константой начального приближения и для начальных приближений, полученных по модели ионосферы IRI-2007 [14], которые в среднем отличались от модельного на 5, 10, 20 и 30 %. Использование начального приближения по модели ионосферы IRI показало лучший результат, по сравнению с начальным приближением, которое было принято константой.

В настоящей работе предлагается оригинальный подход к оперативному формированию начального приближения, значение точности которого является промежуточным между значениями точности подходов, рассмотренных выше.

При этом предлагаемый подход обладает рядом преимуществ:

- более простой математической реализацией, чем модель IRI-2007;

- он требует меньше входных данных.

В итоге спутники будут обладать большой автономностью (не нужно передавать на спутник большое количество входных данных, таких как индексы солнечной активности, ионосферный индекс, магнитный индекс).

Данный подход применим к случаю получения интегральных характеристик приемопередающими устройствами группировки спутников, расположенных в одной орбитальной плоскости.

Точность формирования начального приближения профиля ЭК ионосферы определяется на основе численного моделирования, в ходе которого решаются прямая и обратная задачи.

Прямая задача состоит в получении ПЭС для заданного распределения ЭК в плоскости орбиты для заданной радиотрассы.

Обратная задача состоит в реконструкции распределения ЭК в плоскости орбиты по имеющемуся набору измерений ПЭС, для чего формируется начальное приближение. Сформированное начальное приближение сравнивается с заданным распределением.

Для оценки точности начального приближения в настоящей работе, как и в работах [1, 7, 11], использовались нормы в пространствах l^2 и l^∞ :

$$\delta(l^2) = \frac{\sqrt{\sum_i (F_i - \tilde{F}_i)^2}}{\sqrt{\sum_i F_i^2}},$$

$$\delta(l^\infty) = \frac{\max_i |F_i - \tilde{F}_i|}{\max_i |F_i|},$$

где F, \tilde{F} – модельное распределение и сформированное начальное приближения соответственно; i – номер пикселя в распределении.

Норма $\delta(l^2)$ является среднеквадратической и фиксирует большое различие значений F и \tilde{F} в небольшой области распределения. Норма $\delta(l^\infty)$ соответствует различию F и \tilde{F} в наихудшем случае.

Постановка задачи

Рассмотрим два спутника, расположенных на одной круговой орбите, один из которых служит передатчиком, а другой – приемником (рис. 1). Спутники расположены таким образом, чтобы высота перигея их радиотрассы была ниже максимума ЭК в орбитальном профиле. Данного количества спутников достаточно для формирования начального приближения предлагаемым алгоритмом.

За базовое принято высотное распределение ЭК, близкое к распределению Чепмена [9, 10]:

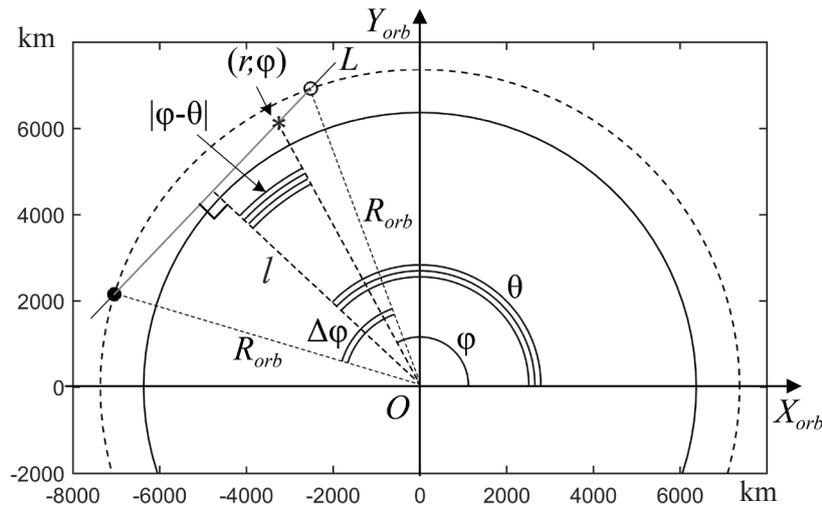


Рис. 1. Схема радиотрассы с высотой перигея $h_{track} = 225$ км; точками показано расположение двух спутников на одной круговой орбите (пунктир)

$$N_e(h, N_m, H_m) = N_m \cdot \exp\left(1 - \frac{h - H_m}{\sigma} - \exp\left(-\frac{h - H_m}{\sigma}\right)\right), \quad (1)$$

где N_m – максимальное значение ЭК N_e в высотном профиле; h – высота над уровнем моря; H_m – высота максимума ЭК над уровнем моря; σ – параметр масштаба.

Алгоритм формирования начального приближения распределения электронной концентрации в ионосфере

Рассматривается круговая полярная орбита с высотой $h_{orb} = 1000$ км и наклоном $i = 90^\circ$. Спутники расположены на орбите таким образом, чтобы угловое расстояние между ними было равно $\Delta\varphi = 54^\circ$, что соответствует наиболее разнесенным по орбите спутникам группировки, рассмотренной в книге [13] и предназначенной для решения задачи томографии в диапазоне высот 200 – 500 км. Выбранное угловое положение спутников позволяет сформировать радиотрассу между ними с высотой перигея $h_{track} = 225$ км. Данная радиотрасса пересекает слой максимума ЭК гарантированно в двух

точках, поэтому измеренное ПЭС на данной радиотрассе является наибольшим среди других ПЭС, измеренных на радиотрассах группировки [13].

В полярной системе координат (СК) линия радиотрассы между двумя спутниками, расположенными на одной орбите (рис. 1), описывается уравнением прямой

$$r(\varphi) = \frac{l}{\cos(\varphi - \theta)},$$

где l – длина перпендикуляра, опущенного на прямую радиотрассы из начала координат, $l = R_{Earth} + h_{track}$; θ – угол между положительным направлением оси OX_{orb} и направлением этого перпендикуляра; R_{Earth} – средний радиус Земли, $R_{Earth} = 6371,136$ км.

Высота максимума ЭК H_m в формуле (1) зависит от широты φ (это обусловлено меняющимися дневными и ночными условиями формирования ионосферного профиля), а также от зенитного угла Солнца [15]. Для того чтобы воспользоваться выражением (1) и провести дальнейшие аналитические выкладки для участка орбиты, где определена радиотрасса, принято допущение, что высота

максимума ЭК H_m является средней на участке $\Delta\varphi = 54^\circ$:

$$\langle H_m \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} H_m(\varphi) d\varphi,$$

где φ_1, φ_2 – угловые координаты первого и второго спутника соответственно.

При РТ с использованием цепочки наземных станций величина покрытия измерениями может составлять более 20° по широте. При этом значении широтного углового расстояния допустимо использовать начальное приближение (1) с постоянной высотой максимума ЭК, что показано в работах [11, 12]. Поскольку в настоящей работе угловое расстояние между двумя пересечениями максимума ЭК радиотрассой составляет около 20° , допущение о постоянной высоте максимума ЭК H_m на участке $\Delta\varphi = 54^\circ$ является разумным.

Таким образом, распределение ЭК (1) в плоскости орбиты передатчика и приемника на участке $\Delta\varphi$ выражается в полярной СК следующим образом:

$$N_e(r, \varphi) = N_m(\varphi) \times \exp\left(1 - \frac{r - R_m}{\sigma} - \exp\left(-\frac{r - R_m}{\sigma}\right)\right), \quad (2)$$

где φ – угловая координата в полярной СК; $r = R_{\text{Earth}} + h$ – радиальная координата в полярной СК; $R_m = R_{\text{Earth}} + \langle H_m \rangle$.

Линейный интеграл от $N_e(r, \varphi)$ по линии радиотрассы L является криволинейным в полярной СК:

$$p(l, \theta) = \int_L N_e(r, \varphi) dl = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} N_e(r(\varphi), \varphi) \cdot \sqrt{r^2 + \left(\frac{dr}{d\varphi}\right)^2} d\varphi,$$

где для малого угла $\varphi - \theta$ уравнение линии радиотрассы имеет вид

$$r(\varphi) = \frac{l}{\cos(\varphi - \theta)} \approx l \left(1 + \frac{1}{2}(\varphi - \theta)^2\right).$$

Таким образом, $p(l, \theta)$ принимает вид интеграла свертки функции N_m и ядра g (рис. 2) по параметру θ :

$$p(l, \theta) = (N_m * g)(\theta) = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} N_m(\varphi) \cdot g(\varphi - \theta) d\varphi,$$

где

$$g(z) = l \cdot (1 + z^2) \times \exp\left(1 - \frac{1}{\sigma} \cdot (l - R_m) - \frac{l}{2\sigma} z^2 - \exp\left(-\frac{1}{\sigma} \cdot (l - R_m) - \frac{l}{2\sigma} z^2\right)\right).$$

В выражении для $p(l, \theta)$ делается переход к бесконечным пределам по углу φ :

$$p(l, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} N_m(\varphi) \cdot g(\varphi - \theta) d\varphi,$$

поскольку $g(\varphi - \theta)$ экспоненциально затухает при $\varphi \rightarrow \varphi_1, \varphi_2$ (рис. 2).

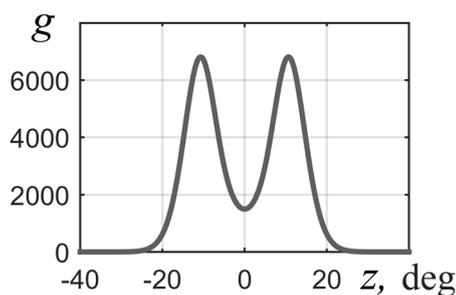


Рис. 2. Вид ядра свертки $g(z)$

Поскольку известно выражение для интеграла свертки, широтный профиль ЭК $N_m(\varphi)$ можно оценить с помощью метода деконволюции [16]:

$$\hat{N}_m(\varphi) = F^{-1} \left(\frac{G^*(f)}{|G(f)|^2 + \alpha \langle |G(f)|^2 \rangle} \cdot P(f) \right) = F^{-1}(W(f) \cdot P(f)) = (w * p)(\varphi), \quad (3)$$

где $G(f)$, $W(f)$, $P(f)$ – Фурье-образы g , w и p соответственно; $G^*(f)$ – сопряженный Фурье-образ g ; α – параметр регуляризации; $\langle |G(f)|^2 \rangle$ – среднее значение энергетического спектра $G(f)$.

При подстановке выражения (3) в формулу (2), выражение для моделирования начального приближения принимает вид

$$N_e(h, \varphi) = (w * p)(\varphi) \times \exp \left(1 - \frac{h - H_m}{\sigma} - \exp \left(-\frac{h - H_m}{\sigma} \right) \right). \quad (4)$$

Полученное выражение представляет собой произведение широтного профиля ионосферы $(w * p)(\varphi)$ и высотного профиля

$$\exp \left(1 - \frac{h - H_m}{\sigma} - \exp \left(-\frac{h - H_m}{\sigma} \right) \right),$$

из которого следует, что широтный и высотный профили можно найти раздельно.

Если широтный профиль можно найти по формуле (3), то высотный профиль возможно сформировать при различных допущениях, что повлияет на итоговую точность формирования начального приближения.

Таким образом, на базе выражения (4) можно предложить два варианта алгоритма формирования начального приближения ЭК.

Вариант 1. Высота принимается средней по орбите $H_m = \langle H_m \rangle$. Тогда

$$N_e(h, \varphi) = (w * p)(\varphi) \times \exp \left(1 - \frac{h - \langle H_m \rangle}{\sigma} - \exp \left(-\frac{h - \langle H_m \rangle}{\sigma} \right) \right). \quad (5)$$

Вариант 2. Высота H_m априорно известна. Тогда

$$N_e(h, \varphi) = (w * p)(\varphi) \times \exp \left(1 - \frac{h - H_{m \text{ apr}}}{\sigma} - \exp \left(-\frac{h - H_{m \text{ apr}}}{\sigma} \right) \right). \quad (6)$$

Оценить эффективность предложенных вариантов можно численным образом, если использовать стохастический подход и сравнить результат работы алгоритма с модельным распределением.

Результаты и их обсуждение

Оценка точности формирования начального приближения по результатам статистического моделирования. Проведем сравнение двух предложенных вариантов формирования начального приближения профиля ЭК ионосферы в плоскости орбиты спутников с одним известным. Здесь возможны три случая (случай *II* и *III* соответствуют вариантам 1 и 2).

I случай. Формирование начального приближения по формуле (1), когда априорно заданы параметры N_m и H_m (данный способ рассмотрен в работах [11, 12]);

II случай. Формирование начального приближения по формуле (5), когда $H_m = \langle H_m \rangle$;

III случай. Формирование начального приближения по формуле (6), когда величина H_m априорно известна.

Для оценки точности трех представленных случаев формирования начального приближения проведено статистическое моделирование распределения ЭК в плоскости полярной орбиты (10 тыс. численных экспериментов) для различных индексов солнечной активности, месяца, времени по Гринвичу, а также географической долготы. Рассмотрена круговая полярная орбита двух спутников с высотой $h_{orb} = 1000$ км и наклоном $i = 90^\circ$. Угловое расстояние между спутниками считается постоянным и составляет $\Delta\varphi = 54^\circ$, что соответствует высоте перигея их радиотрассы $h_{track} = 200$ км. При движении спутников по орбите регистрация ПЭС производилась каждые $0,5^\circ$.

Распределение ЭК задавалось с помощью модели ионосферы NeQuick [17]:

вертикальный размер элемента изображения – 12,5 км;

горизонтальный размер элемента изображения – 50 км.

Остальные параметры модели распределялись по равномерному закону:

индекс солнечной активности $F_{10.7} \in [63,7; 193] \cdot 10^{-22} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{Гц}^{-1}$;

месяц $m \in [1; 12]$;

время по Гринвичу $t \in [0:00; 24:00]$ UTC;

географическая широта (долгота восходящего узла орбиты) $\lambda \in (0; 360]^\circ$.

Разброс параметров модели NeQuick обуславливает разброс ошибок формирования начального приближения. Параметр масштаба σ выбирался с учетом индекса солнечной активности $F_{10.7}$ из диапазона от 84 до 93 км.

Результаты моделирования алгоритма формирования начального приближения для первого случая (проведено 10 тыс. моделирований распределения ЭК) представлены на рис. 3. Средние ошибки в этом ряде численных экспериментов в метриках l^2 и l^∞ составляют $\delta(l^2) = 0,23$ и $\delta(l^\infty) = 0,27$ соответственно. Этот результат является верхней оценкой точности формирования начального приближения среди трех рассмотренных случаев, поскольку параметры N_m и H_m принимались априорно известными.

На рис. 4, *a* представлен пример одной из 10 тыс. реализаций распределения ЭК, сфор-

мированной по модели NeQuick для следующих условий:

индекс солнечной активности – $F_{10.7} = 127,6 \cdot 10^{-22} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{Гц}^{-1}$;

месяц – октябрь;

время по Гринвичу $t = 10 : 00$;

географическая широта (долгота восходящего узла орбиты) – $\lambda = 50^\circ$.

На рис. 4, *b, c* приведены начальное приближение, сформированное для I случая, и модуль невязки между модельным и сформированным распределением для этой реализации.

В рамках моделирования для II и III случаев (см. выше) оценивались широтный профиль ЭК $\hat{N}_m(\varphi)$ по формуле (3) (рис. 5, кривая *c*) для модельного распределения (рис. 4, *a*). Значение параметра регуляризации α в формуле (3) подбиралось исходя из критерия минимизации невязки:

$$d = \left\| \hat{N}_{m\alpha} - N_m \right\| \rightarrow \min.$$

Для сравнения на рис. 5 приведены графики исходного широтного профиля $N_m(\varphi) \Big|_{H_m=H_m(\varphi)}$ модельного распределения (кривая *a*) и широтного профиля модельного распределения для средней высоты $N_m(\varphi) \Big|_{H_m=\langle H_m \rangle}$ (кривая *b*).

Разница между профилем *a* и профилями *b, c* на рис. 5 в метриках l^2 и l^∞ представлена в табл. 1.

Из полученных результатов видно, что зна-

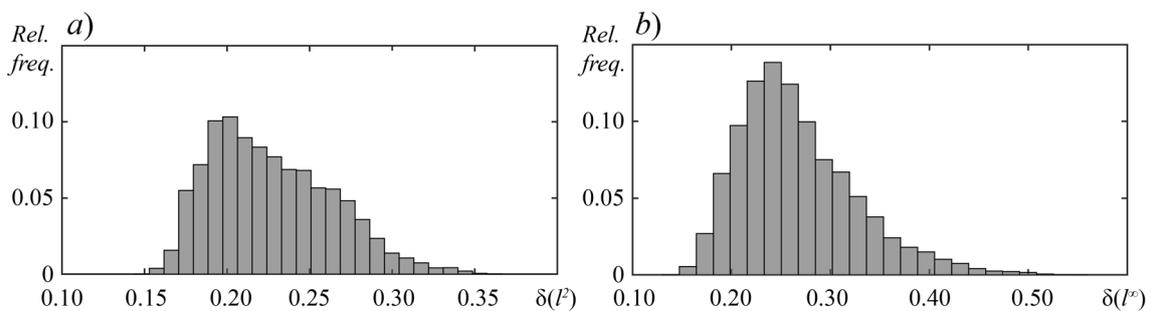


Рис. 3. Гистограммы ошибок формирования начального приближения по известным параметрам (I случай) в метриках l^2 (*a*) и l^∞ (*b*)

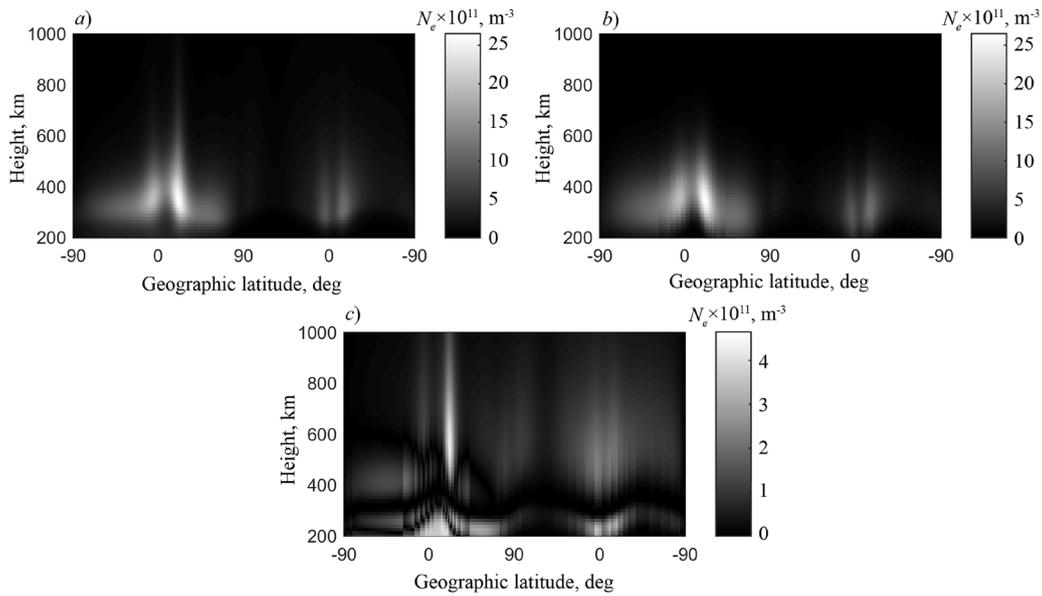


Рис. 4. Распределения ЭК в ионосфере в плоскости полярной орбиты в координатах широта-высота: *a* – модельное распределение; *b* – начальное приближение, сформированное по формуле (1) при известных N_m и H_m ; *c* – модуль невязки

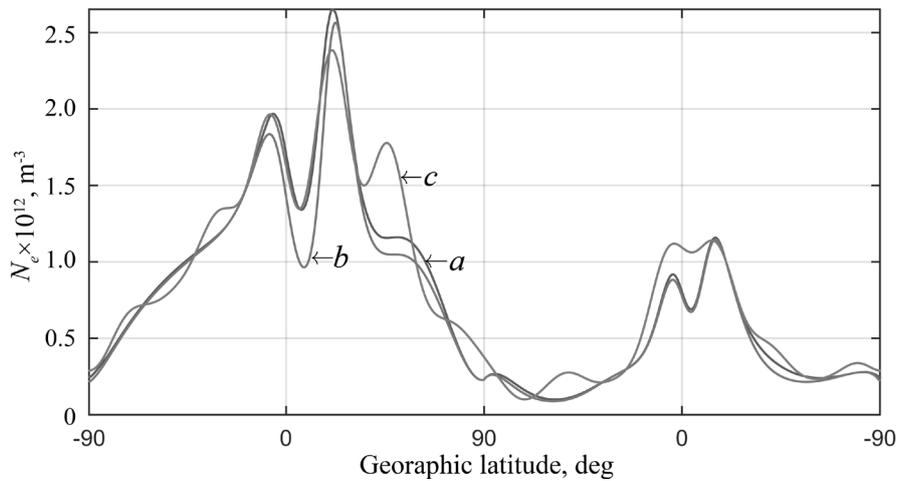


Рис. 5. Широтные профили ЭК: исходный $N_m(\varphi)|_{H_m=\langle H_m \rangle}$ (*a*); $N_m(\varphi)|_{H_m=\langle H_m \rangle}$, взятый для средней высоты (*b*); $\hat{N}_m(\varphi)$, рассчитанный по формуле (3) (*c*)

чения широтного профиля $N_m(\varphi)|_{H_m=\langle H_m \rangle}$ для средней высоты $\langle H_m \rangle$ можно использовать в качестве значений для широтного профиля $N_m(\varphi)|_{H_m=H_m(\varphi)}$. Эта возможность используется при формировании начального приближения для III случая, где значения $\hat{N}_m(\varphi)$ задаются на априорно известных высотах H_m .

Индекс солнечной активности $F_{10,7}$ определяет форму профиля ЭК и высоту макси-

муму в нем [15]; следовательно, среднюю высоту максимума ЭК можно приближенно описать линейной зависимостью

$$\langle H_m \rangle(F_{10,7}) = a \cdot F_{10,7} + b \pm \Delta \langle H_m \rangle,$$

где $a = 0,65 \cdot 10^{16} \text{ км}^3 \cdot \text{Гц}^{-1} \cdot \text{Вт}^{-1}$; $b = 243,4 \text{ км}$; $\Delta \langle H_m \rangle = 18,7 \text{ км}$ – разброс средней высоты, зависящий от сезонных и суточных эффектов для $P = 0,95$.

Если сезонные и суточные эффекты в ионосфере не принимать во внимание, то можно отбросить слагаемое $\Delta\langle H_m \rangle$ и определять $\langle H_m \rangle$ во втором варианте алгоритма как $\langle H_m \rangle = a \cdot F_{10,7} + b$.

На рис. 6 показаны гистограммы распределения ошибок формирования начального приближения в метриках l^2 и l^∞ , сформированных для II и III случаев для 10 тыс. численных экспериментов. На рис. 7 приведены сформированное начальное приближение и модуль невязки между модельным и сформированным распределениями для II и III случаев формирования начального приближения для реализации, приведенной на рис. 4, а.

В табл. 2 приведены ошибки формиро-

вания начального приближения для трех рассмотренных случаев модельного распределения (см. рис. 4, а). II и III случаи показывают примерно одинаковую точность, несмотря на заметное визуальное различие (см. рис. 7, а, с).

Согласно результатам статистического моделирования (рис. 6), II случай имеет средние ошибки формирования начального приближения $\delta(l^2) = 0,39$ и $\delta(l^\infty) = 0,42$. Достигаемой точности достаточно для удовлетворительного решения томографической задачи, ошибки решения которой не будут превышать ошибки при взятом константой начальном приближении [13] (точность решения томографической задачи $\delta(l^2) = 0,35$ и

Т а б л и ц а 1
Сравнение отклонений δ широтных профилей (в двух метриках), полученных двумя способами, от истинного широтного профиля

Метрика	Ошибка δ	
	$N_m(\varphi) _{H_m=\langle H_m \rangle}$	$\hat{N}_m(\varphi)$
l^2	0,10	0,16
l^∞	0,19	0,23

Обозначения. $N_m(\varphi)|_{H_m=\langle H_m \rangle}$, $\hat{N}_m(\varphi)$ – широтные профили: взятый для средней высоты и рассчитанный по формуле (3). Истинный широтный профиль – $N_m(\varphi)|_{H_m=H_m(\varphi)}$

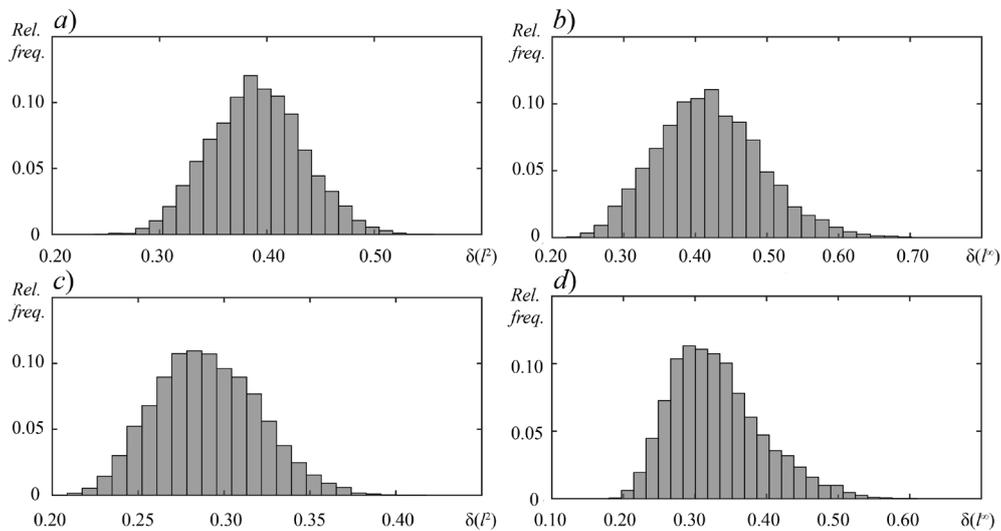


Рис. 6. Гистограммы ошибок формирования начального приближения в метриках l^2 (а) и l^∞ (б) для II случая, а также l^2 (с) и l^∞ (д) для III случая

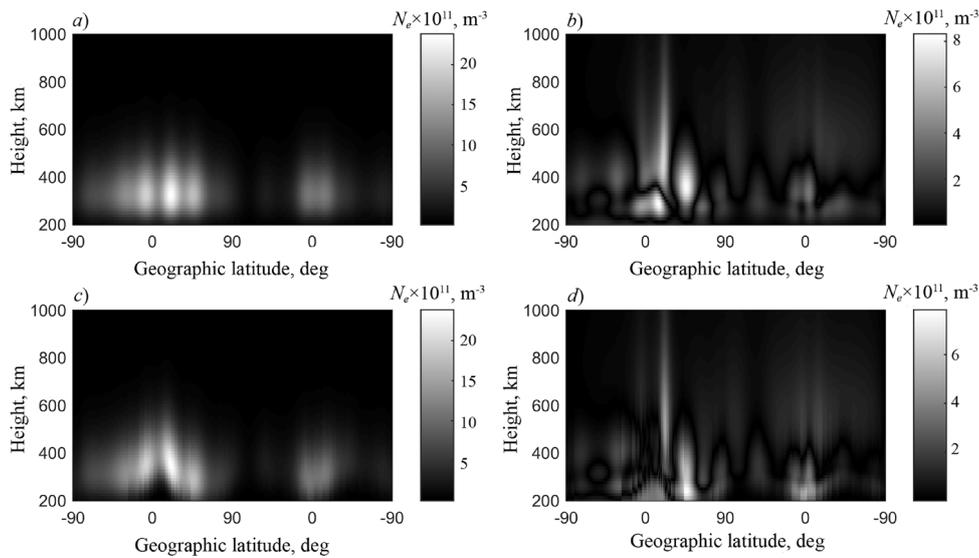


Рис. 7. Распределения ЭК в ионосфере в плоскости полярной орбиты в координатах широта-высота, полученные в начальных приближениях, сформированных по формуле (4) для двух значений высоты: средней $\langle H_m \rangle$ (a) и априорно известной H_m (c); представлены также соответствующие модули невязки: для случаев с $\langle H_m \rangle$ (b) и с H_m (d)

Т а б л и ц а 2
Ошибки формирования начального приближения в двух метриках для трех рассмотренных случаев для модельного распределения (см. рис. 4, a)

Метрика	Ошибка δ		
	N_m и H_m известны	$N_m = \hat{N}_m(\varphi)$, H_m известна	$N_m = \hat{N}_m(\varphi)$, $H_m = \langle H_m \rangle$
l^2	0,18	0,31	0,30
l^∞	0,18	0,30	0,25

$\delta(l^\infty) = 0,40$ для шага реконструкции по высоте в 50 км). Точность формирования начального приближения для III случая выше, чем для II: $\delta(l^2) = 0,29$ и $\delta(l^\infty) = 0,33$, что приближает этот случай к начальному приближению, сформированному по модели IRI-2007 в работе [13] при получении интегральных характеристик приемопередающими устройствами группировки спутников. Оба предложенных варианта алгоритма (случаи II и III) формирования начального приближения являются быстродействующими и могут быть реализованы на борту спутника.

Реконструкция распределения ЭК в ионосфере. Для оценки качества формирова-

ния начального приближения проводилась томографическая реконструкция распределения ЭК с применением подхода, предложенного в работах [2, 3]. В качестве схемы регистрации ПЭС использовалась конфигурация размещения спутников на низкой орбите, описанная в работе [3]: три спутника с передатчиками и два с приемниками, радиотрассы которых покрывают диапазон высот от 200 до 500 км с шагом 50 км. Задача томографии решалась в этом диапазоне высот.

На рис. 8 показаны гистограммы распределения ошибок реконструкции профиля ЭК в метриках l^2 и l^∞ , полученных для трех случаев формирования начального приближения (вы-

ражения (2), (5), (6) для 10 тыс. численных экспериментов. I случай, когда N_m и H_m заданы априорно, обеспечивает наилучшие по точности характеристики результата реконструкции (см. рис. 8, *a, b*) среди всех трех случаев формирования начального приближения, базирующихся на распределении Чепмена. На рис. 9 приведены результаты восстановления распределения ЭК для II и III случаев формирования начального приближения. Ошибки реконструкции $\delta(l^P)$ и $\delta(l^C)$ для соответствующих случаев приведены в табл. 3.

На рис. 9, *c, d* и *e, f*, соответствующих II ($N_m = \hat{N}_m(\varphi)$, $H_m = \langle H_m \rangle$) и III ($N_m = \hat{N}_m(\varphi)$, H_m известна) случаям формирования начального приближения, видно, что полученные реконструкции имеют сходный вид и раз-

личаются лишь небольшим количеством артефактов; при этом ошибка реконструкции обусловлена, в основном, ошибкой восстановления широтного профиля $\hat{N}_m(\varphi)$. В свою очередь, артефакты, получившиеся на высоте 200 км, обусловлены методической ошибкой реконструкции [2, 3]. Во II случае ($N_m = \hat{N}_m(\varphi)$, $H_m = \langle H_m \rangle$) высотное положение максимума ЭК H_m восстановилось с удовлетворительной точностью, несмотря на сделанное допущение $H_m = \langle H_m \rangle$, и по этой причине использование этого способа (II случай) предпочтительнее перед использованием III ($N_m = \hat{N}_m(\varphi)$, H_m известна), прежде всего потому, что ошибки реконструкции при формировании начального приближения для этого случая меньше (см. рис. 8, *c - f*).

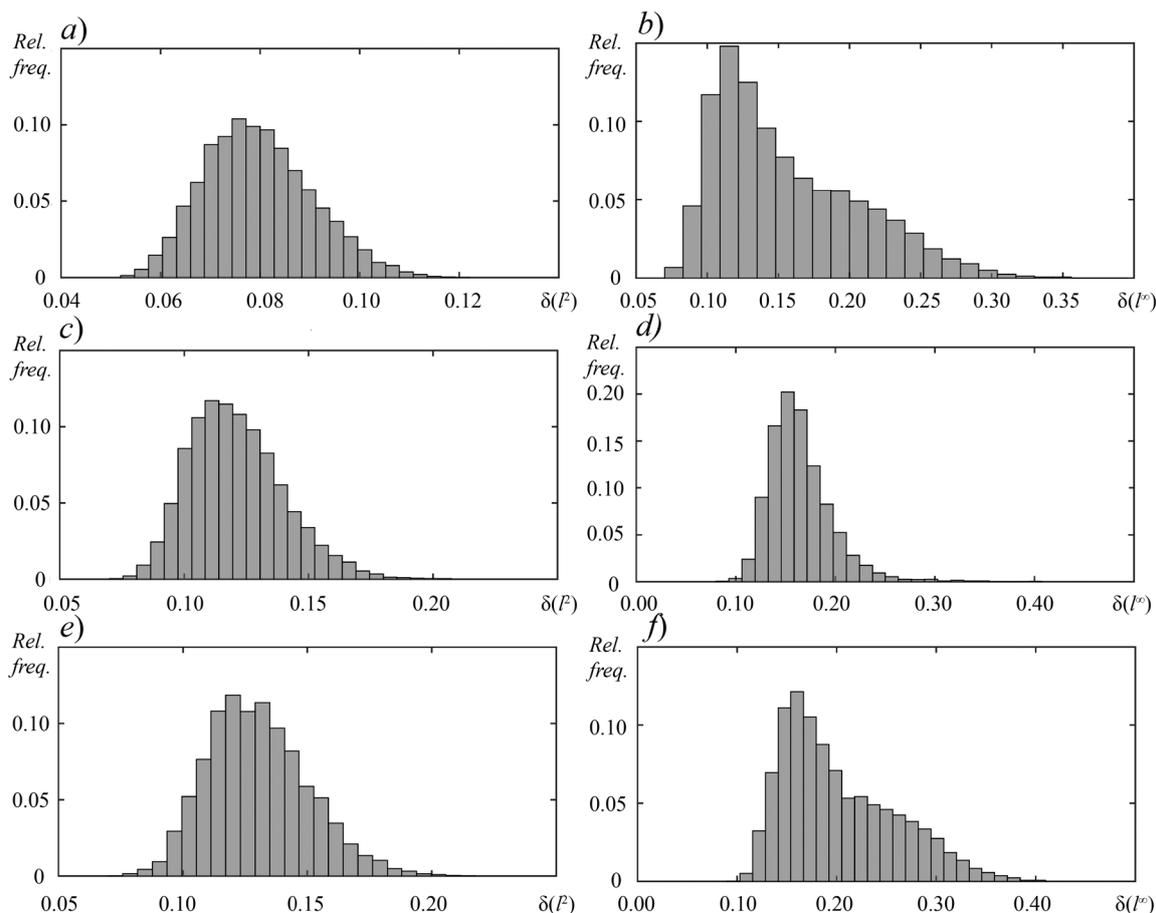


Рис. 8. Гистограммы ошибок реконструкции профиля ЭК для трех случаев формирования начального приближения в двух метриках: l^P (*a, c, e*) и l^C (*b, d, f*); рассмотрены случаи I (*a, b*), II (*c, d*), III (*e, f*) (см. пояснения в тексте)

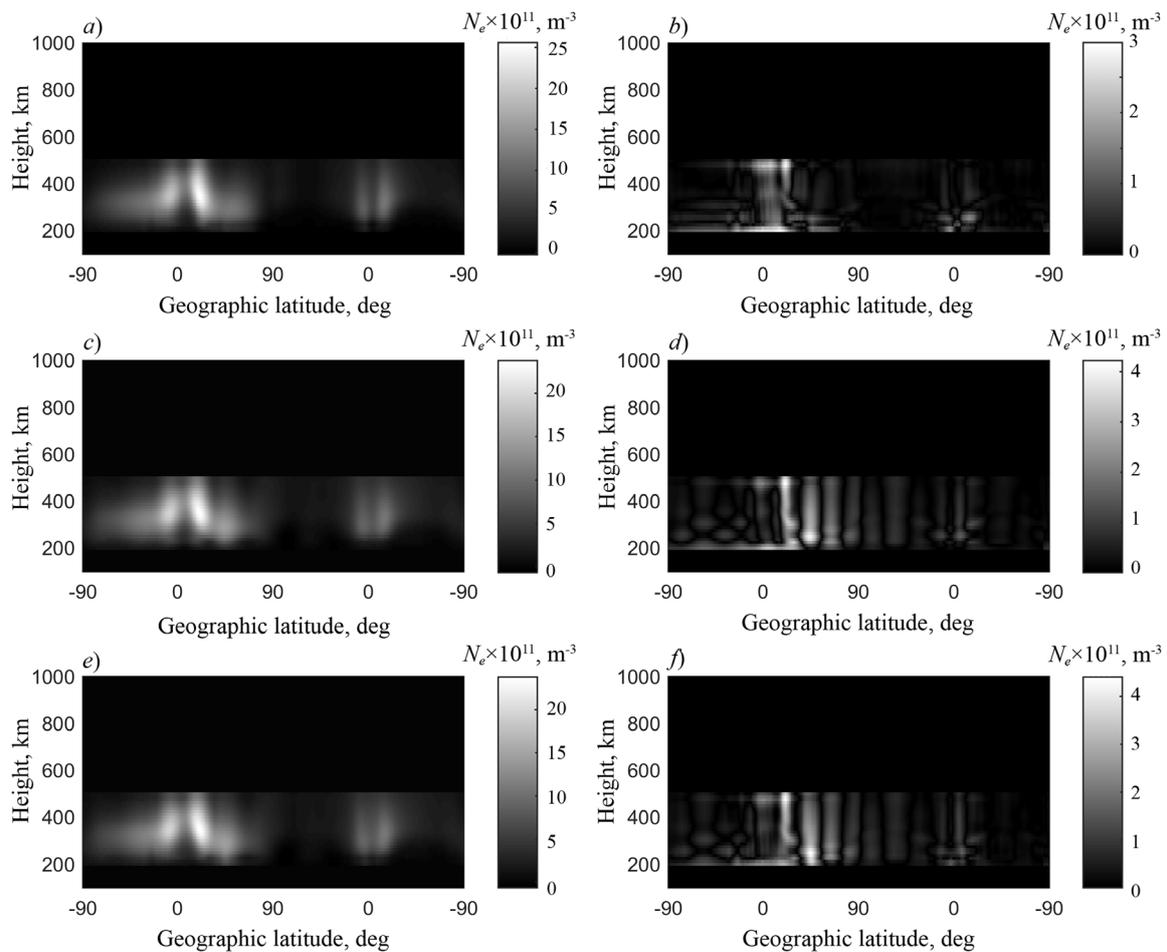


Рис. 9. Реконструкции распределения ЭК в ионосфере в плоскости полярной орбиты в координатах широта-высота для трех случаев формирования начального приближения: I (a), II (c), III (e); представлены также соответствующие модули невязки для случаев I (b), II (d), III (f)

Т а б л и ц а 3

Сравнение ошибок реконструкции профиля ЭК в двух метриках для трех рассмотренных случаев формирования начального приближения для модельного распределения (см. рис. 4, a)

Метрика	Ошибка δ		
	N_m и H_m известны	$N_m = \hat{N}_m(\varphi)$, H_m известна	$N_m = \hat{N}_m(\varphi)$, $H_m = \langle H_m \rangle$
l^2	0,08	0,13	0,12
l^∞	0,11	0,18	0,16

Заключение

Разработан численный алгоритм формирования начального приближения профиля ЭК, который используется в задаче радиотомографии ионосферы низкоорбитальной спутниковой группировкой. Начальное при-

ближение, формирующееся в алгоритме, базируется на распределении Чепмена и представляется в виде произведения двух множителей, отвечающих за широтное и высотное распределения.

Получена приближенная аналитическая



зависимость широтного профиля ЭК от измерений данных ПЭС при межспутниковой схеме их регистрации в плоскости полярной орбиты.

Показано, что для оценки широтного профиля требуется всего два спутника, разнесенных на орбите таким образом, чтобы высота перигея их радиотрассы была ниже высоты максимума ЭК в орбитальном профиле.

Установлено, что широтное распределение вносит наибольший вклад в итоговый результат оценки ЭК.

Выполнено статистическое моделирование, которое показало, что ошибки формирования начального приближения орбитального профиля ЭК ионосферы, при использовании измерения ПЭС, в метрике l^2 лежат в диапазоне от 20 до 55 % (ошибки реконструкции профиля ЭК в метрике l^2 лежат в диапазоне от 8 до 20 %), в то время как ошибки формирования начального приближения моделями NeQuick и IRI-2007 достигают 30 % (ошибки реконструкции профиля ЭК в метрике l^2 лежат в диапазоне от 11 до 20%), а

ошибки формирования начального приближения, когда оно задается постоянной величиной, соответствующей среднему уровню ЭК, достигают 90 % (ошибки реконструкции профиля ЭК в метрике l^2 лежат в диапазоне от 35 до 40 %).

Разработанный алгоритм позволяет использовать реальные измерения ПЭС для формирования начального приближения, тем самым учитывать краткосрочные возмущения в ионосфере, которые напрямую не учитываются моделями NeQuick и IRI-2007.

Кроме того, предлагаемый алгоритм обладает более простой математической реализацией, чем эти модели, и требует меньшего объема входных данных, позволяя решать задачу формирования начального приближения на борту.

Работа выполнена в рамках проекта FSSS-2020-0018, финансируемого из средств государственного задания, для победителей конкурса научных лабораторий образовательных организаций высшего образования, подведомственных Минобрнауки России.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Куницын В.Е., Терещенко Е.Д., Андреева Е.С.** Радиотомография ионосферы. М.: Физматлит, 2007. 336 с.
2. **Николаев П.Н.** Метод реконструкции электронной концентрации в ионосфере по схеме регистрации данных спутник-спутник // 15-я Конференция молодых ученых «Фундаментальные и прикладные космические исследования». Сб. трудов. Под ред. А.М. Садовского. Сер. «Механика, управление и информатика». М.: ИКИ РАН, 2018. С. 73–80.
3. **Филонин О.В., Николаев П.Н.** Алгоритм свертки как метод восстановления двумерного распределения электронной концентрации ионосферы в плоскости орбиты группировки спутников // Известия вузов. Приборостроение. 2019. Т. 62. № 5. С. 462–469.
4. **Austen J.R., Franke S.J., Liu C.H.** Ionospheric imaging computerized tomography // Radio Science. 1988. Vol. 23. No. 3. Pp. 299–307.
5. **Афраймович Э.Л., Пирог О.М., Терехов А.И.** Диагностика крупномасштабных структур высокоширотной ионосферы на основе томографической обработки сигналов навигационных ИСЗ и данных ионосферных станций. Препринт СибИЗМИР СО АН СССР, 1989. 18 с.
6. **Романов А.А., Трусов С.В., Аджалова А.В., Романов А.А., Урличич Ю.М.** Способ мониторинга вертикального распределения электронной концентрации ионосферы. Патент РФ № 2445652; опубл. 20.03.2012; бюлл. № 8.
7. **Романов А.А., Трусов С.В., Новиков А.В., Аджалова А.В., Романов А.А., Селин В.А.** Восстановление двумерного распределения электронной концентрации ионосферы в плоскости орбиты низкоорбитальных ИСЗ на основе анализа характеристик когерентного излучения // Вопросы электромеханики. Труды НПП ВНИИЭМ. М.: ФГУП «НПП ВНИИЭМ», 2009. Т. 111. С. 37–42.
8. **Raymund T. D., Austen J.R., Franke S.J.,**

Lin C.H., Klobuchar J.A., Sralker J. Application of computerized tomography to the investigation of ionospheric structures // *Radio Science*. 1990. Vol. 25. No. 5. Pp. 771–789.

9. **Heaton J.A., Jones G.O., Kersley L.** Toward ionospheric tomography in place Antarctica: first steps and comparison with dynasonde observations // *Antarctic Science*. 1996. Vol. 8. No. 3. Pp. 297–302.

10. **Mitchell C.N., Kersley L., Heaton J.A.T., Pryse S.E.** Determination of the vertical electron-density profile in ionospheric tomography: experimental results // *Annales Geophysicae*. 1997. Vol. 15. No. 6. Pp. 747–752.

11. **Терещенко Е.Д., Худукон Б.З., Романова Н.Ю., Галахов А.А., Мельниченко Ю.А., Сухоруков В.М.** Радиотомографические наблюдения электронной плотности ионосферы на меридиане архипелага Шпицберген – Кольский полуостров – Карелия // *Письма в ЖЭТФ*. 2003. Т. 78. № 11. С. 1221–1222.

12. **Romanov A.A., Trusov S.V., Romanov A.A.** Automated information technology for iono-

sphere monitoring on the low-orbit navigation satellite signals // *The 4th PICES Workshop on the Okhotsk Sea and Adjacent Areas (August 27–29, 2008, Abashiri, Japan)*. Pp. 203–207.

13. **Романов А.А., Романов А.А., Трусов С.В., Урличич Ю.М.** Спутниковая радиотомография ионосферы. М.: Физматлит, 2013. 296 с.

14. International Reference Ionosphere. Режим доступа: <http://irimodel.org> (Дата обращения 17.07.2019).

15. **Zolesi B., Cander L.R.** Ionospheric prediction and forecasting. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2014. 240 p.

16. **Wen W., Kalkan E.** System identification based on deconvolution and cross correlation an application to a 20-story instrumented building in Anchorage, Alaska // *Bulletin of the Seismological Society of America*. 2017. Vol. 107. No. 2. Pp. 718–740.

17. **Giovanni G.Di, Radicella S.M.** An analytical model of the electron density profile in the ionosphere // *Advances in Space Research*. 1990. Vol. 10. No. 11. Pp. 27–30.

Статья поступила в редакцию 17.07.2019, принята к публикации 27.07.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

НИКОЛАЕВ Петр Николаевич – кандидат физико-математических наук, ассистент межвузовской кафедры космических исследований Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация.

443086. Российская Федерация, г. Самара, Московское шоссе, 34
nikolaev.pn@ssau.ru

REFERENCES

1. **Kunitsyn V.E., Tereshchenko E.D., Andreeva E.S.**, Radiotomografiya ionosfery [Radio-tomography of ionosphere], Fizmatlit, Moscow, 2007. (in Russian)

2. **Nikolaev P.N.**, Method for reconstruction ionospheric electron density under inter-satellite data registration scheme, Proceedings of the XV Young Scientists Conference “Fundamental and Applied Space Researches”, Ed. A.M. Sadovskii, IKI RAN, Moscow, April 11–13, 2018, (2018) 73–80. (in Russian)

3. **Filonin O.V., Nikolayev P.N.**, Convolution algorithm as the method for reconstruction of

two-dimensional electron density distribution in the satellite constellation orbital plane, *Journal of Instrument Engineering*. 62 (5) (2019) 462–469. (in Russian)

4. **Austen J.R., Franke S.J., Liu C.H.**, Ionospheric imaging computerized tomography, *Radio Science*. 23 (3) (1988) 299–307.

5. **Afraymovich E.L., Pirog O.M., Terekhov A.I.**, Diagnostics of large-scale structures of the high-latitude ionosphere based on tomographic signal processing of navigation satellites and data of ionospheric stations, Preprint of Siberian Institute of Terrestrial Magnetism, Ionosphere and Radio



Wave Propagation, 1989.

6. **Romanov A.A., Trusov S.V., Adzhalova A.V., et al.**, Method of monitoring vertical distribution of ionospheric electron concentration, Pat. No. 2445652; Russian Federation, MPK G01V 3/12 (2006.01) G01S 13/95 (2006.01); Otkrytoe aktsionernoe obshchestvo "Rossijskaja korporatsija raketno-kosmicheskogo priborostroeniya i informatsionnykh sistem" (OAO "Rossijskie kosmicheskie sistemy") (RU) is a declarant and patentee. No. 2010126414/28, publ. 20.03.2012, Bull. No. 8.

7. **Romanov A.A., Trusov S.V., Novikov A.V., et al.**, Reconstruction of the two-dimensional distribution of the electron concentration of the ionosphere in the orbital plane of low-orbit satellite based on the analysis of the characteristics of coherent radiation, Electromechanical Matters, VNIEM Studies, Moscow. 111 (2009) 37–42. (in Russian)

8. **Raymund T. D., Austen J.R., Franke S.J., et al.**, Application of computerized tomography to the investigation of ionospheric structures, Radio Science. 25 (5) (1990) 771–789.

9. **Heaton J.A., Jones G.O., Kersley L.**, Toward ionospheric tomography in place Antarctica: first steps and comparison with dynasonde observations, Antarctic Science. 8 (3) (1996) 297–302.

10. **Mitchell C.N., Kersley L., Heaton J.A.T., Pryse S.E.**, Determination of the vertical electron-density profile in ionospheric tomography: experimental results, Annales Geophysicae. 15 (6)

(1997) 747–752.

11. **Tereshchenko E.D., Khudukon B.Z., Romanova N.Y., et al.**, Radiotomographic observations of the ionosphere electron density at the Spitsbergen Archipelago-Kola Peninsula-Karelia meridian, Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters, 78 (11) (2003) 707–708.

12. **Romanov A.A., Trusov S.V., Romanov A.A.**, Automated information technology for ionosphere monitoring on the low-orbit navigation satellite signals, Proceedings of the 4th PICES Workshop on the Okhotsk Sea and Adjacent Areas (August 27–29, 2008, Abashiri, Japan). 203–207.

13. **Romanov A.A., Romanov A.A., Trusov S.V., Urlichich Yu.M.**, Sputnikovaya radiotomografiya ionosfery [Satellite radio tomography of the ionosphere], Moscow, Fizmatlit, 2013.

14. International Reference Ionosphere, <http://irimodel.org>. Accessed July 17, 2019.

15. **Zolesi B., Cander L.R.**, Ionospheric prediction and forecasting, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2014.

16. **Wen W., Kalkan E.**, System identification based on deconvolution and cross correlation an application to a 20-story instrumented building in Anchorage, Alaska, Bulletin of the Seismological Society of America. 107 (2) (2017) 718–740.

17. **Giovanni G.Di, Radicella S.M.**, An analytical model of the electron density profile in the ionosphere, Advances in Space Research. 10 (11) 27–30.

Received 17.07.2019, accepted 27.07.2020.

THE AUTHOR

NIKOLAEV Petr N.

Samara National Research University

34 Moskovskoye Ave., Samara, 443086, Russian Federation

nikolaev.pn@ssau.ru

DOI: 10.18721/JPM.13308
УДК 532.5.013.13:532.526

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КРУПНОМАСШТАБНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ НА ЛАМИНАРНО-ТУРБУЛЕНТНЫЙ ПЕРЕХОД В СВОБОДНОКОНВЕКТИВНОМ СЛОЕ НА ВЕРТИКАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Ю.С. Чумаков, Е.Ф. Храпунов, А.Д. Малых

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

В работе описываются результаты экспериментального исследования свободноконвективного пограничного слоя на вертикальной нагретой поверхности, причем особое внимание уделяется изучению зоны ламинарно-турбулентного перехода, определению границ этой зоны. Основная цель данного исследования – найти возможность управления процессами перехода, воздействуя на них различными крупномасштабными препятствиями, расположенными в области ламинарного участка пограничного слоя. Генератором свободноконвективного потока служила вертикальная алюминиевая пластина шириной 90 см и высотой 4,95 м. На основании полученных результатов можно с уверенностью утверждать, что с помощью крупномасштабных препятствий удастся заметно сократить протяженность зоны перехода и тем самым приблизить начало области с развитым турбулентным теплообменом к передней кромке поверхности. Таким образом, препятствия можно рассматривать как пассивные элементы для управления интенсивностью теплообмена.

Ключевые слова: свободная конвекция, ламинарно-турбулентный переход, теплообмен, свободноконвективный пограничный слой, экспериментальное исследование

Ссылка при цитировании: Чумаков Ю.С., Храпунов Е.Ф., Малых А.Д. Экспериментальное исследование влияния крупномасштабных возмущений на ламинарно-турбулентный переход в свободноконвективном слое на вертикальной поверхности // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 108–118. DOI: 10.18721/JPM.13308

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

THE EFFECT OF LARGE-SCALE DISTURBANCES ON THE LAMINAR-TURBULENT TRANSITION IN A FREE-CONVECTIVE LAYER ON A VERTICAL SURFACE: AN EXPERIMENTAL STUDY

Yu.S. Chumakov, E.F. Khrapunov, A.D. Malykh

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

The results of an experimental study of a free convective boundary layer on a vertical heated surface are presented in this paper. Particular attention has been paid to investigation of the laminar-turbulent transition zone and determination of the zone boundaries. The main goal of the present work was to find the opportunity of the transition processes' control by using various large-scale obstacles located in the region of the laminar section of the boundary layer. A vertical aluminum plate 90 cm wide and 4.95 m high served as a free-convection flow generator. Based on the obtained results, it is safe to state that there is a possibility of a significant reduction in the length of the transition zone through the use of large-scale obstacles. This way permits the beginning of the region with developed

turbulent heat transfer to be moved nearer to the front edge of the surface. Thus, these obstacles can be considered as passive elements for controlling the heat transfer intensity.

Keywords: natural convection, laminar-turbulent transition, heat transfer, natural convective boundary layer, experimental study

Citation: Chumakov Yu.S., Khrapunov E.F., Malykh A.D., The effect of large-scale disturbances on the laminar-turbulent transition in a free-convective layer on a vertical surface: an experimental study, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 108–118. DOI: 10.18721/JPM.13308

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

Введение

Исследованию особенностей развития вынужденно-конвективного пограничного слоя под действием различного рода внешних факторов посвящено довольно много работ. Обнаружено, в частности, что в случае малой интенсивности внешних возмущений не удастся заметно повлиять на переходные процессы в пограничном слое. Резкого ускорения развития нестационарных процессов и турбулизации пристенного слоя можно добиться с помощью крупномасштабных трехмерных препятствий (так называемые элементы макрошероховатости), располагая их в области ламинарного участка пограничного слоя. Подобные макрошероховатости широко используются для управления ламинарно-турбулентным переходом (далее ЛТП) в вынужденно-конвективных течениях. Например, их применяют с целью получения относительно толстого пограничного слоя в ландшафтных аэродинамических трубах для моделирования процессов обтекания различных объектов приземным пограничным слоем [1].

Если для вынужденно-конвективных течений можно считать, что накоплен достаточно большой опыт численного и физического моделирования способов управления ЛТП с помощью элементов макрошероховатости, то применительно к свободноконвективным течениям подобных работ очень мало. Так например, результаты прямого численного моделирования турбулентности, развивающейся в свободноконвективном слое за макровыступами, представлены пока только в работе [2], а результаты физи-

ческого моделирования нам вообще неизвестны. Хотя вполне естественно предполагать, что, создавая соответствующие условия для внезапного, «триггерного» возбуждения турбулентности в пограничном слое, можно существенно сократить область ЛТП, протяженность которого, при отсутствии возмущений, в два-три раза превышает протяженность ламинарного участка пограничного слоя [3 – 5]. В свою очередь, сокращая протяженность области ЛТП, мы увеличиваем протяженность области турбулентного теплообмена, и тем самым увеличивается интенсивность теплообмена в целом.

В настоящей работе описываются результаты экспериментального исследования зоны ЛТП в свободноконвективном пограничном слое около вертикальной нагретой пластины, на поверхности которой расположен поперечный ряд крупномасштабных трехмерных выступов, возмущающих исходно ламинарный слой. Для сравнения приводятся также данные измерений, полученные в случае гладкой пластины.

Постановка задачи

Основная цель данного исследования заключалась в изучении возможности управления процессами перехода в свободноконвективном пограничном слое, путем воздействия на него различными крупномасштабными препятствиями, расположенными в области ламинарного участка пограничного слоя.

В качестве препятствий использовались пластинки толщиной 8 мм двух видов: прямоугольного сечения 32×18 мм и трапециевидного сечения высотой 18 мм, у которого

нижнее основание имело длину 32 мм, а верхнее – 16 мм. Препятствия приклеивались к пластине поперек вертикальной оси на расстоянии 200 мм от нижней кромки пластины с шагом 32 мм. Схематичное изображение пластинок, а также фотография препятствий, установленных на нагреваемой поверхности, представлены на рис. 1.

Высота препятствий H выбиралась исходя из оценки толщины невозмущенного ламинарного пограничного слоя в том месте, где предполагалось установить препятствие. Толщину пограничного слоя δ (м) можно оценить по известной полуэмпирической формуле [6] для воздуха:

$$\delta = 4,23 \left(\frac{v^2 \cdot X}{g \cdot \beta \cdot \Delta T \cdot Pr} \right)^{1/4}, \quad (1)$$

где v , м²/с, – кинематический коэффициент вязкости; X , м, – продольная координата; g , м/с², – ускорение свободного падения; β , К⁻¹, – коэффициент термического расширения среды; $\Delta T = T_w - T_\infty$, К, – характерный перепад температур (T_w , T_∞ – температура поверхности пластины и температура на внешней границе пограничного слоя, соответственно); Pr – число Прандтля.

При $X = 200$ мм толщина слоя $\delta = 13$ мм, а

отношение высоты препятствия H к толщине слоя равно $H/\delta = 1,4$, т.е. препятствие слегка выступает за пределы пограничного слоя. Отметим, что все параметры, зависящие от температуры, в этой формуле и далее по тексту определяются по указанным ниже термическим условиям, включающим и характерный перепад температур ΔT .

Краткая характеристика экспериментального стенда и методики измерений

Генератором свободноконвективного потока служит вертикальная алюминиевая пластина шириной 90 см и высотой 4,95 м. С обратной стороны пластины находятся 25 нагревателей, работой которых управляет электронная система, способная поддерживать заданный тепловой режим длительное время (6 – 8 ч). Задавая определенный режим работы каждой из 25 секций, можно моделировать различные законы нагрева поверхности по ее высоте и, в частности, режим постоянной температуры. Благодаря большой высоте пластины удастся реализовать три режима течения: ламинарный, переходный и развитый турбулентный, вплоть до значений чисел Грасгофа $Gr = 4,5 \cdot 10^{11}$. Подробное описание экспериментального стенда приведено в работах [5, 7].

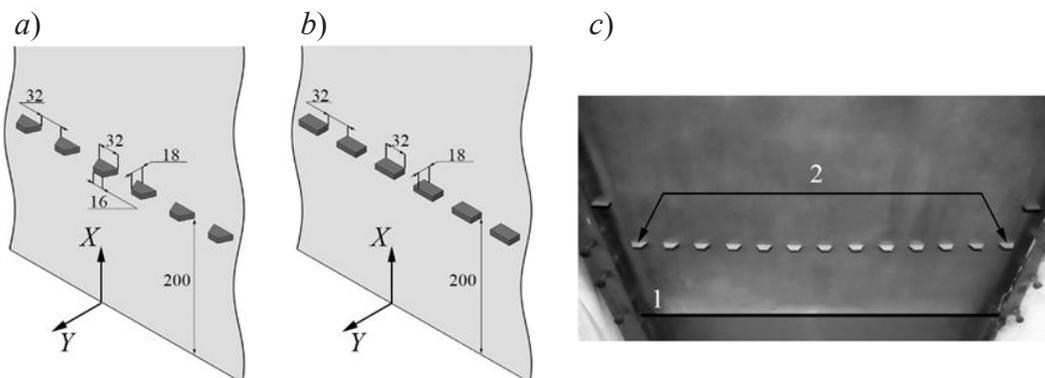


Рис. 1. Схемы трапециевидных (а) и прямоугольных (б) элементов, а также фотография нагреваемой пластины (с), на которой видны ее грань (1) и препятствия – трапециевидные элементы (2).

На схемах даны расстояния в мм

В процессе эксперимента измерялись осредненные и пульсационные составляющие температуры и продольной компоненты вектора скорости. Все измерения производились с помощью термометра сопротивлений и термоанемометра (ТА).

Измерительный зонд состоит из двух датчиков, в которых чувствительными элементами служат вольфрамовые проволочки диаметром 5 мкм и длиной 3 – 4 мм. Проволочки обоих датчиков располагаются параллельно друг другу, на расстоянии 2 мм, и параллельно поверхности, причем нижний датчик (по отношению к течению – вверх по потоку) измеряет актуальную температуру, а верхний датчик (после соответствующей обработки первичных данных) измеряет актуальную скорость.

Известно, что при использовании ТА для измерения скорости в неизотермическом потоке, необходимо учитывать значения температуры при расшифровке показаний ТА. Для рассматриваемого течения, которое характеризуется небольшими средними скоростями и большим уровнем степени турбулентности, обычно используется метод термокомпенсации по средней температуре, который, однако, может привести к неточным измерениям скорости.

В данной работе использовался метод термокомпенсации, описанный в работе [8]. Не останавливаясь на подробном описании этого метода, отметим лишь, что в отличие от других способов термокомпенсации по средней температуре, в данном методе показание ТА, соответствующее актуальной скорости в данной точке пространства, расшифровывается с учетом актуальной температуры в этой же точке.

Все измерения производились при постоянной температуре поверхности $T_w = 60,0 \pm 0,5^\circ\text{C}$, при этом температура воздуха на внешней границе пограничного слоя T_∞ за все время эксперимента изменялась в пределах от 24 до 26 °С.

Для перемещения датчика в пространстве пограничного слоя использовалось координатное устройство, обеспечивающее

точность перемещения порядка 1 мм по вертикальной (продольной) координате X , а по нормальной к поверхности координате Y (т.е. поперек пограничного слоя) – около 1 мкм, причем перемещение по нормальной координате осуществлялось дистанционно, в автоматическом режиме. Используемая система координат представлена на рис. 1.

Измерение параметров потока в каждом сечении пограничного слоя происходило полностью автоматически.

Последовательность действий при измерении описывается следующим образом.

1. Перемещение зонда (с точностью до 1 мм) в выбранное сечение по продольной координате X (см. рис. 1).

2. Автоматический подвод зонда к поверхности до момента касания.

3. После остановки движения зонд отодвигается от поверхности на расстояние 0,6 мм (с точностью до 1 мкм).

4. Зонд готов к проведению измерений в автоматическом режиме вдоль нормальной координаты Y с заданным шагом.

5. В каждой точке практически одновременно (с интервалом 10^{-5} с) снимаются показания с обоих датчиков зонда, и подобные измерения повторяются с заданной частотой (100 Гц). Обычно производилось 2 тыс. выборок пар показаний; таким образом, время одного измерения составляло 20 с.

После соответствующей обработки данных получаем запись актуальных значений температуры и скорости в заданной точке. Далее, после выполнения операции осреднения, вычисляем средние значения скорости, температуры и интенсивности пульсаций.

Сравнительный анализ результатов

Влияние препятствий на ламинарно-турбулентный переход изучалось путем сравнения результатов измерения осредненных и пульсационных характеристик температурного и скоростного полей в пристенной области пограничного слоя. Результаты подробного исследования свободноконвективного пограничного слоя без возмущений представлены в работах [3 – 5, 9, 10]. В этих работах отмече-

ны основные особенности ЛТП, в частности образование локального максимума средней скорости и интенсивности ее пульсаций, а также интенсивности пульсаций температуры в конце зоны перехода.

В более ранних работах предполагалось, что продольную координату X максимальных значений интенсивности пульсаций можно считать началом развитого турбулентного пограничного слоя. Однако анализ полей актуальных значений температуры и скорости показывает, что коэффициент перемежаемости в области максимальных значений интенсивности пульсаций составляет примерно 0,65 – 0,75, что свидетельствует лишь о нарастании интенсивности процесса перехода. И только ниже по потоку относительно координаты максимума, когда интенсивность пульсаций немного уменьшается и практически не изменяется с увеличением продольной координаты, можно считать, что ЛТП закончился и течение в пограничном слое перешло в стадию развитого турбулентного режима. Коэффициент перемежаемости в этой зоне достигает значений 0,80 – 0,95.

Основные выводы, полученные в предыдущих исследованиях [3 – 5, 9, 10], легли в основу выбора критериев, по которым можно судить о протяженности области ЛТП и тем самым определить начало развитого турбулентного режима в свободноконвективном пограничном слое.

На приводимых ниже графиках все результаты для течения без вводимых возмущений (вариант В1) будут обозначаться кружками, при наличии возмущений в виде прямоугольных выступов (вариант В2) – квадратами, а для возмущений в виде трапециевидальных выступов (вариант В3) – треугольниками.

Аналізу подвергались максимальные значения следующих безразмерных характеристик течения:

(i) интенсивностей пульсаций температуры IT_m ,

$$IT_m = \left(\sqrt{t^2} / \Delta T \right)_{\max}, \quad (2)$$

где T_m , К, – максимальное значение температуры в данном сечении пограничного слоя; t , К, – пульсационная составляющая актуальной температуры;

(ii) интенсивностей пульсаций скорости IU_m ,

$$IU_m = \left(\sqrt{u^2} / U_b \right)_{\max}, \quad (3)$$

где U_m , м/с, – максимальное значение скорости в данном сечении пограничного слоя; u , м/с, – пульсационная составляющая продольной компоненты актуальной скорости; U_b , м/с, – скорость плавучести, определяемая соотношением $U_b = (g\beta\Delta Tv)^{1/3}$;

(iii) безразмерной средней скорости U_m/U_b в данном сечении по координате X .

В настоящей работе не ставилась цель провести измерения полных профилей характеристик пограничного слоя. Измерялась только пристенная часть профиля, и этого было достаточно для объективной оценки максимальных значений обозначенных характеристик в данном сечении по продольной координате X .

На рис. 2 представлены распределения максимальных значений интенсивности пульсаций температуры IT_m по значениям локального числа Грасгофа, а также по размерной координате X для трех рассматриваемых вариантов препятствий. При вычислении числа Грасгофа теплофизические свойства воздуха брались при средней температуре, равной $(T_w + T_\infty)/2$. Исключением являлось значение коэффициента термического расширения, который оценивали при внешней температуре. Число Грасгофа определяется соотношением

$$Gr_x = \frac{g \cdot \beta \cdot \Delta T \cdot X^3}{\nu^2}. \quad (4)$$

Анализ данных, полученных для варианта В1, позволил выделить следующие особенности:

плавное нарастание интенсивности пульсаций IT_m вплоть до максимального значения при $X \approx 1000$ мм ($Gr_x \approx 4,9 \cdot 10^9$);

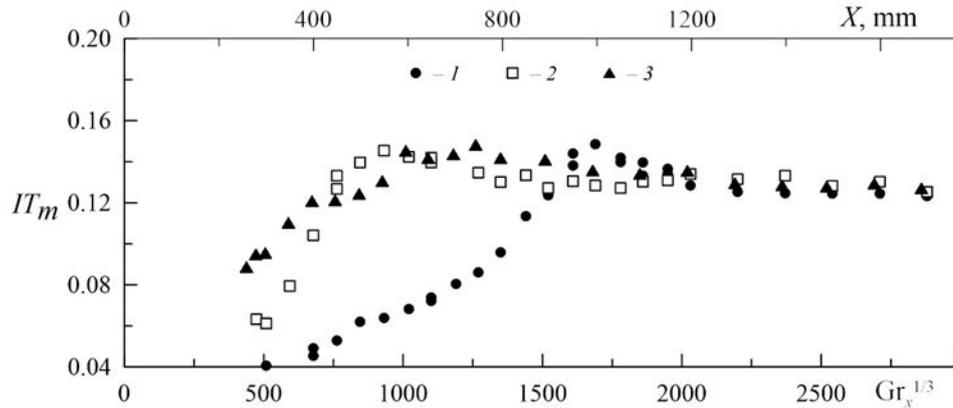


Рис. 2. Зависимости максимальных значений интенсивности пульсаций температуры IT_m в сечении поперек слоя от локального числа Грасгофа Gr_x для трех вариантов препятствий (номера кривых соответствуют номерам вариантов)

затем наблюдается небольшое уменьшение IT_m и, начиная с $X \approx 1200$ мм ($Gr_x \approx 8,4 \cdot 10^9$) значения IT_m практически не меняются.

Анализ результатов, полученных для вариантов В2 и В3, позволяет сделать следующие выводы:

можно заметить, что до $X \approx 450$ мм ($Gr_x \approx 4,4 \cdot 10^8$) скорость роста IT_m для варианта В2 примерно на 20 % больше соответствующей скорости для варианта В3. Затем, начиная с $X \approx 500$ мм ($Gr_x \approx 6,1 \cdot 10^8$), значения пульсаций IT_m , наблюдаемые в варианте В3, резко возрастают и при $X \approx 550$ мм ($Gr_x \approx 8,1 \cdot 10^8$) достигают максимального значения. В свою очередь, пульсации IT_m в варианте В2 достигают максимального значения только при $X \approx 750$ мм ($Gr_x \approx 2,0 \cdot 10^9$);

при дальнейшем увеличении значений координаты X (локального числа Грасгофа) значения интенсивности пульсаций температуры при двух вариантах В2 и В3 сближаются и, начиная с $X \approx 1200$ мм ($Gr_x \approx 8,4 \cdot 10^9$), объединяются с IT_m варианта В1, выходя на почти постоянное значение.

На рис. 3 представлены распределения максимальных значений пульсаций скорости IU_m вдоль пластины для трех рассматриваемых вариантов. Анализ представленных данных показал следующее:

начиная с $X \approx 300$ мм ($Gr_x \approx 1,3 \cdot 10^8$), интенсивность пульсаций IU_m в обоих вариантах с возмущениями (В2 и В3) существенно

превосходит интенсивность IU_m для случая отсутствия возмущений. Причем в варианте В2 наблюдается стремительный рост интенсивности IU_m , а максимальные значения IU_m достигаются при $X = 500$ мм ($Gr_x \approx 6,1 \cdot 10^8$);

интенсивности IU_m вариантов В3 и В1 увеличиваются почти одинаково вплоть до $X \approx 650$ мм ($Gr_x \approx 1,3 \cdot 10^9$), затем IU_m в варианте В3 начинает уменьшаться, а интенсивность пульсации в варианте В1 растет, достигая максимального значения при $X \approx 950$ мм ($Gr_x \approx 4,2 \cdot 10^9$);

при дальнейшем увеличении значений координаты X (локального числа Грасгофа) значения интенсивности IU_m , в трех вариантах сближаются, достигая при $X \approx 1400$ мм ($Gr_x \approx 1,3 \cdot 10^{10}$) одинаковых значений.

На рис. 4 представлены распределения максимальных значений безразмерной средней скорости U_m/U_b по значениям числа Грасгофа. Анализ представленных данных показал следующее:

в начале пограничного слоя ($X \approx 300$ мм, или $Gr_x \approx 1,3 \cdot 10^8$) значения максимальной скорости U_m/U_b для трех вариантов распределены соответственно сопротивлениям, которые возмущения (препятствия) оказывают развитию течения. Так, самым большим сопротивлением обладает вариант В3, для которого значение скорости U_m/U_b монотонно увеличивается на протяжении всего участка наблюдения. В то же время скорость

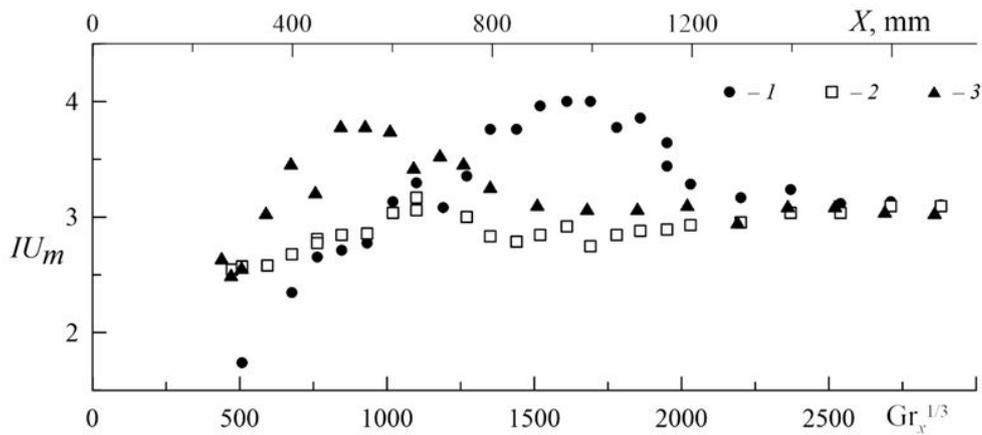


Рис. 3. Зависимости максимальных значений интенсивности пульсаций скорости IU_m в сечении поперек слоя от локального числа Грасгофа Gr_x для трех вариантов препятствий (номера кривых соответствуют номерам вариантов)

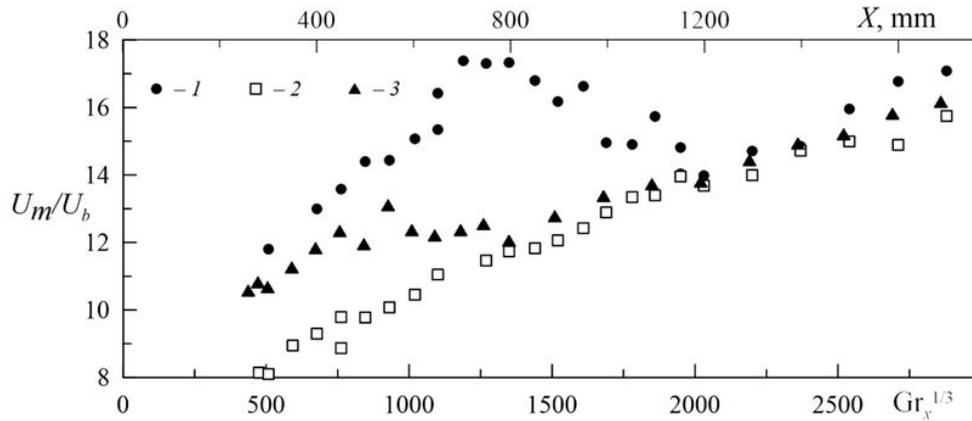


Рис. 4. Зависимости максимальных значений безразмерной средней скорости U_m/U_b в сечении поперек слоя от локального числа Грасгофа Gr_x для трех рассматриваемых вариантов (номера кривых соответствуют номерам вариантов)

U_m/U_b вариантов В2 и В1 увеличивается практически одинаково вплоть до координаты $X \approx 400$ мм ($Gr_x \approx 3,1 \cdot 10^8$). Затем скорость U_m/U_b варианта В2 все же отклоняется от значений варианта В1, начиная терять темп роста скорости, и на расстоянии $X \approx 900$ мм ($Gr_x \approx 3,5 \cdot 10^9$) сливается с кривой варианта В3;

как и следовало ожидать, в варианте В1 скорость U_m/U_b довольно уверенно достигает максимального значения при $X \approx 850$ мм ($Gr_x \approx 2,3 \cdot 10^9$) и далее, медленно уменьшаясь, сливается с кривыми двух других вариантов при $X \approx 1200$ мм ($Gr_x \approx 8,4 \cdot 10^9$).

Прежде чем переходить к анализу результатов по теплообмену, кратко опишем процедуру определения локального коэффициента теплообмена α (Вт/(м²·К)) и, в конечном итоге, числа Нуссельта Nu_x , выражаемого как

$$Nu_x = \frac{\alpha \cdot X}{\lambda}, \quad (5)$$

где λ , Вт/(м·К), – коэффициент теплопроводности.

Процедура основана на методике, предложенной в работах [3 – 5]. Согласно этой методике, существует пристенный тонкий

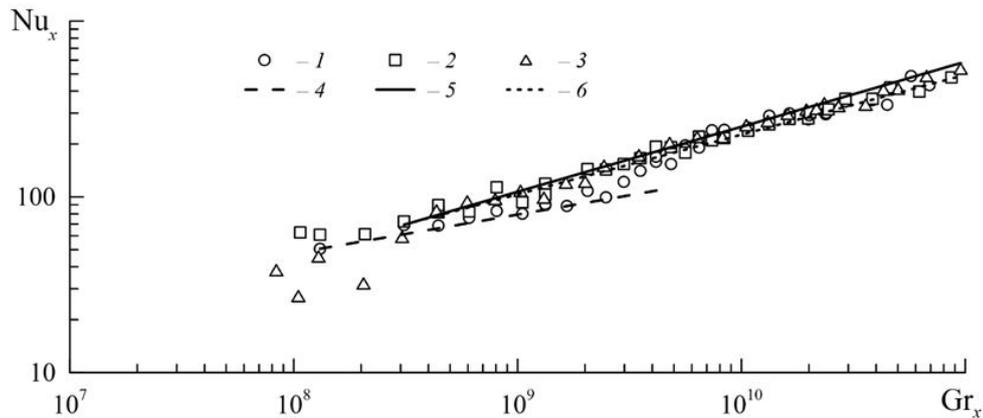


Рис. 5. Зависимости числа Нуссельта от числа Грасгофа для трех вариантов препятствий (первые номера кривых соответствуют номерам вариантов), а также выделены участки кривых 4 – 6: 4 – $Nu_x^{lam} = 0,83 Gr_x^{0,22}$; 5 – $Nu_x = 0,05 Gr_x^{0,37}$; 6 – $Nu_x = 0,09 Gr_x^{0,34}$

теплопроводный слой, в котором профиль осредненной температуры линейно зависит от нормальной координаты Y . На этом основании тепловой поток q_w от поверхности можно представить в следующем виде:

$$q_w = -\lambda \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial Y}\right)\Big|_w = \alpha \cdot \Delta T. \quad (6)$$

Следовательно, локальный коэффициент теплообмена α можно легко вычислить, если производную определить графически по экспериментальному профилю температуры.

Степень влияния возмущений на процесс перехода от ламинарного режима течения к турбулентному хорошо прослеживается по изменению процесса теплообмена в этой области. На рис. 5 представлены зависимости числа Нуссельта Nu_x от локального числа Грасгофа Gr_x для варианта без возмущений (В1) и двух вариантов с возмущениями (В2 и В3).

Для варианта В1 отчетливо выделяются две области: ламинарная и турбулентная – участки пограничного слоя с соответствующими законами теплообмена:

$$\begin{aligned} Nu_x^{lam} &= 0,83 \cdot Gr_x^{0,22}; \\ Nu_x^{turb} &= 0,07 \cdot Gr_x^{0,35}. \end{aligned}$$

Кроме того, можно отметить довольно большую протяженность области ЛТП ($Gr_x \in (2-10) \cdot 10^9$). Для обоих вариантов с возмущением вверх по потоку за препятствиями наблюдается полное отсутствие ламинарной области. Более того, практически сразу за препятствиями начинается область с характерными для турбулентного режима течения законами теплообмена. Так, для варианта В2 это соотношение $Nu_x = 0,05 \cdot Gr_x^{0,37}$, а для варианта В3 – это $Nu_x = 0,09 \cdot Gr_x^{0,34}$.

Заключение

На основании представленных в статье данных можно с уверенностью утверждать, что с помощью крупномасштабных препятствий удастся заметно сократить протяженность зоны перехода в свободноконвективных пограничных слоях и тем самым приблизить начало области с развитым турбулентным теплообменом к передней кромке обтекаемой поверхности. В прикладном отношении, подобного рода препятствия можно рассматривать как пассивные элементы для управления интенсивностью теплообмена.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект №18-19-00082).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Irwin H.P.A.H.** The design of spires for wind simulation // *Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics*. 1981. Vol. 7. No. 3. Pp. 361–366.
2. **Smirnov E.M., Abramov A.G., Smirnovsky A.A., Smirnov P.E.** Numerical simulation of turbulence arising in the free convection boundary layer after across row of rectangular obstacles // *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. Vol. 1128. P. 012090.
3. **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.
4. **Chumakov Yu.S., Kuzmitsky V.A.** Surface shear stress and heat flux measurements on a vertical heated plate under free convection heat transfer // *Russian Journal of Engineering Thermophysics* (Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН). 1998. Vol. 8. No. 1–4. Pp. 1–15.
5. **Кузьмицкий В.А., Чумаков Ю.С.** Анализ характеристик течения при ламинарно-турбулентном переходе в свободноконвективном пограничном слое // *Теплофизика высоких температур*. 1999. Т. 37. № 2. С. 239–246.
6. **Попов И.А.** Гидродинамика и теплообмен внешних и внутренних свободноконвективных вертикальных течений с интенсификацией. Интенсификация теплообмена: монография. Под общ. ред. Ю.Ф. Гортышова. Казань: Центр инновационных технологий, 2007. 326 с.
7. **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.
8. **Кузьмицкий В.А., Чумаков Ю.С.** Установка для калибровки термоанемометра при малых скоростях в неизотермической воздушной среде // *Теплофизика высоких температур*. 1995. Т. 33. № 1. С. 116–120.
9. **Никольская С.Б., Чумаков Ю.С.** Экспериментальное исследование пульсационного движения в свободноконвективном пограничном слое // *Теплофизика высоких температур*. 2000. Т. 38. № 2. С. 249–256.
10. **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.

Статья поступила в редакцию 25.06.2020, принята к публикации 27.07.2020.

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
chumakov@yahoo.com

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

МАЛЫХ Анастасия Денисовна – студентка магистратуры 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
anfatneva@yandex.ru

REFERENCES

1. **Irwin H.P.A.H.**, The design of spires for wind simulation, *J. Wind Engin. Ind. Aerod.* 7 (3) (1981) 361–366.
2. **Smirnov E.M., Abramov A.G., Smirnovsky A.A., Smirnov P.E.**, Numerical simulation of turbulence arising in the free convection boundary layer after across row of rectangular obstacles, *J. Phys., Conf. Ser.* 1128 (2018) 012090.
3. **Tsuji T., Nagano Y.**, Characteristics of a turbulent natural convection boundary layer along a vertical flat plate, *Int. J. Heat Mass Transfer.* 31 (8) (1988) 1723–1734.
4. **Chumakov Yr.S., Kuzmitsky V.A.**, Surface shear stress and heat flux measurements on a vertical heated plate under free convection heat transfer // *Russian Journal of Engineering Thermophysics.* 8 (1–4) (1998) 1–15.
5. **Kuzmitskii V.A., Chumakov Yu.S.**, Analysis of characteristics of flow under conditions of laminar-to-turbulent transition in a free-convection boundary layer, *High Temperature.* 37 (2) (1999) 217–223.
6. **Popov I.A.**, *Gidrodinamika i teploobmen vnesnkh i vnutrenikh svobodnokonvektivnykh vertikalnykh techeniy s intensivatsiyey* [Hydrodynamics and heat transfer of external and internal vertical free-convective flows with intensification], *Tsentr Innovatsionnykh Tekhnologiy, Kazan*, 2007. (in Russian)
7. **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 State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics.* 13 (1) (2020) 66–77.
8. **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.
9. **Nikol'skaya S.B., Chumakov Yu.S.**, Experimental investigation of pulsation motion in a free-convection boundary layer, *High Temperature.* 38 (2) (2000) 231–237.
10. **Tsuji T., Nagano Y.**, Turbulence measurements in a natural convection boundary layer along a vertical flat plate, *Int. J. Heat Mass Transfer.* 31 (10) (1988) 2101–2111.

Received 25.06.2020, accepted 27.07.2020.

THE AUTHORS

CHUMAKOV Yuriy S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
chymakov@yahoo.com

KHRAPUNOV Evgeniy F.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
hrapunov.evgenii@yandex.ru

MALYKH Anastasiya D.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

anfatneva@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.13309
УДК 53.023, 57.023, 57.087.1

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ НОВОГО ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОГО МЕТОДА АНАЛИЗА КОЛИЧЕСТВЕННЫХ ЭЛЕКТРОЭНЦЕФАЛОГРАММ

М.Е. Соболев¹, А.Л. Горелик², О.Л. Власова¹

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Национальный медицинский исследовательский центр психиатрии и неврологии
им. В.М. Бехтерева, Санкт-Петербург, Российская Федерация

В статье представлена разработанная авторами физико-математическая модель, позволяющая анализировать амплитудно-частотную характеристику (АЧХ) электроэнцефалограмм (ЭЭГ) головного мозга человека. Предлагаемый метод обработки ЭЭГ, в отличие от применявшегося ранее, основан на аппроксимации АЧХ уравнением, которое содержит набор коэффициентов, удобных для сравнения данных, полученных от разных испытуемых и, как установлено, обладающих диагностической значимостью. Ранее для оценок использовалось лишь отношение частота/амплитуда либо обратное ему. Полученные результаты указывают на возможность дифференциации пациентов различных нервно-психических профилей по значениям параметрических показателей, получаемых при аппроксимации АЧХ ЭЭГ.

Ключевые слова: количественная ЭЭГ, амплитудно-частотная характеристика, математический анализ ЭЭГ, шизофрения, деменция

Ссылка при цитировании: Соболев М.Е., Горелик А.Л., Власова О.Л. Разработка и применение нового физико-математического метода анализа количественных электроэнцефалограмм // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 119–129. DOI: 10.18721/JPM.13309

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

A NOVEL PHYSICO-MATHEMATICAL TECHNIQUE OF ANALYZING THE QUANTITATIVE ELECTROENCEPHALOGRAMS: DEVELOPMENT AND APPLICATION

M.E. Sobolev¹, A.L. Gorelik², O.L. Vlasova¹

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

² V.M. Bekhterev National Medical Research Center for Psychiatry and Neurology,
St. Petersburg, Russian Federation

The article presents a physical and mathematical model developed by the authors. The model allows analyzing the amplitude-frequency characteristic (AFC) of electroencephalograms (EEG) of a human brain. The proposed method of EEG processing, in contrast to the previously used one, is based on approximating the AFC by an equation that contains a set of coefficients. This method is convenient for comparing data obtained from different subjects and, as found, has diagnostic significance. Previously, only the frequency / amplitude ratio or its inverse was used for evaluations. The results achieved indicate the possibility of differentiating patients of various neuropsychic profiles according to the values of the parametric indicators obtained by approximating the EEG amplitude-frequency response.

Keywords: quantitative EEG, amplitude-frequency characteristic, EEG mathematical analysis, schizophrenia, dementia

Citation: Sobolev M.E., Gorelik A.L., Vlasova O.L. A novel physico-mathematical technique of analyzing the quantitative electroencephalograms: development and application, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 119–129. DOI: 10.18721/JPM.13309

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

Введение

В настоящее время в биомедицинских приложениях доля междисциплинарных исследований неуклонно растет. Одним из направлений, где такой подход необходим, является применение современных компьютерных технологий и методов математической обработки данных при нейрофизиологических исследованиях. Объектами изучения выступают нейродинамические процессы, происходящие в мозгах животных, относящихся к разным типам и классам, а также в мозге человека. Исследователи пытаются понять механизмы функционирования нервной системы и психики, работая с отдельными нейронами, популяциями клеток, срезами мозга и головным мозгом в целом, а также с их компьютерными моделями.

Электроэнцефалография (ЭЭГ) – это неинвазивный метод исследования функционального состояния головного мозга, широко применяемый в научных исследованиях и в клинической практике наряду с магнитно-резонансной томографией (МРТ), позитронно-эмиссионной томографией (ПЭТ), компьютерной томографией (КТ). Электроэнцефалография представляет собой запись биоэлектрических сигналов головного мозга, снимаемых с поверхности кожи головы при помощи электродов, установленных специальным образом, путем измерения разности потенциалов между точками приложения электродов и референтными точками [1]. Получаемые при электроэнцефалографии графические изображения, отражающие зарегистрированные разности потенциалов, носят название электроэнцефалограммы.

Записи ЭЭГ отражают синхронную синхронную активность популяций нейронов. Электрическое возбуждение нейронов создает внеклеточное напряжение, которое

позволяет противоположным концам нейрона (дендритам и аксонам) иметь различный заряд. Общая цель исследования ЭЭГ состоит в интерпретации изменений в измеряемых сигналах как отражение изменений активности определенных областей мозга. Идентификация этих областей мозга представляет собой серьезную проблему, поскольку измерения на поверхности кожи головы отражают сумму сигналов, пришедших из различных пространственно-разнесенных областей мозга. Ввиду наличия циклов нейронной активности, измеренное напряжение колеблется между положительным и отрицательным, и скорость этого цикла отражает частоту сигнала.

Электроэнцефалография относится к высокочувствительным методам, имеющим разрешение до десятков миллисекунд. Метод позволяет наблюдать различные биоэлектрические процессы в динамике, что недоступно для исследования другими методами. Кроме того, ЭЭГ дает возможность увидеть отклик такой сверхсложной биологической системы, как головной мозг, на различные раздражители. Но для адекватной записи электроэнцефалограмм и последующей ее грамотной интерпретации необходим качественный усилитель, ввиду того, что амплитуда измеряемого сигнала мала: она составляет от единиц до нескольких десятков милливольт.

Выделяют несколько диапазонов частот в биоэлектрическом сигнале головного мозга [2]: дельта (0,5 – 4 Гц), тета (4 – 8 Гц), альфа (8 – 13 Гц), бета (13 – 30 Гц) и гамма (более 30 Гц). На рис. 1 видно, что в измеряемом сигнале содержатся все эти ритмы, которые находятся между собой в некотором соотношении. Однако это соотношение меняется в зависимости от различных функциональных состояний головного мозга.

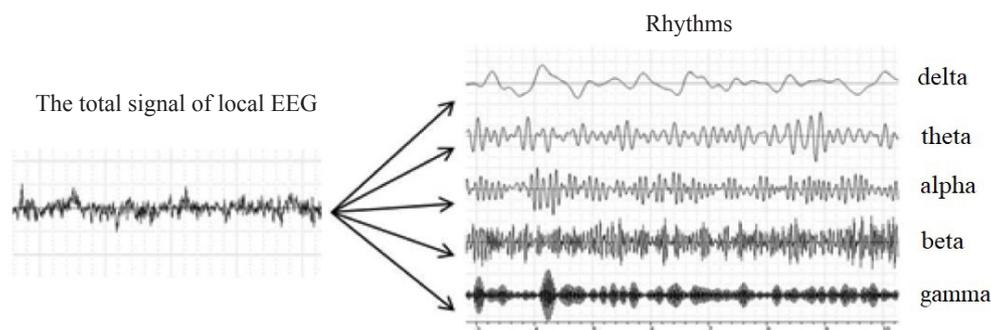


Рис. 1. Суммарный сигнал локальной ЭЭГ (the total signal of local EEG) и ритмы (rhythms) головного мозга человека, выделяемые на ЭЭГ: дельта (delta), тета (theta), альфа (alpha), бета (beta), гамма (gamma) [3]

Для количественного исследования электроэнцефалограмм разработаны различные методы анализа: с применением коэффициентов кросс-корреляции, коэффициентов когерентности, метод вызванных потенциалов и др. Также применяются различные способы исследования амплитудно-частотных характеристик (АЧХ) биоэлектрического сигнала головного мозга, один из которых рассматривается в данной статье.

Метод вызванных потенциалов (ВП) — это реакция электрической активности головного мозга на внешний раздражитель. С помощью этого метода исследуют такие свойства мозга, как возбудимость и восприимчивость к стимулу [4]. Амплитуда и задержка отклика при исследовании ВП-сигналов ЭЭГ содержат ценную информацию о функциональных возможностях мозга в различных условиях и в разных целевых группах. Например, увеличение временной задержки может быть связано с наличием синдрома дефицита внимания и гиперактивности (СДВГ) у детей [5], старением [6], легкой степенью когнитивных нарушений [7], а также с различными психотическими состояниями [8].

Энергетический спектральный анализ [9] вызванных потенциалов — это один из наиболее успешно применяемых методов по идентификации биомаркеров. Кроме того, он может дать важную информацию о частотном составе колебаний ЭЭГ. Обычно спектральные оценки вычисляются для дис-

кретных частот (например, 8,5 — 10,0 Гц, т. е. для нижней полосы альфа-ритма). Для данной частоты сигнала ЭЭГ среднеквадратичная амплитуда или мощность (квадрат амплитуды) используются для количественного определения ее вклада в измеренный сигнал.

К сожалению, спектральный анализ не предоставляет информации в динамике, т. е. о том, когда со временем происходят сдвиги частот. Для решения этой проблемы применяются различные методы частотно-временного анализа, в том числе кратковременное преобразование Фурье и вейвлет-анализ, который приобрел популярность в последние годы, благодаря появившейся возможности точно преобразовывать формы сигналов ЭЭГ в определенные временные и частотные компоненты. При таком подходе сигналы ЭЭГ рассматриваются как сдвинутые и масштабированные версии конкретной математической функции (вейвлета), а не как композиция синусоидальных волн с различными частотами, как при преобразованиях Фурье. Было установлено, что спектральная мощность альфа-волн в покое и пиковая частота альфа-ритма могут быть снижены у пациентов с психотическими расстройствами [10]. Это может быть связано с тем фактом, что снижение мощности альфа-волн коррелирует с негативными симптомами при шизофрении.

Шизофрения относится к тяжелым психическим заболеваниям, которое поражает примерно 1% населения. Поскольку это

инвалидизирующее расстройство имеет гетерогенную генетическую и нейробиологическую основу, было проведено множество испытаний для выявления его биомаркеров с целью его ранней диагностики. Биомаркеры, наиболее часто используемые при шизофрении, связаны с нейроиммунной и нейроэндокринной системами, метаболизмом, различными нейротрансмиттерными системами и нейротрофическими факторами. Количественная электроэнцефалография также привлекалась для определения возможных биомаркеров, но таких исследований крайне мало. Одно из них [11] посвящено применению тета-фазовой гамма-амплитудной связи в качестве доказательного инструмента для выявления шизофрении.

Российские ученые сравнили различные показатели альфа-ритма в электроэнцефалограммах здоровых испытуемых с соответствующими показателями у больных артериальной гипертензией [12]. Были зарегистрированы более низкие значения амплитуды и частоты у больных гипертонией, по сравнению с таковыми у здоровых испытуемых. Указывается на увеличение частотно-амплитудного отношения в лобных, теменных и затылочных отведениях у больных лиц, в то время как в височных отведениях изменений обнаружено не было.

Некоторые цереброваскулярные и сердечно-сосудистые заболевания ассоциируются с возникновением деменции. Нейропсихологический профиль больных с такими нарушениями [13] зависит от локализации и глубины сосудистого повреждения головного мозга, а также от типов цереброваскулярных патологий. Довольно часто такие патологии поражают лобные доли, из-за чего у пациентов начинает снижаться мотивация и ухудшается контроль над выполняемыми действиями. Помимо этого, наблюдаются такие симптомы, как забывчивость и растерянность. Было сообщено [14] об увеличении спектральной мощности в дельта-диапазоне, пропорциональном повреждению сердечно-сосудистой системы, и о снижении

мощности альфа-ритма у больных испытуемых. Кроме того, упоминается, что отношение мощности тета-частоты к мощности альфа-частоты может служить надежным маркером для оценки индивидуальной степени повреждения головного мозга при сердечно-сосудистых заболеваниях.

В данной статье предложена новая математическая модель, адекватно описывающая амплитудно-частотную характеристику ЭЭГ.

Найдено статистическое распределение значений коэффициентов, определяемых при аппроксимации АЧХ ЭЭГ, полученных при обследовании здоровых испытуемых, и проведено сравнение полученных параметров между группами здоровых людей и страдающих шизофренией и возрастной сосудистой деменцией.

Материалы и методы

Электроэнцефалограммы испытуемых были получены в отделении функциональной диагностики Национального медицинского исследовательского центра психиатрии и неврологии им. В.М. Бехтерева (Санкт-Петербург) с 2010 по 2018 годы. Запись проходила на электроэнцефалографе «Телепат 104». Электроды располагались в соответствии с международной системой «10 – 20» (рис. 2) [15].

На данном рисунке были применены следующие обозначения и сокращения для отведений и анатомических структур: Nasion – переносица, Inion – затылочный бугор, Vertex – макушка, Preauricular point – наружный слуховой проход, F – frontalis (лобная), C – centralis (область центральной борозды), T – temporalis (височная), P – parietalis (теменная), O – occipitalis (затылочная), A – auricula (мочка уха); электроды в левом полушарии обозначены нечетными индексами, а в правом – четными.

Частота дискретизации электроэнцефалографа составляла 250 Гц. Были использованы шлем из силиконовых тяжей и мостиковые хлорсеребряные неполяризующиеся электроды.

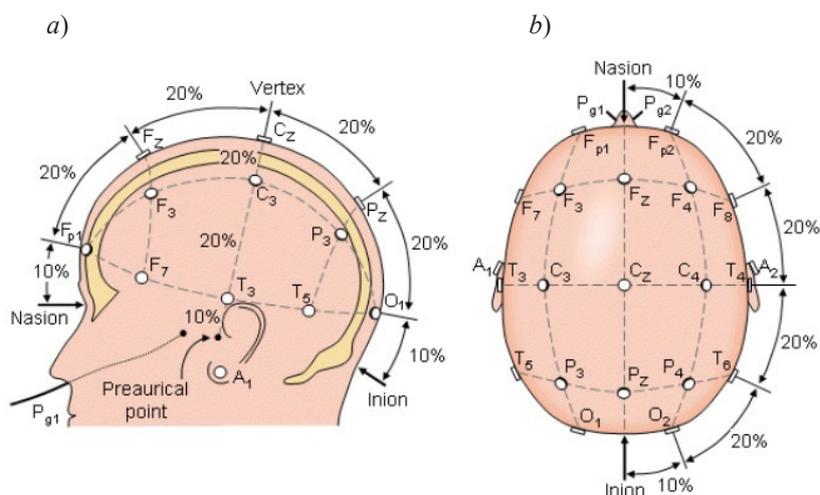


Рис. 2. Международная система расположения электродов «10 – 20» [15]; показан череп человека в двух проекциях (а и б) и характерные точки на нем: переносица (Nasion), макушка (Vertex) и затылочный бугор (Inion); см. также пояснения в тексте

В данной статье были исследованы три группы испытуемых: условно здоровые (норма), больные шизофренией и пациенты с возрастной сосудистой деменцией. Группа «норма» состояла из условно здоровых испытуемых и включала семнадцать человек возрастом от 20 до 64 лет (трое мужчин и четырнадцать женщин). В группу «шизофрения» входило девять больных шизофренией возрастом от 22 до 49 лет (четверо мужчин и пять женщин). Группа «возрастная сосудистая деменция» включала семнадцать человек возрастом от 54 до 80 лет (шестеро мужчин и одиннадцать женщин), страдающих возрастными цереброваскулярными нарушениями головного мозга с выраженным когнитивным снижением.

Записи ЭЭГ исследовались в программе WinEEG версии 2.90.53, в усредненном монтаже, по 16 отведениям, или каналам (Fp1, Fp2, F3, F4, C3, C4, P3, P4, O1, O2, F7, F8, T3, T4, T5, T6). Фильтр высоких частот был выставлен на значение 0,5 Гц, фильтр низких частот – на 50 Гц, с режекторным фильтром на 50 Гц. Эпоха анализа составляла 5 с. Для изучения были выбраны безартефактные участки записи в покое с закрытыми глазами, т. е. в так называемом состоянии спокойного бодрствования. Для каждого испытуемого было получено около 45 различных значений амплитуд и частот. Анализ коэффици-

ентов проводился с помощью программы MagicPlot версии 2.7.2. Для статистического анализа применялся *t*-критерий Стьюдента.

Для количественного анализа электроэнцефалограмм была разработана физико-математическая модель, отражающая зависимость между амплитудой и частотой биоэлектрического сигнала головного мозга, которая описывается следующей формулой:

$$A(f) = af + b + a_1 \exp[-(f - f_0)^2 \ln 2 / \sigma^2], \quad (1)$$

где A , B , – амплитуда волны; f , Гц, – частота волны; a , b , a_1 , f_0 , σ – числовые коэффициенты в разных единицах измерения: a – В/Гц; b , a_1 – В; f_0 , σ – Гц.

Формула (1) была выведена эмпирически, путем аппроксимации амплитудно-частотной зависимости. Ее особенность состоит в наилучшем описании, т. е. дающем минимальную погрешность отклонения от указанной зависимости. Ранее для вычисления амплитудно-частотной характеристики исследователи использовали просто отношение амплитуды к частоте или обратное отношение, что, безусловно, удобно для простой оценки в силу простоты, но такое действие не имеет под собой физического основания. Формула (1) усложняет вычисления, но отра-

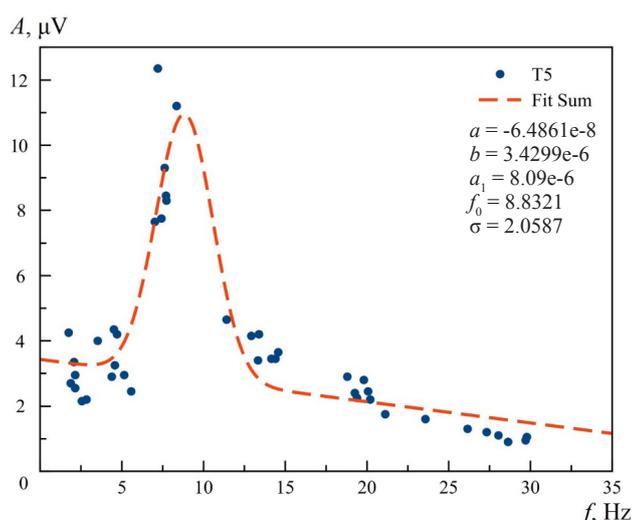


Рис. 3. Пример аппроксимации (пунктирная линия) экспериментальной амплитудно-частотной характеристики (точки) по отведению T5 для одного из испытуемых группы «норма»; приведены значения получаемых параметров

жает поведение кривой измеряемого сигнала, следовательно, наилучшим образом выражает график функции зависимости амплитуды от частоты. Из этих соображений значения амплитуд и частот по каждому отведению, получаемые из электроэнцефалограмм для каждого испытуемого, аппроксимировались формулой (1). Биофизическая природа предлагаемой зависимости, несомненно, представляет интерес и может составить предмет отдельного исследования. Однако эта задача выходит за рамки настоящей работы.

Результаты и их обсуждение

В начале этого раздела представлены результаты обследования группы «норма». Пример аппроксимации амплитудно-частотной характеристики, полученной для одного из испытуемых по отведению T5, приведен на рис. 3. АЧХ ЭЭГ по другим каналам для каждого испытуемого из группы «норма» имела аналогичный вид.

Ввиду того, что не было обнаружено существенных различий в значениях коэффициентов между каналами в каждой из трех исследуемых групп, анализ данных по каждому параметру проводился по всем отведениям одновременно (без разделения на отведения). В результате для группы «норма» были полу-

чены статистические распределения значений коэффициентов (рис. 4). Видно, что значение пиковой частоты f_0 лежит в альфа-диапазоне и тем самым полученные данные согласуются с общепринятыми представлениями о том, что максимальная амплитуда альфа-волн возникает в состоянии пассивного бодрствования с закрытыми глазами (в состоянии покоя).

При сравнении полученных значений параметров между тремя исследуемыми группами были выявлены следующие различия (буквенные обозначения абзацев соответствуют литерам на рис. 5):

а) в коэффициенте a_1 между группами «норма» и «возрастная сосудистая деменция» ($p < 0,05$); в группах «шизофрения» и «возрастная сосудистая деменция» ($p < 0,05$);

б) в коэффициенте f_0 между группами «норма» и «возрастная сосудистая деменция» ($p < 0,05$); «шизофрения» и «возрастная сосудистая деменция» ($p < 0,05$); «норма» и «шизофрения» ($p < 0,20$);

с) в коэффициенте σ между группами «норма» и «шизофрения» ($p < 0,05$); «шизофрения» и «возрастная сосудистая деменция» $p < 0,05$.

Данные различия графически показаны на рис. 5. Других различий между коэффициентами обнаружено не было.

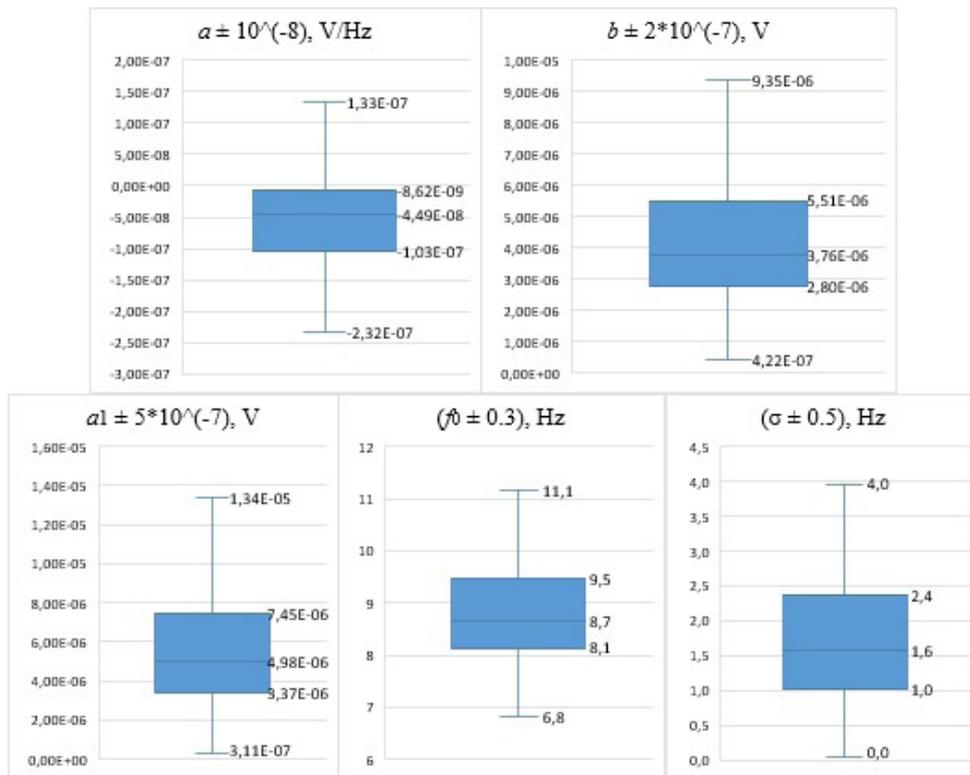


Рис. 4. Статистические распределения значений коэффициентов амплитудно-частотной зависимости (1) для испытуемых группы «норма»

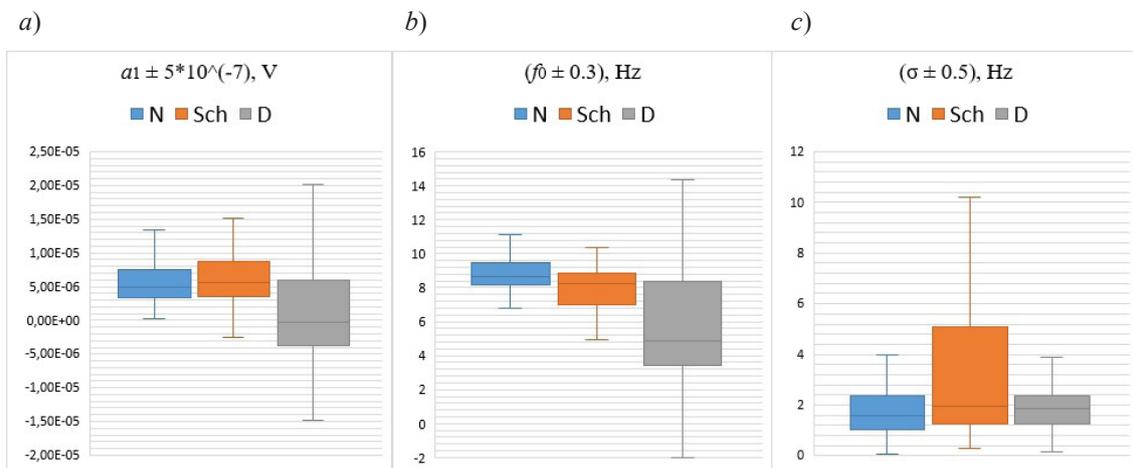


Рис. 5. Статистические распределения коэффициентов $a_1(a)$, $f_0(b)$ и $\sigma(c)$ по всем отведениям для трех групп испытуемых: «норма» (N), «шизофрения» (Sch), «деменция» (D); наблюдаемые различия между представленными данными указаны в тексте

Таким образом было установлено, что для каждой из трех исследуемых групп существуют свои характерные особенности в поведении амплитудно-частотных характеристик, отличные от остальных групп. Так, для группы «шизофрения» характерными чертами

выступают несколько сниженная пиковая частота f_0 , по сравнению с «нормой» (но все равно попадающая в верхний тета- и нижний альфа- диапазоны частот) и увеличенная полуширина на полувывсоте σ , по сравнению с аналогичными коэффициентами из двух

других групп. В то же время для группы «возрастная сосудистая деменция» отличительной особенностью являются отрицательное значение коэффициента a_1 (т. е. прогиб пика кривой Гаусса вниз, а не вверх) и сниженное значение пиковой частоты f_0 .

Следует отметить, что о различиях данных между группами необходимо судить по совокупности значений получаемых параметров, а не по одному отдельному значению параметра.

Анализ результатов проведенных исследований позволяет заключить, что с помощью предложенной математической модели (1) можно дифференцировать испытуемых на группы по профилям их заболеваний.

Заключение

Электроэнцефалография известна как один из методов, применяющихся для диагностики различных нервно-психических расстройств. Данный метод позволяет практически мгновенно отследить изменения функционального состояния головного мозга благодаря высокому временному разрешению. При этом сама процедура обследования относится к неинвазивным и абсолютно безвредна для испытуемых, что отличает ее от ряда других методов исследования.

Сигналы электроэнцефалограммы представляют собой электрофизиологические

реакции, отражающие основные нейронные активности, которые зависят от физиологических состояний субъекта (например, эмоции, внимание и многие другие). Ключевыми параметрами, которые получают с помощью ЭЭГ, выступают амплитуда и частота измеряемого сигнала. Определение их на глаз сопряжено с серьезными ошибками, поэтому применяются различные программные пакеты и методы, позволяющие их вычислять. Помимо этого, в клинической практике важно знать различные проявления и биомаркеры тех или иных функциональных состояний головного мозга, которые можно выявить (в том числе) математическими методами анализа ЭЭГ.

В данной статье представлена разработанная авторами физико-математическая модель, аппроксимирующая амплитудно-частотную характеристику электроэнцефалограмм человека. Продемонстрированы различия в значениях получаемых коэффициентов между разными клиническими группами испытуемых. Установлено, что выбранные эмпирические параметры выступают не просто как «подгоночные», а обладают диагностической значимостью.

Таким образом показана практическая значимость предложенного метода для дифференциации нервно-психических расстройств у пациентов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Jackson A.F., Bolger D.J.** The neurophysiological bases of EEG and EEG measurement: A review for the rest of us // *Psychophysiology*. 2014. Vol. 51. No. 11. Pp. 1061–1071.
2. **Guay S., de Beaumont L., Drisdelle B.L., Lina J.-M., Jolicoeur P.** Electrophysiological impact of multiple concussions in asymptomatic athletes: A re-analysis based on alpha activity during a visual-spatial attention task // *Neuropsychologia*. 2018. Vol. 108. 8 January. Pp. 42–49.
3. **Назаров А.И.** Сравнение частотных компонент электрокожной активности и ЭЭГ (качественный анализ) // *Экспериментальная психология*. 2017. Т. 10. № 2. С. 104–113.
4. **Başar E.** Brain oscillations in neuropsychiatric disease // *Dialogues in Clinical Neuroscience*. 2013. Vol. 15. No. 3. Pp. 291–300.
5. **De Pascalis V., Varriale V., Matteoli A.** Intelligence and P3 components of the event-related potential elicited during an auditory discrimination task with masking // *Intelligence*. 2008. Vol. 36. No. 1. Pp. 35–47.
6. **Fjell A.M., Rosquist H., Walhovd K.B.** Instability in the latency of P3a/P3b brain potentials and cognitive functioning in aging // *Neurobiology Aging*. 2009. Vol. 30. No. 12. Pp. 2065–2079.
7. **Laskaris N., Tarnanas I., Tsolaki M.N., Vlaikidis N., Karlovasitou A.K.** Improved detec-



tion of amnesic MCI by means of Discriminative Vector Quantization of Single-Trial cognitive ERP responses // *Journal of Neuroscientific Methods*. 2013. Vol. 212. No. 2. Pp. 344–354.

8. **Bodatsch M., Ruhrmann S., Wagner M., et al.** Prediction of psychosis by mismatch negativity // *Biological Psychiatry*. 2011. Vol. 69. No. 10. Pp. 959–966.

9. **Başar E., Guntekin B., Atagun I., TurpGolbaş B., Tulay E., Ozerdem A.** Brain's alpha activity is highly reduced in euthymic bipolar disorder patients // *Cognitive Neurodynamics*. 2012. Vol. 6. No. 1. Pp. 11–20.

10. **Murphy M., Öngür D.** Decreased peak alpha frequency and impaired visual evoked potentials in first episode psychosis // *NeuroImage: Clinical*. 2019. Vol. 22. P. 101693.

11. **Geun Hui Won, Jun Won Kim, Tae Young Choi, et al.** Theta-phase gamma-amplitude coupling as a neurophysiological marker in neuroleptic-naïve schizophrenia // *Psychiatry Research*. 2018. Vol. 260. February. Pp. 406–411.

12. **Курданова М.Х., Бесланев И.А., Курданова М.Х., Батырбекова Л.М.** Анализ амплитудно-частотных характеристик альфа-ритма головного мозга у больных артериальной гипертонией // *Тенденции развития науки и образования. Сб. научн. тр., по матер. XXIX междунар. научн.-практ. конф. 31 авг. 2017 г. Часть 3. Самара: Изд. НИЦ «Л-Журнал», 2017. С. 29–35.*

13. **Smith E.E.** Clinical presentations and epidemiology of vascular dementia // *Clinical Science*. 2017. Vol. 131. No. 11. Pp. 1059–1068.

14. **Moretti D.V., Miniussi C., Frisoni G., Zanetti O., Binetti G., Geroldi C., Galluzzi S., Rossini P.M.** Vascular damage and EEG markers in subjects with mild cognitive impairment // *Clinical Neurophysiology*. 2007. Vol. 118. No. 8. Pp. 1866–1876.

15. **Звёздочкина Н.В.** Исследование электрической активности головного мозга. Казань: Изд. Казан. ун-та, 2014. 59 с.

Статья поступила в редакцию 04.04.2020, принята к публикации 28.05.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СОБОЛЕВ Максим Евгеньевич — аспирант Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
m.e.sobolev@mail.ru

ГОРЕЛИК Александр Леонидович — кандидат медицинских наук, заведующий отделением функциональной диагностики Национального медицинского исследовательского центра психиатрии и неврологии им. В.М. Бехтерева, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

192019, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Бехтерева, 3
gorelik_a@mail.ru

ВЛАСОВА Ольга Леонардовна — доктор физико-математических наук, профессор, директор НОЦ «Фундаментальные основы медицинских и биомедицинских технологий» Высшей школы биомедицинских систем и технологии Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

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

REFERENCES

1. **Jackson A.F., Bolger D.J.**, The neurophysiological bases of EEG and EEG measurement: A review for the rest of us, *Psychophysiology*. 51 (11) (2014) 1061–1071.
2. **Guay S., de Beaumont L., Drisdelle B.L., et al.**, Electrophysiological impact of multiple concussions in asymptomatic athletes: A re-analysis based on alpha activity during a visual-spatial attention task, *Neuropsychologia*. 108 (8 January) (2018) 42–49.
3. **Nazarov A.I.**, Comparison of the frequency components of electrodermal activity and EEG (qualitative analysis), *Experimental Psychology*. 10 (2) (2017) 104–113. (in Russian)
4. **Başar E.**, Brain oscillations in neuropsychiatric disease, *Dialogues in Clinical Neuroscience*. 15 (3) (2013) 291–300.
5. **De Pascalis V., Varriale V., Matteoli A.**, Intelligence and P3 components of the event-related potential elicited during an auditory discrimination task with masking, *Intelligence*. 36 (1) (2008) 35–47.
6. **Fjell A.M., Rosquist H., Walhovd K.B.**, Instability in the latency of P3a/P3b brain potentials and cognitive functioning in aging, *Neurobiology Aging*. 30 (12) (2009) 2065–2079.
7. **Laskaris N., Tarnanas I., Tsolaki M.N., et al.**, Improved detection of amnesic MCI by means of discriminative vector quantization of single-trial cognitive ERP responses, *Journal of Neuroscientific Methods*. 212 (2) (2013) 344–354.
8. **Bodatsch M., Ruhrmann S., Wagner M., et al.**, Prediction of psychosis by mismatch negativity, *Biological Psychiatry*. 69 (10) (2011) 959–966.
9. **Başar E., B. Guntekin B., Atagun I., et al.**, Brain’s alpha activity is highly reduced in euthymic bipolar disorder patients, *Cognitive Neurodynamics*. 6 (1) (2012) 11–20.
10. **Murphy M., Öngür D.**, Decreased peak alpha frequency and impaired visual evoked potentials in first episode psychosis, *NeuroImage: Clinical*. 22 (2019) 101693.
11. **Geun Hui Won, Jun Won Kim, Tae Young Choi, et al.**, Theta-phase gamma-amplitude coupling as a neurophysiological marker in neuroleptic-naïve schizophrenia, *Psychiatry Research*. 260 (February) (2018) 406–411.
12. **Kurdanova M.H., Beslaneev I.A., Kurdanova M.H., Batyrbekova L.M.**, Analiz amplitudno-chastotnykh kharakteristik alfa-ritma u bolnykh arterialnoy gipertoniyei [An analysis of the amplitude-frequency characteristics of the brain’s alpha rhythm in patients with arterial hypertension], *Tendentsii Razvitiya Nauki i Obrazovaniya* [“Trends in the Development of Science and Education”, a Collection of Scientific Papers on Proceedings of the 24th International Research-to-Practice Conference, Part 3, August 31 2017, Samara] (2017) 29–35. (in Russian)
13. **Smith E.E.**, Clinical presentations and epidemiology of vascular dementia, *Clinical Science*. 131 (11) (2017) 1059–1068.
14. **Moretti D.V., Miniussi C., Frisoni G., et al.**, Vascular damage and EEG markers in subjects with mild cognitive impairment, *Clinical Neurophysiology*. 118 (8) (2007) 1866–1876.
15. **Zvyozdockina N.V.**, Isslyedovaniye elektricheskoy aktivnocty golovnogo mozga [Study of the brain electrical activity], University of Kazan Publishing, Kazan, 2014. (in Russian)

Received 04.04.2020, accepted 28.05.2020.

THE AUTHORS

SOBOLEV Maxim E.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

m.e.sobolev@mail.ru

GORELIK Aleksandr L.

V.M. Bekhterev National Medical Research Center for Psychiatry and Neurology

3 Bekhterev St., St. Petersburg, 192019, Russian Federation

gorelik_a@mail.ru

VLASOVA Olga L.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

olvlasova@yandex.ru

DOI: 10.18721/JPM.13310

UDC 530.12:517.988.38(075.8)

SYMMETRY TRANSFORMATION PARAMETERS AS CLASSICAL DYNAMIC VARIABLES IN THE GAUGE THEORY

N.N. Gorobey¹, A.S. Lukyanenko¹, A.V. Goltsev²

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation;

² The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation

A modification of the gauge theory is proposed, in which the set of generalized coordinates is supplemented with symmetry transformation parameters, and the condition is additionally imposed on the latter, which ensures the classical character of their dynamics in the quantum theory. As a result, additional dynamic variables and transverse physical degrees of freedom in the Hamiltonian become separated. The classical theory of the Yang–Mills field is considered.

Keywords: gauge theory, quantization, symmetry transformation parameters, Hamiltonian

Citation: Gorobey N.N., Lukyanenko A.S., Goltsev A.V., Symmetry transformation parameters as classical dynamic variables in the gauge theory, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 130–135. DOI: 10.18721/JPM.13310

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

ПАРАМЕТРЫ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СИММЕТРИИ КАК КЛАССИЧЕСКИЕ ДИНАМИЧЕСКИЕ ПЕРЕМЕННЫЕ В КАЛИБРОВОЧНОЙ ТЕОРИИ

Н.Н. Горобей¹, А.С. Лукьяненко¹, А.В. Гольцев²

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация

Предложена модификация калибровочной теории, в которой множество обобщенных координат дополняется параметрами конечных преобразований симметрии. На последние наложено дополнительно условие, обеспечивающее классический характер их динамики после квантования. Как результат, дополнительные динамические переменные и физические поперечные степени свободы в гамильтониане разделяются. Рассмотрена классическая теория поля Янга – Миллса.

Ключевые слова: калибровочная теория, квантование, параметр симметрии, гамильтониан

Ссылка при цитировании: Горобей Н.Н., Лукьяненко А.С., Гольцев А.В. Параметры преобразования симметрии как классические динамические переменные в калибровочной теории // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 130–135. DOI: 10.18721/JPM.13310

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



Introduction

A simple and natural understanding of the dynamic structure of the gauge theory is that the initial set of dynamic variables in its mathematical apparatus is redundant and some of them should be eliminated by solving the equations of constraints and additional gauge conditions [1]. However, in the subsequent development, this reduction procedure has been replaced by the expansion of the phase space of the theory with the addition of Lagrange multipliers with the corresponding canonical momenta and ghosts, as well as the expanded BRST-symmetry [2 – 6]. Another option for expanding the phase space of the gauge theory was proposed in Ref. [7], where the parameters of finite symmetry transformations were added to the original dynamic variables. These finite shifts in the group space are constructed in the form of integrals of infinitesimal shifts generated by constraints. However, such an extension alone does not solve the problem of separating physical degrees of freedom and pure calibrations and a dynamic interpretation of the theory. It should be supplemented with a structure that allows connecting finite shifts in the group space with observations. In the case of the dynamics of relativistic particles with reparametrization invariance of their world lines, the intrinsic parameter of the symmetry group plays the intrinsic time of each particle. This invariant parametrization also arises naturally in the BRST-invariant representation of the propagator of covariant quantum theory for a relativistic particle [8] and reproduces the Fock [9] and Schwinger [10] formalism based on the introduction of proper time. In Ref. [11], the introduction of this parameter was proposed to be supplemented with the condition of its classical dynamics with the corresponding modification of the initial action. This addition allows us to connect the proper time with observations and get a dynamic interpretation of covariant quantum theory. It can be assumed that such a two-stage modification of the singular theory (adding finite symmetry transformations to dynamic variables and an additional condition for their classical dynamics) will be an effective way to separate physical degrees of freedom and pure gauges in

the general case.

In this paper, this modification has been shown as an example of a free Yang – Mills field. The result should be a separation of the dynamics of the physical transverse components of the Yang – Mills field and the “motion” of the longitudinal components (pure calibrations) in the group space.

Modification of the Yang – Mills’ action

The proposed modification of the gauge theory action is divided into two stages. We proceed from the canonical form of action, namely,

$$I = \int dt [p_i \dot{q}_i - \lambda_a \varphi(p, q) - h(p, q)] \quad (1)$$

where the constraints obey the commutation relations:

$$\begin{aligned} \{\varphi_a, \varphi_b\} &= C_{abd} \varphi_d, \\ \{\varphi_a, h\} &= h_a \varphi_{ad} \end{aligned} \quad (2)$$

(we consider the case $h_a = 0$), and variations of the Lagrangian multipliers ensuring the invariance of the action (1) with respect to the infinitesimal symmetry transformations

$$\begin{aligned} \delta q_i &= \varepsilon_a \{q_i, \varphi_a\}, \\ \delta p_i &= \varepsilon_a \{p_i, \varphi_a\} \end{aligned} \quad (3)$$

have the form

$$\delta \lambda_a = \dot{\varepsilon}_a - C_{abd} \lambda_b \varepsilon_d. \quad (4)$$

At the first stage, according to Ref. [7], we replace the Lagrangian multipliers with explicit functions of the parameters defining the finite symmetry transformation ($\delta s_a = \varepsilon_a$):

$$\lambda_a = \dot{s}_b \Lambda_{ab}(s) \quad (5)$$

which are integrals of functional-differential Eqs. (4). At the second stage, according to Ref. [11], we add a variation generated by the infinitesimal shift of new dynamic variables to the action. We call this step a condition of classical dynamics, since it allows one to remove integration over new dynamic variables in the functional-integral rep-

resentation of the propagator of covariant quantum theory. We carry out these constructions as an example of a free Yang – Mills field $A_{\mu a}$ where μ is a space-time index ($\mu = 0, 1, 2, 3$), and a is an internal index of the gauge theory. Here, A_{0a} are the Lagrange multipliers, so, at the first stage, the original Yang – Mills Lagrangian function takes the form

$$L = \frac{1}{2} \left[\left(\dot{A}_{ia} - \nabla_i (\dot{s}_b \Lambda_{ba}) \right)^2 - B_{ia}^2 \right], \quad (6)$$

where B_{ia} is the Yang – Mills “magnetic field” tension, and the covariant derivative is determined by the following relation [1]:

$$\nabla_i F_a = \partial_i F_a - ig T_{bad} A_{ib} F_d. \quad (7)$$

We will not have need of the explicit form of functions Λ_{ab} here. Now, following Ref. [8], we will still expand the set of new variables by adding infinitesimal shifts ε_a to them, as well to Lagrangian function (6) we add its variation generated by these infinitesimal shifts:

$$\begin{aligned} \tilde{L} = & \frac{1}{2} \left[\left(\dot{A}_{ia} - \nabla_i (\dot{s}_b \Lambda_{ba}) \right)^2 - B_{ia}^2 \right] + \\ & + \left(\dot{A}_{ia} - \nabla_i (\dot{s}_b \Lambda_{ba}) \right) \left(\nabla_i \left(\dot{\varepsilon}_c \Lambda_{ca} + \dot{s}_c \frac{\partial \Lambda_{ca}}{\partial s_d} \varepsilon_d \right) \right). \end{aligned} \quad (8)$$

The canonical form of the modified Yang – Mills’ action

Now we turn to the canonical form of the modified action (8). Let us find the canonical momenta:

$$\begin{aligned} \pi_{ia} = & \dot{A}_{ia} - \nabla_i (\dot{s}_b \Lambda_{ba}) + \\ & + \nabla_i \left(\dot{\varepsilon}_c \Lambda_{ca} + \dot{s}_c \frac{\partial \Lambda_{ca}}{\partial s_d} \varepsilon_d \right), \end{aligned} \quad (9)$$

conjugated to A_{ia} , and

$$\begin{aligned} p_{s_b} = & -\Lambda_{ab} \nabla_i \left(\dot{A}_{ia} - \nabla_i (\dot{s}_c \Lambda_{ca}) \right) - \\ & - \nabla_i \left(\dot{A}_{ic} - \nabla_i (\dot{s}_q \Lambda_{qc}) \right) \frac{\partial \Lambda_{bc}}{\partial s_d} \varepsilon_d - \\ & - \Lambda_{ab} \Delta \left(\dot{\varepsilon}_c \Lambda_{ca} + \dot{s}_c \frac{\partial \Lambda_{ca}}{\partial s_d} \varepsilon_d \right), \end{aligned} \quad (10)$$

conjugated to s_a ($\Delta = \nabla_i \nabla_i$), and

$$P_{\varepsilon_b} = -\Lambda_{ab} \nabla_i \left(\dot{A}_{ia} - \nabla_i (\dot{s}_c \Lambda_{ca}) \right), \quad (11)$$

conjugated to ε_b .

From here we immediately obtain the constraint equations,

$$p_{s_b} = -\Lambda_{ab} \nabla_i \pi_{ia} + P_{\varepsilon_a} \Lambda_{ac}^{-1} \frac{\partial \Lambda_{cb}}{\partial s_d} \varepsilon_d, \quad (12)$$

and generalized velocities in the following combination:

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_c \Lambda_{ac} + \dot{s}_c \frac{\partial \Lambda_{ca}}{\partial s_d} \varepsilon_d = \\ = \Delta^{-1} \left(\nabla_i \pi_{ia} + \Lambda_{ab}^{-1} p_{\varepsilon_b} \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Now we find the Hamilton function of the modified theory:

$$\begin{aligned} \tilde{h} = & \frac{1}{2} \left[\pi_{ia}^2 + B_{ia}^2 \right] - \\ & - \frac{1}{2} \left[\nabla_i \Delta^{-1} \left(\nabla_k \pi_{ka} + \Lambda_{ab}^{-1} p_{\varepsilon_b} \right) \right]^2, \end{aligned} \quad (14)$$

where we used (13).

Let us see what we have got as a result. Obviously, the constraints (12) commute with the Hamiltonian (14). The Hamiltonian does not contain ε_a which means that canonical momenta P_{ε_a} (color density of a charge) are integrals of motion. We perform the orthogonal longitudinal-transverse splitting of the canonical momenta:

$$\pi_{ia} = \nabla_i \left(\chi_{0a}^L + \chi_a^L \right) + \pi_{ia}^T, \quad (15)$$

with

$$\Lambda_{ab} \Delta \chi_{0b}^L = -P_{\varepsilon_a}. \quad (16)$$

As a result, the quadratic form of the momenta in the Hamiltonian contains only the transverse components:

$$\tilde{h} = \frac{1}{2} \left[\pi_{ia}^{T2} + B_{ia}^2 \right]. \quad (17)$$



Thus, the longitudinal components of the Yang – Mills are completely excluded from the dynamics in time. For them, only the “dynamics” in the group space described by the constraints (12) remains. Here, the evolution parameters s_a are supplemented by dynamic variables P_{ε_a} which can be eliminated by choosing the origin of the longitudinal component of the momentum according to Eq. (16). In the gauge theory with the constraints linear in canonical momenta, these quantities do not have a dynamic meaning.

Summary

Thus, in the Yang – Mills theory, and generally in the theory with the constraints linear in canonical momenta, the introduction of the classical parameters of symmetry transformations as additional dynamic variables allows us to separate the physical transverse and gauge

longitudinal degrees of freedom. At the same time, classical external sources which are generators of classical symmetry transformations are also added as dynamic variables. These sources themselves can be set equal to zero, as long as the separation of the physical degrees of freedom is done. In theories with quadratic on the canonical momenta constraints, such as the theory of gravity, in which there is a time problem, the modification proposed here introduces the concept of proper time, which also has its own classical source – energy. In contrast to the case considered here, this energy can have a dynamic meaning. This issue will be considered separately.

Acknowledgement

The authors thank professor V.A. Franke for useful discussions.

REFERENCES

1. **Faddeev L.D., Slavnov A.A.**, Gauge fields: An introduction to quantum theory, 2nd edition, Westview Press, 1993.
2. **Fradkin E.S., Vilkovisky G.A.**, Non-perturbation methods in 2 dimensional quantum field theory, Phys. Lett. B. 55 (2) (1975) 224–226.
3. **Batalin I.A., Vilkovisky G.A.**, Introduction to the relativistic string theory, Phys. Lett. B. 69 (3) (1977) 309–312.
4. **Henneaux M.**, Hamiltonian form of the path integral for theories with a gauge freedom, Phys. Rep. 126 (1) (1985) 1–66.
5. **Kugo T., Ojima I.**, Local covariant operator formalism of non-Abelian gauge theories and quark confinement problem, Progr. Theor. Phys. Suppl. 66 (February) (1979) 1–130.
6. **Ore F.R., van Nieuwenhuisen P.**, Local BRST symmetry and the geometry of gauge-fixing, Nucl. Phys. B. 204 (2) (1982) 317–332.
7. **Gorobey N., Lukyanenko A.**, Time and observables in covariant quantum theory, arXiv:2001.09003 [gr-qc] (2020).
8. **Govaerts J.**, A note on the Fradkin – Vilkovisky theorem, CERN-TH5010/88 (1988).
9. **Fock V.A.**, The eigen-time in classical and quantum mechanics, Phys. Zs. Sowjet. 12 (4) (1937) 404–425 (in German).
10. **Schwinger J.**, On gauge invariance and vacuum polarization, Phys. Rev. 82 (5) (1951) 664–679.
11. **Gorobey N., Lukyanenko A.**, Feynman propagator for a system of interacting scalar particles in the Fokker theory, arXiv:2002.03607v1 [quant-ph] (2020).

Received 20.06.2020, accepted 03.07.2020.

THE AUTHORS

GOROBEY Natalia N.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

n.gorobey@mail.ru

LUKYANENKO Alexander S.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

alex.lukyan@rambler.ru

GOLTSEV Alexander V.

The Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences

26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

goltsev@ua.pt

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Славнов А.А., Фаддеев Л.Д.** Введение в квантовую теорию калибровочных полей. 2-е изд. М.: Наука, 1988, 272 с.
2. **Fradkin E.S., Vilkovisky G.A.** Non-perturbation methods in 2 dimensional quantum field theory // Phys. Lett. B. 1975. Vol. 55. No. 2. Pp. 224–226.
3. **Batalin I.A., Vilkovisky G.A.** Introduction to the relativistic string theory // Phys. Lett. B. 1977. Vol. 69. No. 3. Pp. 309–312.
4. **Henneaux M.** Hamiltonian form of the path integral for theories with a gauge freedom // Phys. Rep. 1985. Vol. 126. No. 1. Pp. 1–66.
5. **Kugo T., Ojima I.** Local covariant operator formalism of non-Abelian gauge theories and quark confinement problem // Progr. Theor. Phys. Suppl. 1979. Vol. 66. February. Pp. 1–130.
6. **Ore F.R., van Nieuwenhuisen P.** Local BRST symmetry and the geometry of gauge-fixing // Nucl. Phys. B. 1982. Vol. 204. No. 2. Pp. 317–332.
7. **Gorobey N., Lukyanenko A.** Time and observables in covariant quantum theory // arXiv:2001.09003 [gr-qc] (2020).
8. **Govaerts J.** A note on the Fradkin–Vilkovisky theorem // CERN-TH5010/88, 1988. 21 p.
9. **Фок В.А.** Собственное время в классической и квантовой механике // Известия АН СССР. Серия физическая. 1937. № 4–5. С. 551–568.
10. **Schwinger J.** On gauge invariance and vacuum polarization // Phys. Rev. 1951. Vol. 82. No. 5. Pp. 664–679.
11. **Gorobey N., Lukyanenko A.** Feynman propagator for a system of interacting scalar particles in the Fokker theory // arXiv:2002.03607v1 [quant-ph] (2020).

Статья поступила в редакцию 20.06.2020, принята к публикации 03.07.2020.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОРОБЕЙ Наталья Николаевна – 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
n.gorobey@mail.ru

ЛУКЪЯНЕНКО Александр Сергеевич – 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
alex.lukyan@rambler.ru



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

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26.
golysev@ua.pt

DOI: 10.18721/JPM.13311
УДК 57.087

МОДЕЛИ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ АУТОРЕГУЛЯЦИИ МОЗГОВОГО КРОВООБРАЩЕНИЯ ЧЕЛОВЕКА

В.И. Антонов¹, В.Б. Семенютин², В.А. Алиев³

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

² Национальный медицинский исследовательский центр им. В.А. Алмазова,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;

³ СПб ГБУЗ «Елизаветинская больница», Санкт-Петербург, Российская Федерация

В работе представлен обзор современных методов и средств, применяемых для исследования регуляции мозгового кровообращения человека. В первой части приведены базовые понятия математического описания процессов регуляции на основе анализа биомедицинских сигналов. Среди них можно выделить преобразование Фурье и передаточную функцию, когерентность сигналов, свертку функций, корреляционный анализ, фрактальный анализ, вейвлет-преобразование, искусственные нейронные сети, преобразование Гильберта – Хуанга. Во второй части рассмотрены результаты работ, в которых эти методы использованы для проведения медицинских обследований. Анализ показал, что сохраняется дискуссия специалистов относительно выбора между линейными и нелинейными моделями функционирования системы ауторегуляции мозгового кровотока. Сделан вывод о том, что в настоящее время нет единого подхода к решению поставленной задачи и требуется продолжение разработки новых методов и моделей, а также их внедрение в медицинскую практику.

Ключевые слова: математическая модель, ауторегуляция мозгового кровотока, биомедицинский сигнал

Ссылка при цитировании: Антонов В.И., Семенютин В.Б., Алиев В.А. Модели и методы исследования ауторегуляции мозгового кровообращения человека // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 136–155. DOI: 10.18721/JPM.13311

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

STUDIES IN THE AUTOREGULATION OF HUMAN CEREBRAL CIRCULATION: MODELS AND METHODS

V.I. Antonov¹, V.B. Semenyutin², V.A. Aliev³

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russian Federation;

² Almazov National Medical Research Centre,
St. Petersburg, Russian Federation;

³ Elizabethian Hospital, St. Petersburg, Russian Federation

The work contains a review of modern methods and tools used to study the regulation of human cerebral circulation. The first part discusses the basic concepts of the mathematical description of regulatory processes based on the biomedical signals analysis. The Fourier transform and transfer function, signal coherence, convolution of functions, correlation analysis, fractal analysis, wavelet transform, artificial neural networks, Hilbert – Huang transform are presented. The second part is devoted to the papers where these methods were used for medical examinations. Their analysis showed that there was a discussion of specialists regarding the choice between linear and nonlinear models of functioning the cerebral blood flow autoregulation system. It was concluded that there was



currently no single approach to solving the problem, and there remains a need to continue the development of new methods and models and their implementation in medical practice.

Keywords: mathematical model, cerebral blood flow autoregulation, biomedical signal

Citation: Antonov V.I., Semenyutin V.B., Aliev V.A., Studies in the autoregulation of human cerebral circulation: models and methods, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 136–155. DOI: 10.18721/JPM.13311

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

Введение

Регуляция мозгового кровообращения служит совершенным физиологическим механизмом, направленным на обеспечение химического и физического гомеостаза головного мозга. Изучение этого явления обеспечивает концептуальную основу для внедрения методов управления системой регулирования в клиническую практику.

Определение особенностей процесса играет важную роль в клинике, поскольку состояние регуляторных механизмов во многом определяет патогенный процесс при различных поражениях головного мозга: черепно-мозговая травма, ишемический инсульт, нетравматическое внутрочерепное кровоизлияние, церебральные артериовенозные мальформации и соустья.

На рис. 1 представлены основные факторы, определяющие состояние мозгового кровотока (CBF). В Приложении приведены все сокращения медицинских терминов, использованные в данной статье и применяемые в медицине.

В нормальных условиях CBF строго контролируется, что обеспечивает адекватную ответную реакцию на местные или системные изменения гомеостаза. Градиент давления, регулирующий уровень CBF, зависит не только от системного артериального давления (SAP) и центрального венозного давления (CVP), но и от внутрочерепного давления (ICP). Между этими величинами существуют сложные взаимоотношения, но практически величина церебрального перфузионного давления (CPP) определяется как разница между SAP и ICP или CVP (в зависимости от того, какое давление выше).

В систему регуляции также входит эндотелий, который представляет собой тонкую полупроницаемую мембрану, отделяющую кровотоки от более глубоких структур сосуда. Важнейшей функцией эндотелия является регуляция сосудистого тонуса.

Ауторегуляция мозгового кровотока (AR) – это способность системы мозгового кровообращения поддерживать относительно адекватный уровень CBF в условиях колебаний AP/СРР в определенном диапазоне значений путем изменения сосудистого сопротивления. Для осуществления регуляции CBF необходимо взаимодействие различных факторов. К ним относятся следующие:

миогенная реакция гладкомышечных клеток стенок артериол на растяжение, вызванное различиями в трансмуральном давлении, представляющим собой разницу между внутри- (давление крови) и внесосудистым давлениями, оказываемыми на стенку сосуда;

гемодинамический удар, связанный с изменением тонуса сосудов (увеличение скорости CBF может вызвать сужение просвета кровеносных сосудов);

метаболические факторы, такие как поступление кислорода к тканям, метаболизм нейронов, а также вегетативная нервная система, участвующая в формировании сосудистых реакций [1].

В настоящее время изучение механизмов AR является важной и актуальной задачей, решением которой занято большое количество исследовательских коллективов. В связи с развитием методов математического анализа и обработки сигналов, эти методы все чаще входят в практику и существенно

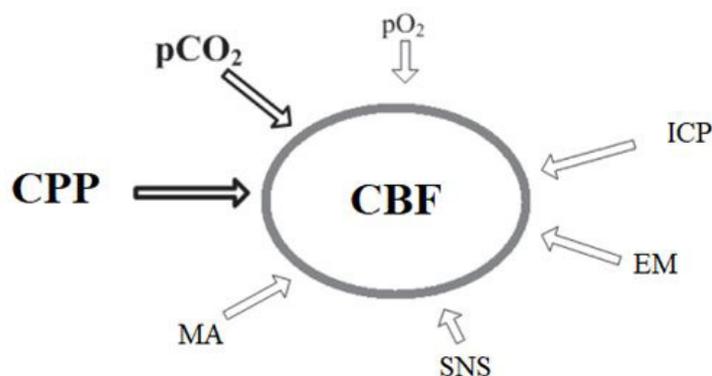


Рис. 1. Основные факторы, определяющие состояние мозгового кровотока (CBF): CPP – церебральное перфузионное давление; pO_2 , pCO_2 – парциальные давления кислорода и углекислого газа; ICP – внутричерепное давление; EM – эндотелеальные метаболиты; SNS – симпатическая нервная система; MA – психическая деятельность

расширяют возможности всестороннего исследования процессов регуляции мозгового кровотока.

Наша работа посвящена сравнительному анализу современных методов и средств изучения регуляции мозгового кровообращения, которую можно рассматривать как взаимодействие входного сигнала (AP) и результирующего отклика (CBF) посредством системы регуляции с наличием обратных связей.

Методы обработки сигналов

Обработка информации служит для анализа, модификации и синтеза получаемых сигналов, например звука, изображения и результатов биологического мониторинга. Методы обработки сигналов используются для улучшения передачи, эффективности хранения, а также для выделения или обнаружения компонент, представляющих интерес в измеряемом сигнале. Например, преобразование Фурье позволяет выделять основные гармоники из сигнала, похожего (на первый взгляд) на шум (рис. 2).

Виды преобразования сигналов. Ввиду разного характера сигналов используются разные способы их обработки.

Обработка с непрерывным временем. При-

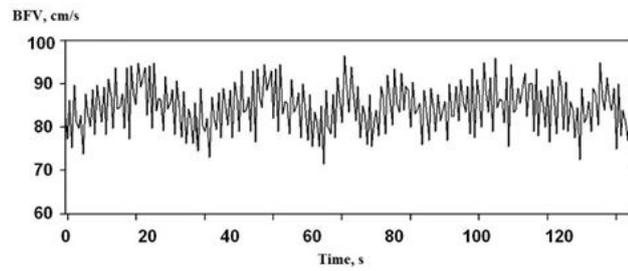
меняется к сигналам, для которых временной интервал можно рассматривать как континуум. Включает в себя как временную, так и частотную области изменения. Преобразование Фурье временного ряда позволяет получить частотную характеристику процесса.

Обработка с дискретным временем. Применяется для анализа сигналов типа выборок, элементы которых определены только в конечном числе моментов времени.

Цифровая обработка. Заключается в обработке оцифрованных дискретизированных сигналов с дискретным временем. Примерами алгоритмов такой обработки служат быстрое преобразование Фурье, фильтр с конечной импульсной характеристикой, фильтр с бесконечной импульсной характеристикой и адаптивные фильтры, такие как фильтры Винера и Калмана.

Нелинейная обработка. Нелинейный анализ применяется к сигналам, которые генерируются нелинейными системами, и может осуществляться во временной, частотной или пространственно-временной областях. Нелинейные системы способны моделировать сложные виды поведения, включая бифуркации, хаос, гармоники и субгармоники, которые нельзя проанализировать с помощью линейных методов. Современный

a)



b)

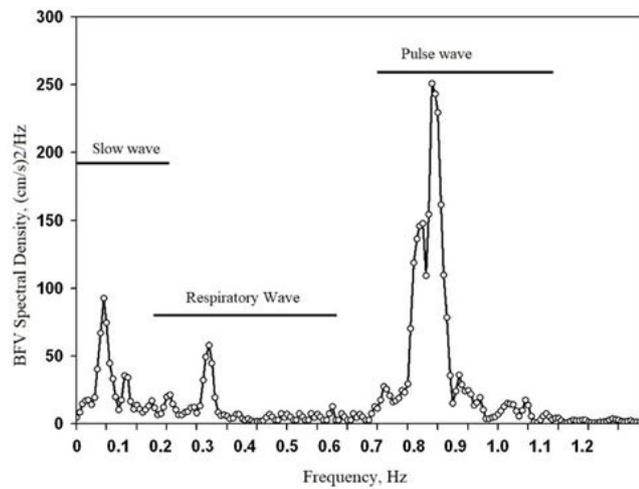


Рис. 2. Примеры кривых мониторинга скорости кровотока (BFV) в средней мозговой артерии (a) и спектральной плотности (SD) спонтанных колебаний в диапазонах медленных (Slow-WaveActivity), дыхательных (Respiratory-WaveActivity) и пульсовых (Pulse-WaveActivity) волн, рассчитанной с помощью быстрого преобразования Фурье (b)

подход основан на понятии мультифракталов — объектов, обладающих различными характеристиками самоподобия в различных масштабных диапазонах.

Статистическая обработка. Статистическая обработка используется для сигналов, которые можно рассматривать как стохастические процессы, обладающие статистическими свойствами; наличие таких свойств позволяет применять указанные методы [2]. Например, с их помощью можно уменьшить влияние шумов, возникающих при получении сигналов в процессе медицинского мониторинга состояния пациента.

Математические методы. Математика обладает мощным комплексом методов, применимых в самых разных областях науки и техники. Они применимы и в медицине.

Среди них наиболее важны следующие: дифференциальные уравнения, рекуррентные процедуры;

преобразования Фурье и Гильберта, вейвлет-преобразование, методы нелинейной динамики;

частотно-временной анализ (дает оценку спектральных компонент при исследовании временных рядов);

стохастический анализ;

методы вычислительной математики;

интеллектуальный анализ данных (применяется для статистического анализа отношений между большим количеством переменных, представляющих множество физических сигналов с целью извлечения ранее неизвестных важных свойств).

Между обрабатываемыми признаками,

характеризующими какое-либо явление, возможны различные виды связи:

Функциональная – наиболее жесткая связь (в основном встречается в неживой природе); для такой связи изменение величины одного признака обязательно вызывает изменение другого. Например, зависимость пути от времени и скорости. Не характерна для живой природы, построенной на принципе детерминированного хаоса.

Корреляционная; когда величине одного признака соответствует ряд значений другого признака (например, зависимость частоты пульса от температуры тела, зависимость частоты обострений хронических заболеваний от возраста и т. п.); вообще, корреляция – это взаимосвязанное изменение показателей; характеризуется направлением, формой и степенью тесноты.

Критерий корреляции Пирсона – это метод параметрической статистики, позволяющий определять наличие или отсутствие линейной связи между двумя количественными показателями, а также оценивать ее тесноту и статистическую значимость [3]. Для дискретных случайных величин коэффициент корреляции $r(X, Y)$ можно вычислять по следующей формуле:

$$r(X, Y) = \frac{G_1(x_i, y_j)}{G_2(x_i, y_j)},$$

$$G_1(x_i, y_j) = \sum x_i y_j p_{ij} - \sum x_i p_i \sum y_j q_j,$$

$$G_2(x_i, y_j) = \sqrt{\sum x_i^2 p_i - (\sum x_i p_i)^2} \times \sqrt{\sum y_j^2 q_j - (\sum y_j q_j)^2},$$

где x_i, y_j – элементы выборок; p_i, q_j – вероятности, с которыми эти элементы входят в выборки; p_{ij} – вероятности их совместного появления.

При $r = 0$ связь отсутствует, при $r = \pm 1$ связь полная, функциональная (знаки плюс и минус выражают положительную либо от-

рицательную (обратную) связь). Значения корреляции Пирсона ранжируются по тесноте: менее 0,3 – слабая связь; в интервале 0,3–0,7 – умеренная; в интервале 0,7–1,0 – сильная. Кроме того, связи различают по характеру изменений: она может быть прямолинейной либо криволинейной.

Следует заметить, что коэффициенты корреляции устанавливают лишь статистические взаимосвязи и не свидетельствуют о наличии причинно-следственной связи между парами признаков.

Коэффициент ранговой корреляции Спирмена относится к непараметрическим показателям связи между переменными, измеренными по ранговой шкале. Для его вычисления не требуется каких-либо предположений о характере распределений признаков в генеральной совокупности. Процедура ранжирования начинается с расположения переменных по возрастанию их значений. Разным значениям присваиваются ранги в виде натуральных чисел. Затем проводят вычисления по формуле

$$r = 1 - \frac{6 \sum_{i=1}^n d_i^2}{n^3 - n},$$

где d_i – разность между рангами в парах, n – число пар.

Преобразование Фурье $F(\omega)$ определяет коэффициенты (амплитуды) при разложении исходной функции $f(x)$ на гармонические колебания с разными частотами. Оно имеет вид

$$F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp(-i\omega x) dx,$$

где ω – круговая частота.

Важным свойством преобразования Фурье является равенство Парсеваля:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 d\omega.$$

Формула обращения может быть представлена как

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) \exp(i\omega x) d\omega. \quad (1)$$

Физический смысл преобразования Фурье состоит в том, что правая часть равенства (1) – это сумма гармонических колебаний $\exp(i\omega x)$ с частотами ω , амплитудами $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}|F(\omega)|$ и фазовыми сдвигами $\arg F(\omega)$.

Преобразование Фурье дает возможность распознать частотное наполнение сигнала, но не позволяет определить, в какой момент времени появляется то или иное колебание с частотой ω . В случае, когда требуется временная локализация частотных компонент, например при анализе сигналов биологического происхождения, следует применять частотно-временное преобразование сигнала, например, вейвлет-преобразование.

Свертка функций – это операция, показывающая «сходство» одной функции с отраженной и сдвинутой копией другой. В математике свертка есть математическая операция над двумя функциями f и g , порождающая третью функцию, которую обычно рассматривают как модифицированную версию одной из первоначальных [5]. Операция свертки представляет собой зависимость интеграла по бесконечному временному промежутку от произведения уровня первого сигнала на уровень второго, сдвинутого по времени относительно первого. Результат свертки показывает, в каких местах один сигнал сходен с другим, а в каких нет. Определение свертки формулируется как

$$(f * g)(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\tau) g(t - \tau) d\tau.$$

В дискретном случае свертка соответствует сумме значений f с коэффициентами, соответствующими смещенным значениям g , т. е.

$$(f * g)(x) = f(1)g(x-1) + f(2)g(x-2) + \dots$$

Когерентность – это статистика, которую можно использовать для изучения связи

между двумя сигналами или наборами данных. Если сигналы эргодические, а системная функция линейная, когерентность можно использовать для оценки причинно-следственной связи между входом и выходом.

Когерентность (иногда ее называют квадратом по амплитуде) между двумя сигналами $x(t)$ и $y(t)$ является действительной функцией, которая определяется как

$$C_{xy}(f) = \frac{|G_{xy}(f)|^2}{G_{xx}(f) G_{yy}(f)},$$

где $G_{xy}(f)$ – кросс-спектральная плотность между x и y ; $G_{xx}(f)$, $G_{yy}(f)$ – автоспектральные плотности x и y соответственно. Величина спектральной плотности обозначается как $|G|$.

С учетом указанных выше ограничений (эргодичность, линейность), функция когерентности позволяет оценивать степень достоверности, с которой вид функции $y(t)$ может быть предсказан по виду $x(t)$ с помощью выбора оптимальной линейной функции методом наименьших квадратов.

Спектр мощности $S_{xx}(f)$ временного ряда $x(t)$ описывает распределение мощности по частотным составляющим, входящим в этот сигнал.

Передачная функция – один из способов описания динамической системы. Представляет собой дифференциальный оператор, выражающий связь между входом и выходом линейной стационарной системы. Если известны входной сигнал системы и передачная функция, то можно восстановить выходной сигнал. Покажем это.

Пусть $u(t)$ – входной сигнал линейной стационарной системы, а $y(t)$ – ее выходной сигнал. Тогда передачная функция $W(s)$ такой системы записывается в следующем виде:

$$W(s) = \frac{Y(s)}{U(s)},$$

где s , рад/с, – оператор передачной функции, $s = j\omega$; $U(s)$, $Y(s)$ – преобразования Лапласа для сигналов $u(t)$ и $y(t)$, соответственно:

$$U(s) = \int_0^{\infty} u(t) \exp(-st) dt,$$

$$Y(s) = L y(t) = \int_0^{\infty} y(t) \exp(-st) dt.$$

Рассмотрим случай дискретных систем.

Пусть $u(k)$ – входной дискретный сигнал такой системы, а $y(k)$ – ее дискретный выходной сигнал ($k = 0, 1, 2, \dots$). Тогда передаточная функция $W(z)$ такой системы имеет вид

$$W(z) = \frac{Y(z)}{U(z)},$$

где $U(z)$, $Y(z)$ – это z -преобразования для сигналов $u(k)$ и $y(k)$ соответственно:

$$U(z) = Z u(k) = \sum_0^{\infty} u(k) z^{-k},$$

$$Y(z) = Z y(k) = \sum_0^{\infty} y(k) z^{-k}.$$

Методы нелинейной динамики. Основными методами являются фрактальный анализ и дробное дифференцирование, а также искусственные нейронные сети. Рассмотрим указанные методы.

Фрактальный анализ оценивает фрактальные характеристики данных. Он включает методы определения фрактальной размерности и других фрактальных характеристик объекта. Важное ограничение фрактального анализа заключается в том, что эмпирически определенная фрактальная размерность не обязательно доказывает, что модель является фрактальной.

Понятие фрактала связано с объектами, удовлетворяющими двум критериям: самоподобие и дробная размерность. Первый означает, что объект состоит из подразделений на нескольких уровнях, которые напоминают структуру всего объекта. Вторым критерием для фрактального объекта является наличие дробной размерности. Это требование отличает фракталы от евклидовых объектов,

которые характеризуются целочисленной размерностью.

Для обработки сигналов медицинского происхождения используют переход от временного ряда к новому объекту, сформированному в фазовом пространстве конечной размерности, называемом восстановленным аттрактором. Для его характеристики могут использоваться различные меры, из которых наиболее фундаментальным представляется его фрактальная размерность [6, 7].

Наиболее удобным для исследования ауторегуляции мозгового кровообращения представляется размерность Реньи.

Энтропия Реньи является семейством функционалов, используемых в качестве меры неопределенности или случайности некоторой системы. Если некоторая система имеет дискретное множество доступных состояний $X = \{x_1, \dots, x_n\}$, которому соответствует распределение вероятностей p_i для $i = 1, \dots, n$ (то есть p_i – вероятности пребывания системы в состояниях x_i), тогда энтропия Реньи с параметром q (при $q \geq 0$) системы определяется как

$$H_q(p) = \frac{1}{1-q} \log \sum_{i=1}^N p_i^q.$$

Так как $\sum_{i=1}^N p_i = 1$, то при выполнении условия $q \rightarrow 1$ она сходится к энтропии Шеннона, имеющей вид

$$H(p) = - \sum_{i=1}^N p_i \ln p_i.$$

Однако при анализе сигналов медицинского мониторинга чаще встречаются явления, которые требуют расширения понятия фрактала на сложные структуры с несколькими показателями размерности. Сложные фракталы, называемые мультифракталами, встречаются в медицине (и вообще в природе) чаще других. Фактически мультифрактальный подход означает, что изучаемый объект можно разделить на части, для каждой из которых наблюдаются свои свойства самоподобия. Для количественного описания этих частей требуется большое



число характеристик. В частности, спектр таких процессов нельзя описать степенным законом с единственным показателем β .

Максимум модуля вейвлет-преобразования (WTMM) – это метод определения фрактальной размерности сигнала. Он использует построение линии локального максимума вейвлет-преобразования и дает возможность разделения области времени и масштаба сигнала на области фрактальной размерности. Непрерывное вейвлет-преобразование функции $f(x)$ определяется по следующей формуле:

$$W_{\psi}(a, b) = \frac{1}{\sqrt{|a|}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \psi^* \left(\frac{x-b}{a} \right) dx,$$

где a – параметр масштаба, b – координата или время.

Начальный сигнал $f(x)$ делится с помощью функции $\psi(x)$, генерируемой из солитоноподобных функций, с особенностями, полученными при его масштабных измерениях и сдвигах. В простейшем варианте (когда используют показатель Холдера h) исследуется масштабирование одной из линий (например, максимальной):

$$|W_{\psi}(t_i, s)| \sim s^{h(t_i)}.$$

Большую часть информации, передаваемой сигналом, несут его особенности в виде нерегулярных структур и переходных явлений. Вейвлет-преобразование является эффективным методом поиска и идентификации этих особенностей, благодаря способности преобразования разлагать сигнал на блоки, которые локализованы как по времени, так и по частоте. Такая способность позволяет определять локальную регулярность сигнала [8].

Локальная регулярность функции часто измеряется с помощью показателей Липшица [8], также называемых показателем Гельдера. Поясним это следующим образом.

Пусть n – положительное целое число и $n \leq \alpha \leq n + 1$. Функция $f(x)$ называется липши-

цевой α в точке x_0 тогда и только тогда, когда существуют две положительные постоянные A и h_0 , а также многочлен $P_n(x)$ (порядка n), такой что для $h < h_0$ справедливо следующее неравенство [9]:

$$|f(x_0 + h) - P_n(h)| \leq A |h|.$$

Мы утверждаем, что функция имеет особенность в точке x_0 , если она не является липшицевой 1 в точке x_0 . Дело в том, что когда функция непрерывно дифференцируема в некоторой точке, ее показатель Липшица равен единице в этой точке и поэтому в этом месте нет сингулярности. На практике проверка вышеперечисленных условий слишком сложна, поэтому используют более простые и менее строгие критерии сингулярности функций.

Искусственные нейронные сети (ИНС). Современные медицинские экспертные системы позволяют определять существенные изменения в поведении организма, а также осуществляют поддержку принятия решения о проведении необходимого медицинского вмешательства. Искусственные нейронные сети обладают способностью к самообучению на основе данных медицинского мониторинга. Они представляет собой систему соединенных между собой простых процессоров (искусственных нейронов). Каждый процессор взаимодействует с сигналами, которые он получает, и сигналами, которые он посылает другим процессорам. Важным достоинством нейронных сетей является возможность их обучения. Технически обучение состоит в нахождении коэффициентов связей между нейронами.

Искусственный нейрон обычно представляют как нелинейную функцию (активации или срабатывания) от линейной комбинации входных сигналов (рис. 3). Полученный результат посылается на единственный выход. Затем соединяют выходы одних нейронов с входами других, образуя сеть.

Практически сеть реализуется в виде перцептронов. Перцептрон состоит из датчиков, ассоциативных и реагирующих элементов [9].

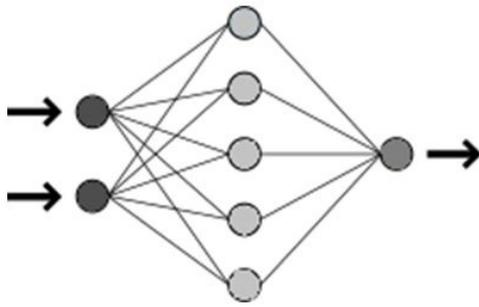


Рис. 3. Схема простой нейронной сети. Черными кружками показаны входные и выходные узлы, серыми – скрытые узлы (https://ru.wikipedia.org/wiki/Нейронная_сеть)

Сеть радиально-базисных функций представляет собой искусственную нейронную сеть, которая использует радиальные базисные функции (RBF) как функции активации. Эти функции имеют вид

$$f(x) = \varphi\left(\frac{x^2}{\sigma^2}\right),$$

например,

$$f(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma^2}\right),$$

где x – вектор входных сигналов нейрона, σ – ширина окна, φ – убывающая функция.

Метод обратного распространения ошибки – это итеративный градиентный алгоритм, который используется для минимизации ошибки работы многослойного перцептрона и получения нужного выхода. Основная идея этого метода состоит в распространении сигналов ошибки от выходов сети к ее входам, в направлении, обратном прямому распространению сигналов в обычном режиме работы.

Ортогональное дополнение сигнала. Преобразование Гильберта – Хуанга. Естественные физические процессы являются нелинейными и нестационарными. Широко распространенный подход наложения линейного строения на нелинейную систему не всегда дает достоверные результаты. Должна

быть исследована подробная динамика данных, поскольку важной характеристикой нелинейных процессов является их изменение в частотно-временной области.

Пусть имеется сигнал $S(t)$. Ортогональным дополнением этого сигнала называется сигнал $S_{or}(t)$ такой, что

$$\int_{-\infty}^{\infty} S(t) \cdot S_{or}(t) dt = 0.$$

Преобразование Гильберта (Hilbert Transform) позволяет рассчитать ортогональное дополнение сигнала:

$$S_{or}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{S(\tau)}{\pi(t-\tau)} d\tau.$$

Преобразование Гильберта есть результат свертки сигнала $S(t)$ с функцией $h(t) = 1/\pi t$, называемой ядром указанного преобразования. Частотную и фазовую характеристики этого преобразования можно получить с помощью преобразования Фурье:

$$H(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi t} \exp(-i\omega t) dt = -i \operatorname{sign} \omega.$$

Модуль и фазовый сдвиг преобразования Гильберта определяется по следующим формулам:

$$|H(\omega)| = 1, \omega \neq 0, \Phi(\omega) = -\frac{\pi}{2} \operatorname{sign} \omega.$$

Преобразование Гильберта – Хуанга (англ. ННТ) – это преобразование, которое представляет собой разложение сигнала на функции, которые получили название «эмпирических мод» (метод EMD), с последующим применением преобразования Гильберта к полученным компонентам разложения. Оно состоит в следующем.

Пусть $X(t)$ – анализируемый сигнал. Суть метода Empirical Mode Decomposition (EMD) – последовательное вычисление эмпирических мод c_j и остатков

$$r_j = r_{j-1} - c_j \quad (j = 1, 2, \dots, n),$$

$$r_0 = X(t).$$

В результате вычислений получается разложение сигнала вида

$$X(t) = \sum_{j=1}^n c_j + r_n,$$

где n – количество эмпирических мод, которое устанавливается в ходе вычислений.

Применение методов обработки сигналов к исследованию регуляции мозгового кровообращения

В работе [10] представлены методы обработки сигналов; при этом авторы сами оговаривают, что данные методы рассмотрены вне влияния на результаты и их воспроизводимость. В другом исследовании [11] утверждается, что отклик скорости мозгового кровотока (CBFV) можно интерпретировать как своего рода пошаговый ответ системы контроля и количественно определять с помощью индекса ауторегуляции (ARI) в диапазоне значений от 0 до 9.

Другой подход к количественной оценке динамической церебральной ауторегуляции (DCA) состоит в анализе передаточной функции (TFA) предполагаемой системы линейного контроля, где в качестве входного сигнала берется системное артериальное давление (SAP), а в качестве выходного – скорость мозгового кровотока (CBFV) [12–14]. При этом коэффициент усиления и фаза передаточной функции оцениваются по авто- и кросс-спектрам SAP и CBFV, а уровень линейной зависимости между ними выражается согласованностью системы. Анализ передаточной функции позволяет найти функцию отклика шага и затем оценить ARI системы, используя метод наименьших квадратов. Для каждого из 10 ARI-ответов определяется сумма квадратов разностей с TFA-ответом. Ограничивающим фактором в клиническом использовании величины DCA выступает высокая вариабельность, наблюдаемая в расчетных параметрах, таких как усиление, фаза и ARI.

Передаточная функция была рассчитана следующим образом [12 – 14]:

$$H(f) = \frac{S_{xy}(f)}{S_{xx}(f)},$$

где $S_{xx}(f)$ – автоспектр изменения SAP, $S_{xy}(f)$ – кросс-спектр между SAP- и CBFV- сигналами.

Величина передаточной функции $|H(f)|$ и фазовый спектр $U(f)$ были получены из вещественной ($H_R(f)$) и мнимой ($H_I(f)$) частей передаточной функции как

$$|H_f| = \sqrt{[H_R(f)]^2 + [H_I(f)]^2},$$

$$U(f) = \arctg \frac{H_I(f)}{H_R(f)}.$$

Квадратичная функция когерентности $\gamma^2(f)$ была вычислена как

$$\gamma^2(f) = \frac{|S_{xy}(f)|^2}{S_{xx}(f)S_{yy}(f)},$$

где $S_{yy}(f)$ – автоспектр изменения CBFV.

Квадратичная функция когерентности отражает глубину линейной связи между SAP и CBFV для каждой частоты в пределах от 0 до 1.

Имеется альтернативный подход для преодоления некоторых трудностей вышеописанного метода: спектральный Фурье-анализ данных, полученных путем мультимодального анализа давления-потока (MMPF) [14, 15]. Авторы показали, что анализ MMPF может быть менее чувствительным к нестационарности данных и их трендам. В исследовании пациентов с черепно-мозговыми травмами была показана лучшая воспроизводимость данных MMPF, по сравнению с ARI [16]. Также была предпринята попытка применить нелинейные подходы для оценки DCA [17, 18], однако не были доказаны явные преимущества таких подходов.

Чтобы обеспечить надежную интерпретацию результатов оценки DCA, уровни ко-

герентности должны превышать уровень, выше которого когерентность существенно отличается от нуля. Вычисления, основанные на степенях свободы, привели к минимально необходимому квадрату уровня когерентности 0,06 для 15-минутных эпизодов спонтанного дыхания и 0,20 для 5-минутных периодов дыхания по 6 цикл/мин.

По данным ряда авторов, оценку состояния динамической ауторегуляции мозгового кровотока с помощью анализа передаточной функции следует проводить при наличии уровня когерентности не менее 0,5 – 0,6 [19].

Алгоритм проведения кросс-спектрального анализа состоит в следующем:

Шаг 1. Рассчитываются амплитуды линейной скорости кровотока (BFV) и системного артериального давления (SAP) в диапазонах внутричерепных *V*-волн и волн Майера (*M*-волны).

Шаг 2. Рассчитывается когерентность между *M*-волнами артериального давления и линейной скоростью кровотока (BFV); важен участок, где значение когерентности не менее 0,5.

Шаг 3. Рассчитывается фазовый сдвиг между *M*-волнами артериального давления и

скоростью кровотока.

На рис. 4 – 7 приведены примеры расчетных частотных зависимостей, полученных по приведенному алгоритму. По горизонтальной шкале откладывается частота медленных колебаний системной и церебральной гемодинамики. Видно, что наиболее информативная часть соответствующих зависимостей лежит в области, где когерентность превышает значение 0,5.

В работе [20] изучено влияние спонтанных колебаний среднего артериального давления от одного сердечного сокращения до следующего и конечных приливных колебаний углекислого газа от одного вдоха до следующего на ритмические колебания скорости мозгового кровотока с использованием методологии сети Лагерра – Вольтерра для нелинейных множественных входов. Полученные результаты также указывают на нелинейность и динамичность церебральной ауторегуляции (зависимость от частоты медленных колебаний системной и церебральной гемодинамики частоты). Нелинейности оказываются активными, как правило, в низкочастотном диапазоне (ниже 0,04 Гц). Модели также обнаруживают значительные нестационарности ритмических колебаний

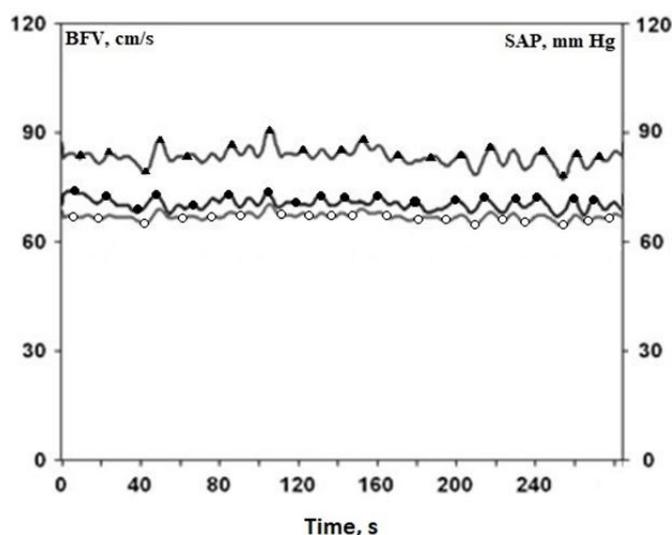


Рис. 4. Непрерывная регистрация в течение 4 мин SAP – системного артериального давления (верхняя кривая) и BFV – линейной скорости кровотока в правой (R) и левой (L) средних мозговых артериях (средняя и нижняя кривые соответственно)



скорости мозгового кровотока, причем большая вариабельность присуща влиянию углекислоты на динамику этой скорости.

В работе [21] эффекты различных методов спектральной оценки сигналов сравнивались между собой с использованием смоделированных и клинических данных. Было показано, что данные при отсутствии трен-

да могут привести к искусственному пику в низкочастотной области оценочных спектров мощности. Это указывает на недостаток использованной модели, и пик нельзя брать в качестве доказательства того, что эти колебания имеют физиологическую основу. Там же [21] описан количественный метод, который можно применять для оценки низ-

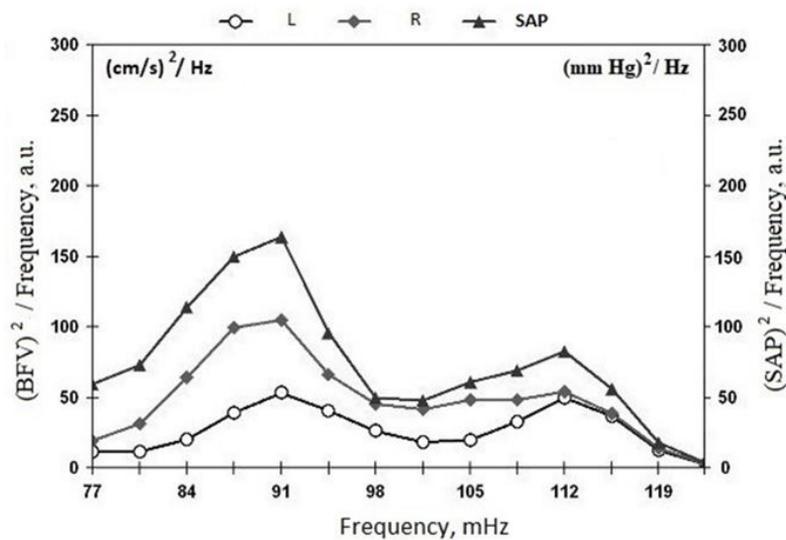


Рис. 5. Нормализованные на частоту амплитудно-частотные характеристики SAP (верхняя кривая) и BFV в правой (R) и левой (L) средних мозговых артериях (средняя и нижняя кривые соответственно) в диапазоне *B*- и *M*-волн. Пример расчетных результатов

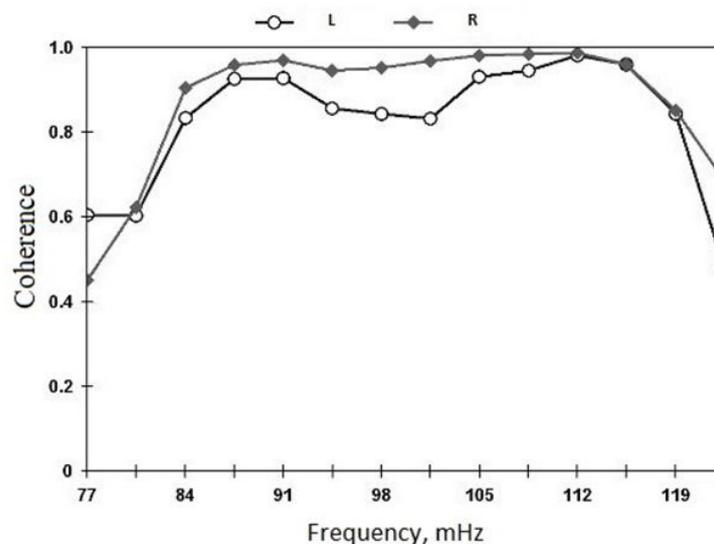


Рис. 6. Пример рассчитанной когерентности между *M*-волнами SAP и BFV в правой (R) и левой (L) средних мозговых артериях в диапазоне *B*- и *M*-волн (важен участок, где когерентность не менее 0,5)

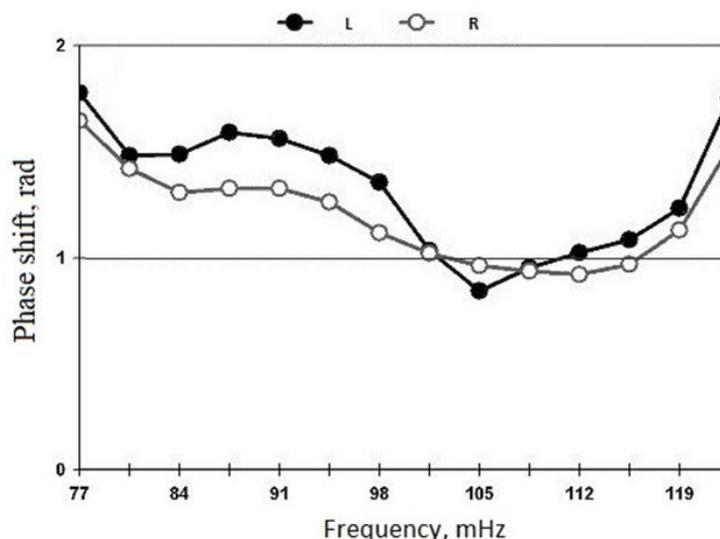


Рис. 7. Рассчитанные частотные характеристики фазового сдвига между *M*-волнами SAP и BFV в правой (R) и левой (L) средних мозговых артериях в диапазоне *B*- и *M*-волн

кочастотных колебаний. С помощью этого метода низкочастотные колебания в тренде линейной скорости кровотока в магистральных церебральных артериях, измеренной с помощью транскраниальной доплерографии, были обнаружены у десяти из семнадцати здоровых взрослых (средняя частота указанных колебаний составляла $0,021 \pm \pm 0,007$ Гц), что согласуется с более ранними результатами.

В работе [22] подчеркивается, что традиционные математические подходы, основанные на теориях стационарных сигналов, не могут решать проблемы, связанные с нестационарностью, и, следовательно, не позволяют надежно оценивать нелинейные взаимодействия в физиологических системах. В обзоре [22] авторы обсуждают новый метод мультимодального анализа давления-потока (MMPF), в котором применяется преобразование Гильберта – Хуанга для количественной оценки динамической церебральной ауторегуляции (DCA). Метод использован для изучения взаимодействия между нестационарной скоростью мозгового кровотока (CBFV) и артериальным давлением (SAP). DCA является важным механизмом, ответственным за контроль мозгового кровотока

в ответ на колебания системного давления за период нескольких сердечных сокращений. Состояние DCA традиционно оценивают по взаимосвязи между хорошо выраженными системными колебаниями SAP и BFV, вызванными клиническими испытаниями. Однако надежная неинвазивная оценка DCA остается по-прежнему нерешенной проблемой в клинической и диагностической медицине. Этот краткий обзор [22] предоставляет следующую информацию:

- результаты анализа передаточной функции (TFA), который традиционно используется для количественного определения состояния DCA;

- описание метода MMPF и его модификации;

- алгоритм и технические аспекты улучшенного метода MMPF;

- обзор клинического применения MMPF и его чувствительности для выявления аномалий DCA в клинических исследованиях.

Применение метода MMPF позволяет разлагать сложные нестационарные сигналы SAP и CBFV на несколько эмпирических режимов адаптивно, так что флуктуации, вызванные определенным физиологическим процессом, можно представлять в соответ-



ствующем эмпирическом режиме. Используя эту технику, авторы показали, например, что для DCA характерны конкретные фазовые задержки между колебаниями SAP и CBFV и что фазовые сдвиги значительно снижаются у пациентов с гипертонической болезнью, с диабетом и с инсультом с нарушенной DCA. Кроме того, новый метод позволяет надежно оценивать состояние DCA, если использовать не только данные, собранные во время клинических испытаний, но и самопроизвольные колебания SAP/CBPV в условиях отдыха.

В работах [23, 24] динамическая ауторегуляция церебральной гемодинамики у здоровых людей изучается с использованием сети Лагерра – Вольтерра для систем с быстрой и медленной динамикой. Поскольку ауторегуляция мозга определяется различными физиологическими механизмами со значительно отличающимися временными факторами, этот подход используется для демонстрации эффективности нового метода. Результаты представлены авторами как во времени, так и в частотных областях. Они показали, что церебральная ауторегуляция представляет собой нелинейную и динамическую частотно-зависимую систему со значительной нестационарностью. Количественное определение последней показывает большую изменчивость в определенных полосах частот для каждого субъекта в диапазонах низких и средних частот ниже 0,1 Гц. Нелинейная динамика выделяется также в нижней и средней части диапазона, где частотный ответ системы проявляет себя в меньшей степени.

Цель исследования в работе [25] состояла в анализе низкочастотных изменений в MAP и ICP с помощью альтернативного алгоритма, разработанного на основе индекса пресорной реактивности (PRx); последний использует поминутные значения MAP и ICP для их корреляции с результатами наблюдения пациентов через 6 мес. Величину L-PRx рассчитывали как коэффициент подвижной линейной корреляции (Пирсона), используя минутное значение во временном окне продолжительностью 20 мин из 20 последова-

тельных значений MAP и ICP. Эпизоды без артефактов MAP и ICP и полученные CPP и L-PRx, а также значения MD были усреднены по времени, поэтому каждый пациент был охарактеризован одним набором данных. Обычно использовались непараметрические статистические методы, поскольку большинство наших переменных не соответствовало нормальному распределению, в частности, ранговый коэффициент корреляции Спирмена. Статистический анализ проводился с использованием статистического пакета SPSS v18.0 (SPSS, Chicago, IL, USA).

В работе [26] указано, что решение о том, какой метод использовать для количественной оценки церебральной ауторегуляции, остается вопросом личного выбора. Однако следует заметить, что анализ передаточной функции продолжает оставаться популярным подходом, принятым в исследованиях, основанных на изучении спонтанных колебаний артериального давления.

Целью работы [26] является улучшение стандартизации параметров и настроек, принятых для анализа передаточной функции в исследованиях динамической церебральной ауторегуляции. Динамическая взаимосвязь между артериальным давлением и церебральным кровотоком (CBF) имеет характеристики фильтра верхних частот. Предполагается, что адаптация церебральных артериол в ответ на изменения давления происходит недостаточно быстро, для того чтобы противостоять высокочастотным колебаниям (свыше 0,20 Гц) CPP. Как следствие, высокочастотные колебания беспрепятственно преобразуются в колебания в CBF. Напротив, более медленные колебания частоты (ниже 0,20 Гц, но наиболее эффективно ниже 0,05 Гц) могут противодействовать церебральным артериолам и поэтому ослабляются.

Авторы работы констатируют, что были разработаны различные методы неинвазивной оценки DCA, основанные на спонтанных колебаниях SAP и CBF в покое, т. е.

анализ коэффициента корреляции (Mx), определение ауторегуляторного индекса, анализ передаточной функции (TFA),

нелинейный анализ с использованием разложений Лагерра ядер Вольтерра, или авторегрессия,

мультимодальный анализ давления-потока.

Следует все же признать упрощением, когда предполагается, что все эти методы позволяют измерять динамическую ауторегуляцию. Методы лишь предоставляют метрики для описания взаимосвязи между давлением и расходом, и в действительности эти параметры подвержены многим другим воздействиям, кроме СА. Использование функции когерентности может помочь определить условия, когда оценки усиления и фазы могут оказаться ненадежными. На каждой частоте когерентность может варьироваться от нуля до единицы. Это аналог квадрата коэффициента корреляции. Он по сути выражает долю выходной дисперсии, которую можно трактовать как соответствующую входную мощность на каждой частоте. Для линейных систем с высоким отношением сигнал/шум (SNR) и одномерным отношением входная/выходная мощность, когерентность равна единице. С другой стороны, когерентность будет приближаться к нулю, если значение SNR низкое, системы обладают существенной нелинейностью или если есть другие переменные, влияющие на выходную мощность.

Несмотря на солидный теоретический опыт применения анализа трансферной функции, практическая реализация TFA предполагает выбор относительно большого количества параметров и настроек. Литературные данные по применению TFA для ДСА обнаруживают значительные различия в практическом использовании, что ограничивает сравнение результатов подобных исследований и препятствует продвижению клинического применения этих методов. Например, одним из последствий указанного отсутствия стандартизации была трудность установить четко определенные пределы того, что считать нормальным, а что нарушенными состояниями ауторегуляции [27, 28].

В работе [29] представлены современные данные о сути метода анализа передаточной

функции, ее месте среди способов изучения церебральной ауторегуляции, а также о его преимуществах и недостатках. Показано, что ауторегуляция мозгового кровотока во многом определяет взаимоотношения между мозговым кровотоком и церебральным перфузионным давлением, поэтому информация о состоянии ауторегуляции важна для диагностики и прогнозирования нарушений мозгового кровообращения. Динамическая ауторегуляция мозгового кровотока представляет собой частотно-зависимый феномен, функционируя как фильтр высоких частот. Анализ передаточной функции является одним из трех наиболее часто используемых способов изучения динамической церебральной ауторегуляции, который за два последних десятилетия получил существенное развитие и применение.

Заключение

Анализ современных исследований, посвященных регуляции мозгового кровообращения человека, показал, что в большинстве из них используются методы обработки сигналов, поступающих от измерительных комплексов с преобразованием этих сигналов в цифровую форму. Остается предметом дискуссии специалистов, какими считать процессы регуляции – линейными или нелинейными. В первом случае имеется набор хорошо известных методов анализа, что упрощает процесс исследования. Однако следует отметить, что реальные процессы являются сугубо нелинейными. Анализ нелинейных систем является бурно развивающимся направлением современной науки, но на сегодняшний день нет единого мнения о наилучшем описании реальных взаимодействий в организме. Ясно, что необходимо привлекать весь арсенал достижений математической науки к обработке сигналов, принимаемых с медицинского оборудования. Таким образом, предстоит еще большая работа по развитию и совершенствованию систем мониторинга и анализа системы регуляции мозгового кровообращения.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (договор № 19-29-01190\19 по теме «Разработка и применение методов математического анализа физиологических параметров

для оперативной диагностики патологических состояний пациентов с оценкой рисков их перехода в критические состояния в режиме реального времени»).

Приложение

Список общепринятых аббревиатур медицинских терминов, использованных в статье

Термин	Русское	Английское
Центральное венозное давление	ЦВД	CVP
Внутричерепное давление	ВЧД	ICP
Церебральное перфузионное давление	ЦПД	CPP
Системное артериальное давление	САД	SAP
Ауторегуляция мозгового кровотока	АРМК	AR
Линейная скорость кровотока	ЛСК	BFV
Средняя мозговая артерия	СМА	MCA
Индекс ауторегуляции	Индекс АРМК	ARI
Динамическая церебральная ауторегуляция	ДЦА	DCA
Скорость мозгового кровотока	СМК	CBFV
Мультимодальный анализ давления-потока	ММДП	MMPF
Микродиализ	МД	MD
Мозговой кровоток	МК	CBF
Быстрое преобразование Фурье	БПФ	FFT
Максимум модуля вейвлет-преобразования	ММВП	WTMM
Искусственные нейронные сети	ИНС	ANN
Радиальные базисные функции	РБФ	RBF
Преобразование Гильберта – Хуанга	ПГХ	HHT
Последовательное вычисление эмпирических мод	ПВЭМ	EMD
Анализ трансферной функции	АТФ	TFA
Отношение сигнал / шум	ОСШ	SNR

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Регуляция мозгового кровообращения. Ауторегуляция. Режим доступа: https://meduniver.com/Medical/Xirurgia/autoregulaciya_mozgovogo_krovoobrachenia.html

2. Лемешко Б.Ю., Лемешко С.Б., Постовалов С.Н., Чимитова Е.В. Статистический анализ данных, моделирование и исследование вероятностных закономерностей. Компьютерный подход. Раздел 4.9. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2011. 888 с.

3. Никулин М.С. Критерий хи-квадрат для непрерывных распределений с параметрами сдвига и масштаба // Теория вероятностей и ее применение. 1973. №3 (18) С. 583–591.

4. Нуссбаумер Г. Быстрое преобразование Фурье и алгоритмы вычисления сверток. М.: Радиоисвязь, 1985. 282 с.

5. Domínguez A. A history of the convolution operation // IEEE Pulse. 2015. Vol. 6. No. 1. Pp. 38–49.

6. **Антонов В.И., Загайнов А.И., Ву Ван Ку-анг.** Динамический фрактальный анализ вариабельности сердечного ритма // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика. Телекоммуникации. Управление. 2012. №1 (140) С. 88–94.
7. **Antonov V., Zagaynov A.** Software package for calculating the fractal and cross spectral parameters of cerebral hemodynamic in a real time mode // *New Trends in Stochastic Modeling and Data Analysis*. Ch. 7. Demography and Related Applications. ISAST, 2015. Pp. 339–345.
8. **Добеши И.** Десять лекций по вейвлетам. Ижевск: НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, 2001. 464 с.
9. **Antonov V., Tarkhov D., Vasilyev A.** Unified approach to constructing the neural network models of real objects. Part 1. // *Mathematical Methods in the Applied Science*. 2018. Vol. 41. No. 18. Pp. 9244–9251.
10. **Gommer E.D., Shijaku E., Mess W.H., Reulen J.P.H.** Dynamic cerebral autoregulation: different signal processing methods without influence on results and reproducibility // *Medical & Biological Engineering & Computing*. 2010. Vol. 48. No. 12. Pp. 1243–1250.
11. **Tiecks F.P., Lam A.M., Aaslid R., Newell D.W.** Comparison of static and dynamic cerebral autoregulation measurements // *Stroke*. 1995. Vol. 26. No. 6. Pp. 1014–1019.
12. **Blaber A.P., Bondar R.L., Stein F., Dunphy P.T., Moradshahi P., Kassam M.S., Freeman R.** Transfer function analysis of cerebral autoregulation dynamics in autonomic failure patients // *Stroke*. 1997. Vol. 28. No. 9. Pp. 1686–1692.
13. **Panerai R.B., Dawson S.L., Potter J.F.** Linear and nonlinear analysis of human dynamic cerebral autoregulation // *American Journal of Physiology (Heart and Circulatory Physiology)*. 1999. Vol. 277. No. 3. Pp. H1089–H1099.
14. **Zhang R., Zuckerman J.H., Giller C.A., Levine B.D.** Transfer function analysis of dynamic cerebral autoregulation in humans // *American Journal of Physiology (Heart and Circulatory Physiology)*. 1998. Vol. 274. No. 1. Pp. H233–H241.
15. **Czosnyka M., Smielewski P., Lavinio A., Pickard J.D., Panerai R.** An assessment of dynamic autoregulation from spontaneous fluctuations of cerebral blood flow velocity: a comparison of two models, index of autoregulation and mean flow index // *Anesthesia & Analgesia*. 2008. Vol. 106. No. 1. Pp. 234–239.
16. **Novak V., Yang A.C., Lepicovsky L., Goldberger A.L., Lipsitz L.A., Peng C.-K.** Multimodal pressure-flow method to assess dynamics of cerebral autoregulation in stroke and hypertension // *BioMedical Engineering Online*. 2004. Vol. 3. No. 1. P. 39.
17. **Hu K., Peng C.K., Czosnyka M., Zhao P., Novak V.** Nonlinear assessment of cerebral autoregulation from spontaneous blood pressure and cerebral blood flow fluctuations // *Cardiovascular Engineering*. 2008. Vol. 8. No. 1. Pp. 60–71.
18. **Liau B.Y., Yeh S.J., Chiu C.C., Tsai Y.C.** Dynamic cerebral autoregulation assessment using chaotic analysis in diabetic autonomic neuropathy // *Medical & Biological Engineering & Computing*. 2008. Vol. 46. No. 1. Pp. 1–9.
19. **Семенютин В.Б., Печиборщ Д.А., Алиев В.А.** Оценка динамической ауторегуляции мозгового кровотока с помощью передаточной функции // *Вестник Российской военно-медицинской академии*. 2013. № 2 (42). С. 180–188.
20. **Mitsis G.D., Poulin M.J., Robbins P.A., Marmarelis V.Z.** Nonlinear modeling of the dynamic effects of arterial pressure and CO₂ variations on cerebral blood flow in healthy humans // *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*. 2004. Vol. 51. No. 11. Pp. 1932–1943.
21. **Müller T., Reinhard M., Oehm E., Hetzel A., Timmer J.** Detection of very low-frequency oscillations of cerebral haemodynamics is influenced by data detrending // *Medical & Biological Engineering & Computing*. 2003. Vol. 4. No.1. Pp. 69–74.
22. **Lo M.T., Novak V., Peng C.-K., Liu Y., Hu K.** Nonlinear phase interaction between non-stationary signals: a comparison study of methods based on Hilbert – Huang and Fourier transforms // *Physical Review. E*. 2009. Vol. 79. No. 6. P. 061924.
23. **Mitsis G.D., Marmarelis V.Z.** Modeling of nonlinear physiological systems with fast and slow dynamics. I. Methodology // *Annals of Biomedical Engineering*. 2002. Vol. 30. No. 2. Pp. 272–281.
24. **Mitsis G.D., Zhang R., Levine B.D., Mar-**



marelis V.Z. Modeling of nonlinear physiological systems with fast and slow dynamics. II. Application to cerebral autoregulation // *Annals of Biomedical Engineering*. 2002. Vol. 30. No. 4. Pp. 555–565.

25. **Sánchez-Porrás R., Santos E., Czosnyka M., Zheng Z., Unterberg A.W., Sakowitz O.W.** ‘Long’ pressure reactivity index (L-PRx) as a measure of autoregulation correlates with outcome in traumatic brain injury patients // *Acta Neurochirurgica*. 2012. Vol. 154. No. 9. Pp. 1575–1581.

26. **Claassen J.A.H.R., Meel-van den Abeelen A.S.S., Simpson D.M., Panerai R.B.** Transfer function analysis of dynamic cerebral autoregulation: A white paper from the international cerebral autoregulation research network // *Journal of Cerebral Blood Flow & Metabolism*. 2016. Vol. 36.

No. 4. Pp. 665–680.

27. **Bendat J.S., Piersol A.G.** Decomposition of waveforces into linear and nonlinear components // *Journal of Sound and Vibration*. 1986. Vol. 106. No. 3. Pp. 391–408.

28. **Panerai R.B.** Assessment of cerebral pressure autoregulation in humans – a review of measurement methods // *Physiological Measurement*. 1998. Vol. 19. No. 3. Pp. 305–338.

29. **Semenyutin V., Asaturyan G., Nikiforova F., Aliev V., Panuntsev G., Ibyaminov V., Savello A., Patzak A.** Predictive value of dynamic cerebral autoregulation assessment in surgical management of patients with high-grade carotid artery stenosis // *Frontiers in Physiology*. 2017. Vol. 8. November. P. 872.

Статья поступила в редакцию 19.04.2020, принята к публикации 28.05.2020.

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
antonovi@mail.ru

СЕМЕНЮТИН Владимир Борисович – доктор биологических наук, заведующий лабораторией церебральной патологии Национального медицинского исследовательского центра им. В.А. Алмазова, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

197341, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Аккуратова, 2
lbcp@mail.ru

АЛИЕВ Вугар Али оглы – доктор медицинских наук, заведующий нейрохирургическим отделением СПб ГБУЗ «Елизаветинская больница», Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195257, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Вавиловых, 14
neurosurgery2@eliz.ru

REFERENCES

1. Regulation of cerebral circulation, Autoregulation. https://meduniver.com/Medical/Xirurgia/autoregulaciya_mozgovogo_krovoobraschenia.html.

2. **Lemeshko B.Yu., Lemeshko S.B., Postovalov S.N., Chimitova E.V.** Statisticheskiy analiz dannykh, modelirovaniye i issledovaniye veroyatnostnykh zakonomernostey. Kompyuternyy podkhod [Statistical analysis of data, modeling and study of probabilistic trends. Computer approach],

Novosibirsk State Technical University Publishing, Novosibirsk, 2011.

3. **Nikulin M.S.**, Chi-square test for continuous distributions with location and scale parameters, *Theory of Probability and its Applications*. 18 (3) (1973) 559–568.

4. **Nussbaumer H.J.**, Fast Fourier transform and convolution algorithms, Springer Series in Information Series, Springer-Verlag, Berlin, Heidel-

berg, 1981.

5. **Domínguez A.**, A history of the convolution operation, *IEEE Pulse*. 6 (1) (2015) 38–49.

6. **Antonov V.I., Zagaynov A.I., Vu van Quang**, The dynamic fractal analysis of heart rate variability, *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Computer Science. Telecommunications and Control Systems*. 140 (1) (2012) 88–94.

7. **Antonov V., Zagaynov A.**, Software package for calculating the fractal and cross spectral parameters of cerebral hemodynamic in a real time mode, In: *New Trends in Stochastic Modeling and Data Analysis*, Ch. 7. Demography and Related Applications, *ISAST* (2015) 339–345.

8. **Daubechies I.**, Ten lectures on wavelets, *SIAM*, Philadelphia, 1992.

9. **Antonov V., Tarkhov D., Vasilyev A.**, Unified approach to constructing the neural network models of real objects, Part 1, *Mathematical Methods in the Applied Science*. 41 (18) (2018) 9244–9251.

10. **Gommer E.D., Shijaku E., Mess W.H., Reulen J.P.H.**, Dynamic cerebral autoregulation: different signal processing methods without influence on results and reproducibility, *Medical & Biological Engineering & Computing*. 48 (12) (2010) 1243–1250.

11. **Tiecks F.P., Lam A.M., Aaslid R., Newell D.W.**, Comparison of static and dynamic cerebral autoregulation measurements, *Stroke*. 26 (6) (1995) 1014–1019.

12. **Blaber A.P., Bondar R.L., Stein F., et al.**, Transfer function analysis of cerebral autoregulation dynamics in autonomic failure patients, *Stroke*. 28 (9) (1997) 1686–1692.

13. **Panerai R.B., Dawson S.L., Potter J.F.**, Linear and nonlinear analysis of human dynamic cerebral autoregulation, *American Journal of Physiology (Heart and Circulatory Physiology)*. 277 (3) (1999) H1089–H1099.

14. **Zhang R., Zuckerman J.H., Giller C.A., Levine B.D.**, Transfer function analysis of dynamic cerebral autoregulation in humans, *American Journal of Physiology (Heart and Circulatory Physiology)*. 274 (1) (1998) H233–H241.

15. **Czosnyka M., Smielewski P., Lavinio A., et al.**, An assessment of dynamic autoregulation from spontaneous fluctuations of cerebral blood

flow velocity: a comparison of two models, index of autoregulation and mean flow index, *Anesthesia & Analgesia*. 106 (1) (2008) 234–239.

16. **Novak V., Yang A.C., Lepicovsky L., et al.**, Multimodal pressure-flow method to assess dynamics of cerebral autoregulation in stroke and hypertension, *Bio Medical Engineering Online*. 3 (1) (2004) 39.

17. **Hu K., Peng C.K., Czosnyka M., et al.**, Nonlinear assessment of cerebral autoregulation from spontaneous blood pressure and cerebral blood flow fluctuations, *Cardiovascular Engineering*. 8 (1) (2008) 60–71.

18. **Liau B.Y., Yeh S.J., Chiu C.C., Tsai Y.C.**, Dynamic cerebral autoregulation assessment using chaotic analysis in diabetic autonomic neuropathy, *Medical & Biological Engineering & Computing*. 46 (1) (2008) 1–9.

19. **Semenyutin V.B., Pechiborsch D.A., Aliev V.A.**, Transfer function assessment of dynamic cerebral autoregulation, *Annals of the Russian Academy of Medical Sciences*. (2 (42)) (2013) 180–187.

20. **Mitsis G.D., Poulin M.J., Robbins P.A., Marmarelis V.Z.**, Nonlinear modeling of the dynamic effects of arterial pressure and CO₂ variations on cerebral blood flow in healthy humans, *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*. 51 (11) (2004) 1932–1943.

21. **Müller T., Reinhard M., Oehm E., et al.**, Detection of very low-frequency oscillations of cerebral haemodynamics is influenced by data detrending, *Medical & Biological Engineering & Computing*. 4 (1) (2003) 69–74.

22. **Lo M.T., Novak V., Peng C.-K., et al.**, Nonlinear phase interaction between nonstationary signals: a comparison study of methods based on Hilbert – Huang and Fourier transforms, *Physical Review E*. 79 (6) (2009) 061924.

23. **Mitsis G.D., Marmarelis V.Z.**, Modeling of nonlinear physiological systems with fast and slow dynamics, I. Methodology, *Annals of Biomedical Engineering*. 30 (2) (2002) 272–281.

24. **Mitsis G.D., Zhang R., Levine B.D., Marmarelis V.Z.**, Modeling of nonlinear physiological systems with fast and slow dynamics, II. Application to cerebral autoregulation, *Annals of Biomedical Engineering*. 30 (4) (2002) 555–565.

25. **Sánchez-Porras R., Santos E., Czosnyka**



M., et al., ‘Long’ pressure reactivity index (L-PRx) as a measure of autoregulation correlates with outcome in traumatic brain injury patients, *Acta Neurochirurgica*. 154 (9) (2012) 1575–1581.

26. **Claassen J.A.H.R., Meel-van den Abeelen A.S.S., Simpson D.M., Panerai R.B.**, Transfer function analysis of dynamic cerebral autoregulation: A white paper from the international cerebral autoregulation research network, *Journal of Cerebral Blood Flow & Metabolism*. 36 (4) (2016) 665–680.

27. **Bendat J.S., Piersol A.G.**, Decomposi-

tion of wave forces into linear and nonlinear components, *Journal of Sound and Vibration*. 106 (3) (1986) 391–408.

28. **Panerai R.B.**, Assessment of cerebral pressure autoregulation in humans – a review of measurement methods, *Physiological Measurement*. 19 (3) (1998) 305–338.

29. **Semenyutin V., Asaturyan G., Nikiforova F., et al.**, Predictive value of dynamic cerebral autoregulation assessment in surgical management of patients with high-grade carotid artery stenosis, *Frontiers in Physiology*. 8 (November) (2017) 872.

Received 19.04.2020, accepted 28.05.2020.

THE AUTHORS

ANTONOV Valerii I.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation

antonovvi@mail.ru

SEMENYUTIN Vladimir B.

Almazov National Medical Research Centre

2 Akkuratov St., St. Petersburg, 197341, Russian Federation

lbcp@mail.ru

ALIEV Vulgar A.

Elizabethian Hospital

14 Vavilovs St., St. Petersburg, 195257, Russian Federation

neurosurgery2@eliz.ru



Научное издание

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

**«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 13, № 3, 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. Яцуржинская* – научный редактор, корректор
А.С. Колгатина – переводчик
Н.А. Бушманова – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

Сайт <http://ntv.spbstu.ru>

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.А. Кононовой*

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 двойными 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 ВИНТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНТИ РАН, а также в международную систему 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**