МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

ТОМ 15, №3

2022

Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого
2022

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

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

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – главный редактор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия, – зам. главного редактора;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Безпрозванный И.Б., д-р биол. наук, профессор, Юго-Западный медицинский центр Техасского университета, Даллас, США;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Донецкий Д.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, университет штата Нью-Йорк в Стоуни-Брук, США;
Дубов В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Карасёв П.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
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 ВИНИТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

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

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

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

Журнал индексируется в базах данных **Web of Science** (Emerging Sources Citation Index), **Scopus**, а также включен в базы данных **«Российский индекс научного цитирования»** (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте http://www.elibrary.ru, и **"Directory of Open Access Journals"** (DOAJ).

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, 2022

THE MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF THE RUSSIAN FEDERATION

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY

JOURNAL

Physics and Mathematics

VOLUME 15, No.3, 2022

Peter the Great St. Petersburg
Polytechnic University
2022

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

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

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sci., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia, – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
I.B. Bezprozvanny – Dr. Sci. (biology), prof., The University of Texas Southwestern Medical Center, Dallas, TX, USA;
A.V. Blinov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.S. Cherepanov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.V. Donetski – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., State University of New York at Stony Brook, NY, USA;
V.V. Dubov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.A. Firsov – Dr. Sci. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
P.A. Karasev – 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), **Scopus,** the **Russian Science Citation Index** (RSCI) and the **Directory of Open Access Journals** (DOAJ) 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, 2022

Содержание

Физика конденсированного состояния

Милинский А. Ю., Барышников С. В., Стукова Е. В. *Стабилизация сегнетоэлектрической фазы нитрата калия в композитах, содержащих металлические микрочастицы* 9

Молоков А. Ю., Сысоева А. А., Набережнов А. А., Королева Е. Ю. *Влияние модификации интерфейса диоксидом титана на диэлектрические свойства нанокомпозита на основе пористого стекла с нитритом натрия*..... 17

Математическое моделирование физических процессов

Борисов Д. В., Калаев В. В. *Сравнительная оценка RANS-моделей турбулентности с изотропной вязкостью для расчета конвекции расплава кремния в установках выращивания кристаллов*..... 28

Смирнов С. И., Смирнов Е. М. *Опыт применения полуэмпирических дифференциальных моделей турбулентности для расчета конвекции жидкого металла в подогреваемом снизу цилиндре*..... 43

Широкова Е. Н. *Моделирование нестационарного течения и перемешивания мелкодисперсной газовзвеси в замкнутом объеме гибридным методом крупных частиц*... 61

Григорьева П. М. *Влияние выбора ловушечной модели на адекватность описания диффузии водорода в металлы из внешней среды*..... 71

Быков Н. Ю. *Восстановление модели теплового процесса по пространственно-временным распределениям температуры* 83

Клунникова Ю. В., Аникеев М. В., Филимонов А. В. *Термоупругие напряжения при лазерном отжиге диоксида титана на сапфировой подложке (статья на английском языке)*..... 100

Засимова М. А., Маринова А. А., Иванов Н. Г., Подмаркова А. Д. *Численное моделирование воздушных потоков при обтекании сидящего теплового манекена в помещении с перемешивающей вентиляцией*..... 111

Физическая электроника

Лукша О. И., Трофимов П. А., Малкин А. Г. *Моделирование электронного потока в гиротроне с учетом шероховатости поверхности катода и тепловых эффектов в электронной пушке*..... 132

Физическое материаловедение

Третьяков А. А., Капралова В. М., Лобода В. В., Сапурина И. Ю., Сударь Н. Т. *Влияние температуры на термоэлектрический эффект в композиционном материале на основе углеродных нанотрубок и полианилина*..... 143

Пашковский Д. М., Фролова К. П., Вильчевская Е. Н. *Эффективные диффузионные свойства поликристалла*..... 154

Седова Ю. С., Бессонов Н. М., Полянский В. А. *Влияние водородного скин-эффекта на характер разрушения стальных образцов*..... 169

Радиофизика

Маркварт А. А., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А. *Синтез оконных функций для снижения методических ошибок мультиплексированных волоконно-оптических датчиков*..... 185

Механика

Тихомиров В. В. *Функционально-градиентный клин, ослабленный полубесконечной трещиной* 201

Contents

Condensed matter physics

Milinskiy A. Yu., Baryshnikov S. V., Stukova E. V. *Stabilization of the ferroelectric phase of potassium nitrate in composites containing metallic microparticles* 9

Molokov A. Yu., Sysoeva A. A., Naberezhnov A. A., Koroleva E. Yu. *Effect of interface modification by titanium dioxide on dielectric properties of sodium nitrite nanocomposite based on porous glass* 17

Simulation of physical processes

Borisov D. V., Kalaev V. V. *Comparative evaluation of RANS eddy-viscosity turbulence models for calculating the silicon melt convection in crystal growth systems*..... 28

Smirnov S. I., Smirnov E. M. *Experience of using semiempirical differential models of turbulence for calculation of liquid-metal convection in a bottom heated cylinder*..... 43

Shirokova E. N. *Simulation of an unsteady flow and mixing of fine gas suspension in a closed volume by the hybrid method of large particles*..... 61

Grigoreva P. M. *The influence of the trapping model choice on the adequate description of hydrogen diffusion into metals from external environment*..... 71

Bykov N. Yu. *Reconstructing the thermal process model using the time-space distributions of temperature*..... 83

Klunnikova Yu. V., Anikeev M. V., Filimonov A. V. *The thermoelastic stresses during laser annealing of titanium dioxide on a sapphire substrate*..... 100

Zasimova M. A., Marinova A. A., Ivanov N. G., Podmarkova A. D. *Numerical simulation of turbulent airflow and heat transfer around a seated thermal manikin in the room with mixing ventilation*..... 111

Physical electronics

Louksha O. I., Trofimov P. A., Malkin A. G. *Simulation of an electron beam in a gyrotron taking into account the cathode surface roughness and thermal effects in the electron gun*..... 132

Physical materials technology

Tretyakov A. A., Kapralova V. M., Loboda V. V., Sapurina I. Yu., Sudar N. T. *Influence of temperature on thermoelectric effect in the composite material based on carbon nanotubes and polyaniline*..... 143

Pashkovsky D. M., Frolova K. P., Vilchevskaya E. N. *Effective diffusion properties of a polycrystal* 154

Sedova Yu. S., Bessonov N. M., Polyanskiy V. A. *Influence of the hydrogen skin effect on the nature of the fracture of steel specimens* 169

Radiophysics

Markvart A. A., Liokumovich L. B., Ushakov N. A. *Synthesis of window functions for reducing systematic errors of multiplexed fiber-optic sensors*..... 185

Mechanics

Tikhomirov V. V. *Functionally graded wedge weakened by a semi-infinite crack*..... 201

Физика конденсированного состояния

Научная статья
УДК 537.226
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15301

СТАБИЛИЗАЦИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ФАЗЫ НИТРАТА КАЛИЯ В КОМПОЗИТАХ, СОДЕРЖАЩИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИЕ МИКРОЧАСТИЦЫ

А. Ю. Милинский [1], С. В. Барышников [1], Е. В. Стукова [2]✉

[1] Благовещенский государственный педагогический университет, г. Благовещенск, Россия;

[2] Амурский государственный университет, г. Благовещенск, Россия

✉ lenast@bk.ru

Аннотация. Исследованы температурные зависимости сигнала дифференциального термического анализа, диэлектрической проницаемости и амплитуды третьей гармоники композитов $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$. Показано, что у нитрата калия в этих соединениях происходит понижение температуры фазового перехода $\alpha \rightarrow \beta$ на 2 – 3 K, а температура фазового перехода $\gamma \rightarrow \alpha$ понижается вплоть до 360 K. Полученный результат можно объяснить в рамках теории Ландау – Гинзбурга с учетом экранирования частиц нитрата калия металлическими частицами олова.

Ключевые слова: сегнетоэлектрик, композит, диэлектрическая проницаемость, фазовый переход

Для цитирования: Милинский А. Ю., Барышников С. В., Стукова Е. В. Стабилизация сегнетоэлектрической фазы нитрата калия в композитах, содержащих металлические микрочастицы // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 9–16 . DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15301

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15301

STABILIZATION OF THE FERROELECTRIC PHASE OF POTASSIUM NITRATE IN COMPOSITES CONTAINING METALLIC MICROPARTICLES

A. Yu. Milinskiy [1], S. V. Baryshnikov [1], E. V. Stukova [2]✉

[1] Blagoveshchensk State Pedagogical University, Blagoveshchensk, Russia;

[2] Amur State University, Blagoveshchensk, Russia

✉ lenast@bk.ru

Abstract. In the paper, the temperature dependences of the differential thermal analysis signal, permittivity, and amplitude of the third harmonic of the $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ composites have been studied. It was shown that the temperature of the $\alpha \rightarrow \beta$ phase transition decreased by 2 – 3 K in the potassium nitrates being parts of the composites, and the temperature of the $\gamma \rightarrow \alpha$ phase transition decreased up to 360 K. This result can be explained within the framework of the Landau – Ginzburg theory, taking into account the shielding of potassium nitrate particles by tin metal particles.

© Милинский А. Ю., Барышников С. В., Стукова Е. В., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Keywords: ferroelectric, composite, permittivity, phase transition

For citation: Milinskiy A. Yu., Baryshnikov S. V., Stukova E. V., Stabilization of the ferroelectric phase of potassium nitrate in composites containing metallic microparticles, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 9–16. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15301

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

Введение

Сегнетоэлектрики активно исследуются как материалы для создания энергонезависимой памяти сверхвысокой плотности, благодаря высоким значениям диэлектрической проницаемости, способности изменять направление поляризации и хранить энергию [1]. В настоящее время интенсивно ведутся экспериментальные работы, направленные как на синтез новых сегнетоэлектрических соединений [2], так и на улучшение полярных свойств уже известных материалов. Одним из способов модификации сегнетоэлектрических свойств веществ является создание композитов на их основе [3 – 5]. Сегнетоэлектрические композиты могут иметь различную структуру (она зависит от природы и сочетаемости компонентов), формируемую в полярной матрице разными частицами: полярными, неполярными, металлическими и т. п.

Одним из перспективных сегнетоэлектриков для применения в устройствах микроэлектроники является нитрат калия KNO_3, поскольку он обладает достаточно высоким значением спонтанной поляризации $P_s \approx 10$ мкКл/см^2 [6]. Однако использованию нитрата калия для этих целей препятствуют особенности его свойств: при комнатной температуре он не обладает спонтанной поляризацией, а полярная фаза этого соединения стабильна только в узком температурном интервале – при охлаждении от 397 до ~373 K [6]. Большое количество работ в последнее время посвящено попыткам расширить температурный интервал существования сегнетоэлектрической фазы KNO_3 до комнатной температуры [7 – 10]. Из нитрата калия изготавливали тонкие пленки [7], композиты [8] и нанокомпозиты [9, 10]. Во всех перечисленных работах обнаружено расширение температурной области существования полярного состояния KNO_3.

В данной работе приводятся результаты исследования тепловых и диэлектрических свойств композитов $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ (x = 0, 0,10 и 0,20), полученных при смешивании порошка нитрата калия и микрошариков олова размером 20 – 38 мкм.

Образцы и методика эксперимента

Калиевая селитра KNO_3 при нормальных условиях находится в параэлектрическом состоянии и имеет пространственную группу *Pmcn* [6]. Эту фазу, как правило, обозначают буквой α. При нагреве нитрата калия до 401 K происходит структурный фазовый переход в другую, параэлектрическую β-фазу, имеющую структуру $R\bar{3}m$. При последующем охлаждении от 453 K фаза I переходит в промежуточную, сегнетоэлектрическую γ-фазу, с пространственной симметрией $R3m$, и при температуре около 373 K γ-фаза трансформируется в α-фазу. Спонтанная поляризация P_s γ-фазы составляет около 1 – 2 мкКл/см^2 при 393 K [6]. В работе [11] было показано, что температурный интервал стабильности полярного состояния в нитрате калия зависит от тепловой предыстории и скорости охлаждения.

Для получения композитов $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ использовался химически чистый нитрат калия KNO_3 и микрошарики олова Sn размером 20 – 38 мкм. Порошок нитрата калия перемешивался с микрошариками олова в разных соотношениях (x = 0,1 и 0,2 (x – объемная доля)) в течение 10 мин в агатовой ступке. Далее из полученного порошка, под давлением 7500 кг/см^2, прессовались образцы в виде дисков толщиной 1 мм и радиусом 5 мм. На рис. 1 представлена электронная фотография образца из смеси порошка нитрата калия и шариков олова с объемной долей x = 0,2.

© Milinskiy A. Yu., Baryshnikov S. V., Stukova E. V., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

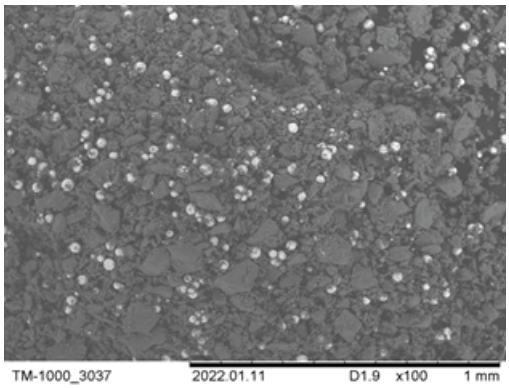


Рис. 1. Электронная фотография смеси $(KNO_3)_{0,8}/Sn_{0,2}$

Для измерений электрофизических характеристик на образцы наносили в качестве электродов индий-галлиевую пасту.

Для получения температурных зависимостей диэлектрической проницаемости ε' использовался измеритель Е7-25. Для проведения нелинейных диэлектрических измерений композитов $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ использовалась установка, описанная в статье [12]. В процессе измерения температурных зависимостей коэффициента $\gamma_{3\omega} = U_{3\omega}/U_{1\omega}$ напряженность электрического поля на образце составляла около 100 В/мм. Температура определялась с точностью 0,1 К при помощихромель-алюмелевой термопары и термометра ТС-6621.

Для исследования композитов $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ методом дифференциального термического анализа (ДТА) использовался совмещенный термический анализатор Linseis STA PT 1600 (производство США), позволяющий одновременно проводить исследования по гравиметрии и ДТА.

Измерения величин ε' и $\gamma_{3\omega}$ проводились в диапазоне температур от 300 до 453 К со скоростью 2 К/мин. Максимальная температура нагрева 453 К выбрана из тех соображений, что в объемном нитрате калия сегнетоэлектрическая фаза не формируется при нагреве до меньших температур.

Экспериментальные результаты

На рис. 2 представлены зависимости $\varepsilon'(T)$ для композитов $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ ($x = 0$, 0,10, 0,20), полученные при нагреве и охлаждении. Для чистого KNO_3 ($x = 0$) в режиме нагрева в интервале 401 – 410 К наблюдается резкий рост зависимости $\varepsilon'(T)$, вызванный фазовым переходом $\alpha \rightarrow \beta$. При охлаждении образца на кривой прослеживается дополнительная ступенька, свидетельствующая о формировании промежуточной сегнетоэлектрической γ-фазы [6].

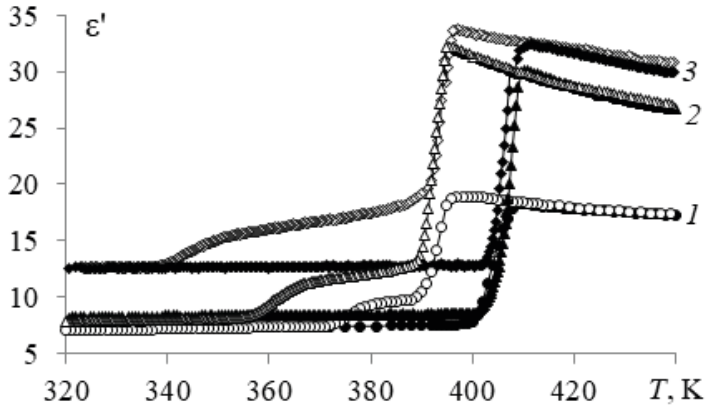


Рис. 2. Температурные зависимости $\varepsilon'(T)$ композита $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ для разных значений x: 0 (*1*), 0,1 (*2*), 0,2 (*3*); затушеванные маркеры – нагрев, пустые – охлаждение

Для композитов $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ (x = 0,10, 0,20) зависимости $\varepsilon'(T)$ сильно размыты (см. рис. 2). Фазовый переход $\alpha \rightarrow \beta$ в пределах 1 − 2 K совпадает с аналогичным переходом в чистом нитрате калия. При охлаждении смыкание кривой $\varepsilon'(T)$, полученной при нагреве, с соответствующей кривой, полученной при охлаждении, происходит при меньших температурах, чем для чистого нитрата калия. Это косвенно указывает на понижение температуры структурного перехода $\gamma \rightarrow \alpha$. Помимо этого, происходит рост значений диэлектрической проницаемости при увеличении объемной концентрации микрочастиц олова.

По данным ДТА для чистого KNO_3 (рис. 3), в режиме нагрева наблюдается один фазовый переход: $\beta \rightarrow \alpha$ около 407 K. При охлаждении фиксируются уже два фазовых перехода: первый, $\alpha \rightarrow \gamma$, наблюдается при температуре около 394 K, а второй, $\gamma \rightarrow \beta$, − около 371 K, что соответствует известным литературным данным [6].

Результаты измерения сигнала ДТА композитов $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ (см. рис. 3) указывают на наличие одного фазового перехода в процессе нагрева при 406 и 405 K для x = 0,10 и 0,20 соответственно. В режиме охлаждения температура перехода $\alpha \rightarrow \gamma$ составляет 392 и 391 K, а перехода $\gamma \rightarrow \beta$ − 368 и 361 K для x = 0,10 и 0,20 соответственно.

Для определения границ существования сегнетоэлектрической фазы в образцах $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ (x = 0, 0,10, 0,20) были проведены исследования температурной зависимости коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$. В режиме охлаждения рост коэффициента третьей гармоники $\gamma_{3\omega}$ для образцов $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ наблюдался в интервалах температур 397 − 373 K, 394 − 362 K и 394− 353 K (рис. 4).

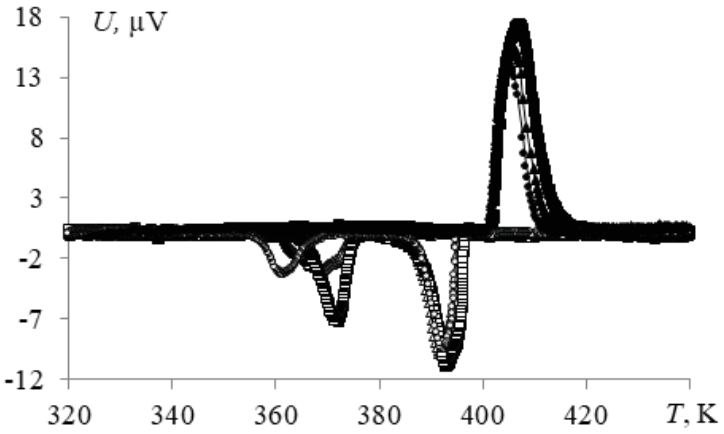


Рис. 3. Температурные зависимости сигнала ДТА композита $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ для x = 0 (■), 0,1 (▲) и 0,2 (●); затушеванные маркеры − нагрев, пустые − охлаждение

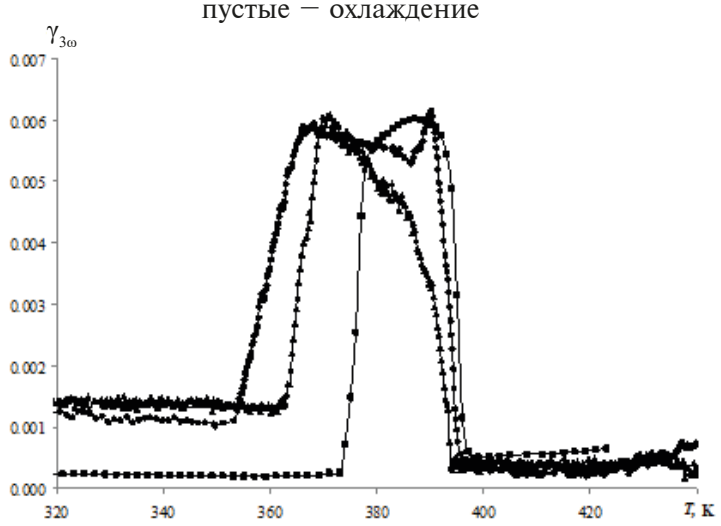


Рис. 4. Температурные зависимости $\gamma_{3\omega}$ композита $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ для x = 0 (■), 0,1 (▲) и 0,2 (●); затушеванные маркеры − нагрев, пустые − охлаждение

Обсуждение результатов

Для интерпретации полученных результатов, в частности снижения температуры Кюри нитрата калия, входящего в состав композита $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$, рассмотрим массив частиц, находящихся на некотором расстоянии друг от друга. Запишем свободную энергию F композита как сумму энергии частиц KNO_3 и энергии взаимодействия частиц KNO_3 с частицами Sn:

$$F = \sum_i \left(F_{0i} + \frac{1}{2}\alpha P_i^2 + \frac{1}{4}\beta P_i^4 + \frac{1}{2}\delta\left(\nabla P_i\right)^2 \right) d\nu_i + \sum_i \int_{S_i} \Delta F_{S_i} dS_i, \qquad (1)$$

где P_i – поляризация частиц KNO_3, которая есть функция температуры и координат; α, β, δ – коэффициенты разложения, в общем случае зависящие от температуры; v_i, S_i – объем и площадь поверхности i-й частицы соответственно; ΔF_{S_i} – поверхностная свободная энергия.

Интегрирование поверхностной свободной энергии по площади S_i имеет вид

$$\int_{S_i} \Delta F_{S_i} dS_i = \int_{S_i} \sigma_i dS_i + \int_{S_i} \varphi_i \delta_i dS_i + \int_{S_i} \mu_i dN_i,$$

где σ_i – поверхностное натяжение, φ_i – электрический потенциал, δ_i – плотность поверхностного заряда, μ_i – химический потенциал, N_i – число частиц.

Первое слагаемое в выражении (1) учитывает так называемый барический эффект. Он может проявляться как в повышении, так и в понижении температуры структурного перехода, в зависимости от знака барического коэффициента и соотношения коэффициентов теплового расширения компонентов композита. Второе слагаемое учитывает энергию поля экранирования частиц KNO_3 металлическими частицами Sn. Третье показывает энергию электрического поля, возникающего в результате разной работы выхода электронов из частиц KNO_3 и из металлических частиц Sn.

Наличие значительной поверхности межфазных границ в композите $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ дает существенный вклад в энергию композита и в уменьшение эффективного поля в частицах KNO_3. Это может приводить к изменению температуры Кюри и спонтанной поляризации. Согласно теории Ландау–Гинзбурга, изменение температуры Кюри при учете энергии ΔF_s будет выражаться как

$$\tilde{T}_C = T_C - \frac{1}{\alpha_0} \int_S \Delta F_{S_i} dS.$$

Наибольший вклад в сдвиг температуры сегнетоэлектрического фазового перехода могут давать экранирующие поля, приводящие к перестройке доменной структуры и образованию встречных доменов.

Как было показано в работах [13, 14], наличие свободных носителей заряда в сегнетоэлектриках приводит к изменению диэлектрических свойств, температуры Кюри, спонтанной поляризации и т. п. В работе [14] сообщалось о том, что дополнительная энергия, обусловленная возбуждением неравновесных носителей заряда, приводит к понижению температуры сегнетоэлектрического фазового перехода на величину ΔT_C:

$$\Delta T_C = \Delta E_g \cdot C \cdot n / \pi P_s^2,$$

где ΔE_g – изменение ширины запрещенной зоны при фазовом переходе 1-го рода, C – постоянная Кюри – Вейса.

Заключение

Из анализа результатов диэлектрических измерений и дифференциального термического анализа следует, что в композитах $(KNO_3)_{1-x}/Sn_x$ у нитрата калия происходит понижение температуры фазового перехода $\alpha \rightarrow \beta$ на 2 – 3 K, а температура фазового перехода

$\gamma \rightarrow \alpha$ понижается вплоть до 360 K. Полученный результат можно объяснить в рамках теории Ландау – Гинзбурга, если учитывать экранирование частиц нитрата калия металлическими частицами олова.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Tanaka K., Kurihashi Y., Uda T., Daimon Y., Odagawa N., Hirose R., Hiranaga Y., Cho Y.** Scanning nonlinear dielectric microscopy nano-science and technology for next generation high density ferroelectric data storage // Japanese Journal of Applied Physics. 2008. Vol. 47. No. 5R. P. 3311.

2. **Acharya M., Mack S., Fernandez A., Kim J., Wang H., Eriguchi K., Meyers D., Gopalan V., Neaton J., Martin L. W.** Searching for new ferroelectric materials using high-through put data bases: An experimental perspective on $BiAlO_3$ and $BiInO_3$ // Chemistry Materials. 2020. Vol. 32. No. 17. Pp. 7274–7283.

3. **Pierangeli D., Ferraro M., Di Mei F., Di Domenico G., de Oliveira C. E. M., Agranat A. J., Del Re E.** Super-crystals in composite ferroelectrics // Nature Communications. 2016. Vol. 7. P. 10674.

4. **Milinskiy A. Yu., Baryshnikov S. V., Charnaya E. V., Egorova I. V., Sarnatskii V. M.** Phase transitions in bulk and confined organic ferroelectric DIPAI // Results in Physics. 2020. Vol. 17. June. P. 103069.

5. **Yan Z., Yang Y., Cai X.** Preparation of a ferroelectric composite film metal-organic framework/ PVDF // Journal of Polymer Research. 2020. Vol. 27. No. 12. P. 377.

6. **Chen A., Chernow F.** Nature of feroelectricity in KNO_3 // Physical Review. 1967. Vol. 154. No. 2. Pp. 493–505.

7. **Scott J. F., Duiker H. M., Beale P. D., Pouligny B., Dimmler K., Parris M., Butler D., Eaton S.** Properties of ceramic KNO_3 thin-film memories // Physica B. 1988. Vol. 150. No. 1–2. Pp. 160–167.

8. **Stukova E. V., Baryshnikov S. V.** Stabilization of the ferroelectric phase in $(KNO_3)_{1-x}$-$(BaTiO_3)_x$ composites // Inorganic Materials: Applied Research. 2011. Vol. 2. Part I. No. 5. Pp. 434–438.

9. **Набережнов А. А., Ванина П. Ю., Сысоева А. А., Cizman A., Rysiakiewicz-Pasek E., Hoser A.** Влияние ограниченной геометрии на структуру и фазовые переходы в наночастицах нитрата калия // Физика твердого тела. 2018. Т. 60. № 3. С. 439–442.

10. **Милинский А. Ю., Барышников С. В., Стукова Е. В., Чарная Е. В., Чернечкин И. А., Ускова Н. И.** Диэлектрические и тепловые свойства KNO_3, внедренного в углеродные нанотрубки // Физика твердого тела. 2021. Т. 63. № 6. С. 767–771.

11. **Deshpande V. V., Karkhanavala M. D., Rao U. R. K.** Phase transitions in potassium nitrate // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 1974. Vol. 6. No. 6. Pp. 613–621.

12. **Ikeda S., Kominami H., Koyama K., Wada Y. J.** Nonlinear dielectric constant and ferroelectric-to-paraelectric phase transition in copolymers of vinylidene fluoride and trifluoroethylene // Applied Physics. 1987. Vol. 62. No. 8. Pp. 3339–3342.

13. **Фридкин В. М.** Сегнетоэлектрики – полупроводники. М.: Наука, 1976, 408 с.

14. **Фридкин В. М.** Фотосегнетоэлектрики. М.: Наука, 1979. 464 с.

REFERENCES

1. **Tanaka K., Kurihashi Y., Uda T., et al.,** Scanning nonlinear dielectric microscopy nano-science and technology for next generation high density ferroelectric data storage, Jap. J. Appl. Phys. 47 (5R) (2008) 3311.

2. **Acharya M., Mack S., Fernandez A., et al.,** Searching for new ferroelectric materials using high-through put data bases: An experimental perspective on $BiAlO_3$ and $BiInO_3$, Chem. Mater. 32 (17) (2020) 7274–7283.

3. **Pierangeli D., Ferraro M., Di Mei F., et al.,** Super-crystals in composite ferroelectrics, Nat. Commun. 7 (2016) 10674.

4. **Milinskiy A. Yu., Baryshnikov S. V., Charnaya E. V., et al.,** Phase transitions in bulk and confined organic ferroelectric DIPAI, Res. Phys. 17 (June) (2020) 103069.

5. **Yan Z., Yang Y., Cai X.,** Preparation of a ferroelectric composite film metal-organic framework/ PVDF, J. Polm. Res. 27 (12) (2020) 377.

6. **Chen A., Chernow F.** Nature of ferroelectricity in KNO_3, Phys. Rev. 154 (2) (1967) 493–505.
7. **Scott J. F., Duiker H. M., Beale P. D., et al.,** Properties of ceramic KNO_3 thin-film memories, Physica. B. 150 (1–2) (1988) 160–167.
8. **Stukova E. V., Baryshnikov S. V.,** Stabilization of the ferroelectric phase in $(KNO_3)_{1-x}$-$(BaTiO_3)_x$ composites, Inorg. Mater. Appl. Res. 2-I (5) 434–438.
9. **Naberezhnov A. A., Vanina P. Yu., Sysoeva A. A., et al.,** Effect of restricted geometry on the structure and phase transitions in potassium nitrate nanoparticles, Phys. Solid State. 60 (3) (2018) 442–446.
10. **Milinskii A. Y., Baryshnikov S. V., Stukova E. V., et al.,** Dielectric and thermal properties of KNO_3 encapsulated in carbon nanotubes, Phys. Solid State. 63 (6) (2021) 872–876.
11. **Deshpande V. V., Karkhanavala M. D., Rao U. R. K.,** Phase transitions in potassium nitrate, J. Therm. Anal. Calorim. 6 (6) (1974) 613–621.
12. **Ikeda S., Kominami H., Koyama K., Wada Y. J.,** Nonlinear dielectric constant and ferroelectric-to-paraelectric phase transition in copolymers of vinylidene fluoride and trifluoroethylene, Appl. Phys. 62 (8) (1987) 3339–3342.
13. **Fridkin V. M.,** Ferroelectrics semiconductors (Translation from Russian), Consultants Bureau, New York, USA, 1980.
14. **Fridkin V. M.,** Photoferroelectrics, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1979.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МИЛИНСКИЙ Алексей Юрьевич – *доктор физико-математических наук, доцент кафедры физического и математического образования Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Россия.*
675000, Россия, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104
a.milinskiy@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7525-4396

БАРЫШНИКОВ Сергей Васильевич – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физического и математического образования Благовещенского государственного педагогического университета, г. Благовещенск, Россия.*
675000, Россия, г. Благовещенск, ул. Ленина, 104
104svbar2003@list.ru
ORCID: 0000-0002-3362-8975

СТУКОВА Елена Владимировна – *доктор физико-математических наук, профессор, заведующая кафедрой физики Амурского государственного университета, г. Благовещенск, Россия.*
675027, Россия, г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21
lenast@bk.ru
ORCID: 0000-0002-7981-7456

THE AUTHORS

MILINSKIY Alexey Yu.
Blagoveshchensk State Pedagogical University
104, Lenina St., Blagoveshchensk, 675000, Russia
a.milinskiy@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7525-4396

BARYSHNIKOV Sergey V.
Blagoveshchensk State Pedagogical University
104, Lenina St., Blagoveshchensk, 675000, Russia
svbar2003@list.ru
ORCID: 0000-0002-3362-8975

STUKOVA Elena V.
Amur State University
21 Ignatievskoe Ave., Blagoveshchensk, 675027, Russia
lenast@bk.ru
ORCID: 0000-0002-7981-7456

Статья поступила в редакцию 24.03.2022. Одобрена после рецензирования 31.05.2022. Принята 31.05.2022.
Received 24.03.2022. Approved after reviewing 31.05.2022. Accepted 31.05.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Научная статья
УДК 538.956
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15302

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ ИНТЕРФЕЙСА ДИОКСИДОМ ТИТАНА НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОКОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО СТЕКЛА С НИТРИТОМ НАТРИЯ

А. Ю. Молоков [1] ✉, А. А. Сысоева [1],

А. А. Набережнов [1], Е. Ю. Королева [1,2]

[1] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия;

[2] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ antonmol@mail.ru

Аннотация. Исследованы диэлектрические свойства и структура исходного нанокомпозита на основе пористого стекла с внедренным $NaNO_2$ и такого же нанокомпозита, но с поверхностью пор, модифицированной диоксидом титана (температурный диапазон – 300 – 450 K, частотный – 0,1 – $3 \cdot 10^6$ Гц), при охлаждении. Структурные исследования показали, что в обоих композитах $NaNO_2$ находится в сегнетоэлектрической фазе. При модификации поверхности процент кристаллического $NaNO_2$ в порах возрастает. В модифицированном композите наблюдается увеличение диэлектрической проницаемости и проводимости. Идентифицированы два релаксационных процесса и установлена их природа. Установлено, что основной вклад в диэлектрический отклик НКМ вносит зарядовая поляризация на границах раздела. Оценена проводимость на постоянном токе обоих композитов и определены соответствующие энергии активации. Изменение энергии активации, наблюдаемое в районе 400 K, связано с фазовым переходом в низкотемпературную фазу $NaNO_2$. Показана возможность управления свойствами нанокомпозитов через модификацию интерфейса.

Ключевые слова: нанокомпозит, сегнетоэлектрик, нитрит натрия, пористое стекло, оксид титана, диэлектрическая спектроскопия

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (Российская Федерация), DST (Республика Индия) и NRF (Южно-Африканская Республика) в рамках научного проекта 19-52-80019 БРИКС.

Для цитирования: Молоков А. Ю., Сысоева А. А., Набережнов А. А., Королева Е. Ю. Влияние модификации интерфейса диоксидом титана на диэлектрические свойства нанокомпозита на основе пористого стекла с нитритом натрия // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 17–27. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15302

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

© Молоков А. Ю., Сысоева А. А., Набережнов А. А., Королева Е. Ю., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15302

EFFECT OF INTERFACE MODIFICATION BY TITANIUM DIOXIDE ON DIELECTRIC PROPERTIES OF SODIUM NITRITE NANOCOMPOSITE BASED ON POROUS GLASS

A. Yu. Molokov [1] ✉, A. A. Sysoeva [1], A. A. Naberezhnov [1], E. Yu. Koroleva [1,2]

[1] Ioffe Institute, St. Petersburg, Russia;

[2] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ antonmol@mail.ru

Abstract. Dielectric properties and structure of initial nanocomposite based on porous glass with embedded ferroelectric $NaNO_2$ and nanocomposite identical to that but having a TiO_2-modified pore surface, have been studied over a temperature range 300 – 450 K (on cooling) and frequency one 0.1 – $3 \cdot 10^6$ Hz. X-ray spectroscopy of the samples exhibited that $NaNO_2$ was in the ferroelectric phase in both composites and the percentage of crystalline $NaNO_2$ increased in the pores of the modified one. An increase in permittivity and conductivity was observed in the TiO_2-modified nanocomposite. Two relaxation processes were identified and their nature was established. The charge polarization at the interfaces was found to make the main contribution to the dielectric response of the both nanocomposites. The DC-conductivity of both composites was estimated and its activation energies were determined. An activation energy change observed in a vicinity of 400 K was attributed to the phase transition to the low-temperature phase of $NaNO_2$. The possibility to control the properties of nanocomposites through modifying the interfaces was shown.

Keywords: nanocomposite, ferroelectric, sodium nitrate, titanium oxide, porous glass, dielectric spectroscopy

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Russian Federation), DST (Republic of India) & NRF (Republic of South Africa) within the framework of the Scientific Project No. 19-52-80019 BRICS.

For citation: Molokov A. Yu., Sysoeva A. A., Naberezhnov A. A., Koroleva E. Yu., Effect of interface modification by titanium dioxide on dielectric properties of sodium nitrite nanocomposite based on porous glass, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 17–27. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15302

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

Введение

Нанокомпозитные материалы (НКМ) на основе нанопористых матриц с внедренными сегнетоэлектриками представляют несомненный интерес в связи с широкими перспективами практического применения этих материалов при разработке новых подходов в электронике, устройствах хранения информации, прикладной медицине и биологии и т. п. Известно, что размерный эффект может принципиально менять физические свойства материалов, особенно когда характерные размеры наночастиц становятся сравнимыми с корреляционной длиной критических флуктуаций параметра порядка. Существуют различные способы приготовления НКМ, и одним из них является внедрение веществ в нанопористые стекла (Porous Glasses (PG)). К преимуществам использования PG следует отнести возможность получать матрицы с различными средними, но контролируемыми диаметрами пор в диапазоне от 3 нм и примерно до 300 – 400 нм, если изменять параметры термообработки исходного (непористого) щелочно-боросиликатного стекла [1, 2].

© Molokov A. Yu., Sysoeva A. A., Naberezhnov A. A., Koroleva E. Yu., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

В то же время необходимо отметить, что, помимо размерного эффекта, на свойства НКМ существенно влияет наличие границы раздела «матрица – внедренный материал». Модифицируя интерфейс, можно также менять макроскопические свойства НКМ в целом, и этот подход был реализован в ряде работ [3 – 5].

Нитрит натрия $NaNO_2$ представляет собой модельный сегнетоэлектрик, макроскопические свойства и фазовые переходы в котором хорошо исследованы [6, 7]. При комнатной температуре это соединение имеет орторомбическую структуру (пространственная группа симметрии *Im*2*m*) с параметрами кристаллической ячейки $a = 3{,}55$ Å, $b = 5{,}56$ Å и $c = 5{,}37$ Å [8]. Выше температуры 438 K нитрит натрия переходит в высокотемпературную орторомбическую фазу *Immm* [9]. Диэлектрические свойства нитрита натрия в пористом стекле со средним диаметром пор 7(1) нм (система PG7 + $NaNO_2$) рассматривались в работах [10 – 12]. Авторы обнаружили экспоненциальный рост диэлектрического отклика на низких измерительных частотах при повышении температуры и наличие частотной дисперсии. При этом не только понижалась температура фазового перехода до 427 K, но и менялся род фазового перехода (ФП) [12, 13]. Одной из возможных причин такого кардинального изменения физических свойств нитрита натрия, внедренного в PG7, может быть и влияние интерфейса «матрица – внедренный материал», поэтому можно ожидать, что модификация поверхности пор (каналов) в пористом стекле должна привести к изменению свойств НКМ в целом. В данной работе для модификации интерфейса был использован диоксид титана TiO_2, который смачивает поверхность пористого стекла.

Цель данного исследования – установить влияние модификации интерфейса «матрица – внедренный материал» диоксидом титана на диэлектрические свойства нанокомпозита PG6 + $NaNO_2$.

Образцы и экспериментальные методы

Исследовалась следующая группа образцов:

пористое стекло со средним диаметром пор 6(1) нм (PG6);

пористое стекло с диоксидом титана (PG6 + TiO_2);

нитрит натрия в пористом стекле (PG6 + $NaNO_2$);

нитрит натрия в пористом стекле с диоксидом титана (PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$).

Пористые стекла PG6 были изготовлены путем травления боросиликатных стекол. Диаметр полученных пор определяли методом ртутной порометрии. Исходное пористое стекло выдерживали в 20 %-м растворе тетраизопропилортотитаната $Ti[OCH(CH_3)_2]_4$ (TTIP) в изопропаноле в течение суток при 60 °C. Затем такое стекло PG6 гидролизовали на воздухе при комнатной температуре. Отжиг проводили при температуре 450 °C в течение 4 ч. Как показали измерения, заполнение оксидом титана составило 11 % от объема пор. Для введения нитрита натрия образцы пористого стекла помещали в насыщенный водный раствор $NaNO_2$ при 130 °C до полного испарения воды. Заполнение нитритом натрия в обоих образцах составило 59 % от объема пор.

Готовые образцы представляли собой прямоугольные пластины размером 8,0 × 5,0 × 0,6 мм. Для проведения диэлектрических исследований на поверхности образцов напыляли золотые электроды толщиной около 80 нм с подслоем хрома толщиной 4 нм (для лучшей адгезии).

Измерение диэлектрического отклика проводили на широкополосном диэлектрическом спектрометре Novocontrol BDS80 (Германия) в частотном диапазоне $0{,}1 - 3{,}0 \cdot 10^6$ Гц и в диапазоне температур 300 – 440 K, при охлаждении со скоростью 1 K/мин после предварительного нагрева до 440 K. Для определения фазового состояния $NaNO_2$ в изготовленных НКМ после первого цикла нагрев-охлаждение, мы исследовали структуры НКМ PG6 + $NaNO_2$ и PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$ на рентгеновском дифрактометре SuperNova Oxford Diffraction (США) на длине волны $\lambda = 0{,}70926$ Å (линия Mo $K_{\alpha 1}$) в диапазоне углов 2θ 5° – 43° при комнатной температуре. Измерения проводили в геометрии «на прохождение», площадь засветки образцов и их толщина была одинаковой во всех случаях. Вклад фона от аморфного диоксида кремния SiO_2, из которого состоит каркас матрицы, определяли из дифрактограммы пустой матрицы.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены дифрактограммы для трех образцов (незаполненного PG6, PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$ и PG6 + $NaNO_2$). На дифрактограмме PG6 + TiO_2 (на рис. 1 не приведена) не обнаружено каких-либо упругих пиков, соответствующих структуре оксида титана; более того, дифрактограммы образцов PG6 и PG6 + TiO_2 практически полностью совпадали. В окрестности угла $2\theta \approx 10\,^{\circ}$ присутствует широкий пик, который связан с рассеянием на аморфном материале матрицы SiO_2. На рис. 1 видно, что дифракционные спектры для НКМ с нитритом натрия подобны, однако интегральные интенсивности пиков существенно различаются.

С целью получения информации о фазовом состоянии нитрита натрия в НКМ, из спектров образцов PG6 + $NaNO_2$ и PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$ был вычтен фон от рассеяния на аморфном каркасе матрицы и проведено сравнение с модельным спектром для массивного нитрита натрия на данной длине волны (рис. 2).

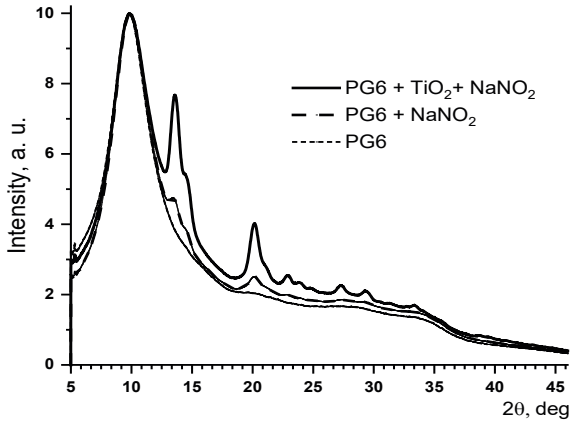


Рис. 1 Экспериментальные дифрактограммы образцов PG6 + $NaNO_2$, PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$ и незаполненного PG6 при комнатной температуре

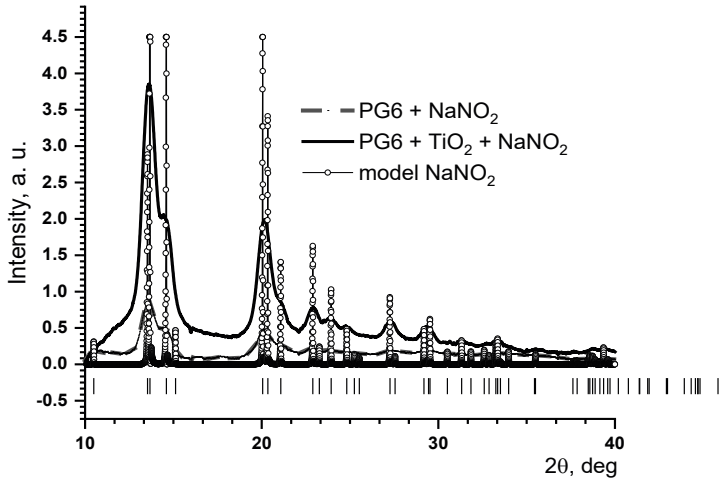


Рис. 2. Сравнение рентгенограмм, приведенных на рис. 1, но после вычитания фона от каркаса матрицы (аморфный SiO_2), с модельным спектром массивного $NaNO_2$ при комнатной температуре (вертикальные штрихи указывают позиции упругих брэгговских пиков)

Детального количественного анализа кристаллической структуры этих НКМ мы не проводили в силу ряда причин, однако сравнение представленных данных с модельным спектром для массивного материала позволяет сделать некоторые выводы о фазовом состоянии нитрита натрия в порах матрицы.

На рис. 2 видно, что в спектре образца PG6 + $NaNO_2$ присутствуют все основные пики, характерные для низкотемпературной орторомбической фазы нитрита натрия, и это еще лучше видно в соответствующем спектре для образца с диоксидом титана. Помимо этого, следует отметить, что интегральная интенсивность пиков значительно возросла в случае внедрения нитрита натрия в стекло с диоксидом титана, несмотря на одинаковую степень заполнения нитритом натрия обоих НКМ на основе PG6. Такой результат может быть связан с увеличением доли кристаллической фазы в порах при кристаллизации нитрита натрия в пористом стекле с диоксидом титана. Остальной нитрит натрия, скорее всего, находится в аморфном состоянии. Наличие немалой доли аморфной фазы, наряду с кристаллической в НКМ на основе пористых стекол, не вызывает удивления, поскольку наблюдалось ранее для нанокомпозитов с внедренным селеном [14] и легкоплавкими металлами [15].

На рис. 3 приведены температурные зависимости диэлектрической проницаемости ε' (слева) и проводимости σ' (справа) на частотах 1 кГц и 0,1 Гц при охлаждении. Из сравнения данных зависимостей видно, что добавление диоксида титана увеличивает ε' и σ' этих стекол во всей исследованной температурной области. На низких частотах σ' стекла с TiO_2 увеличивается практически на порядок, по сравнению с PG6. К сожалению, на высоких частотах измерить σ' во всем температурном диапазоне не удалось в пустом пористом стекле. Из приведенных температурных зависимостей σ' для PG6 и PG6+TiO_2 легко видеть, что диоксид титана увеличивает проводимость пористой матрицы.

На следующем этапе мы проанализировали поведение диэлектрического отклика композитов с внедренным нитритом натрия. Сравнение поведения кривых, относящихся к температурным зависимостям ε' и σ' для этих нанокомпозитов, показывает, что как на низких (0,1 Гц), так и на высоких (1 кГц) частотах во всем измеренном температурном диапазоне уровень значений ε' и σ' НКМ с TiO_2 выше, чем для образцов без него. При высоких температурах (выше 400 K) значения ε' и σ' композита PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$

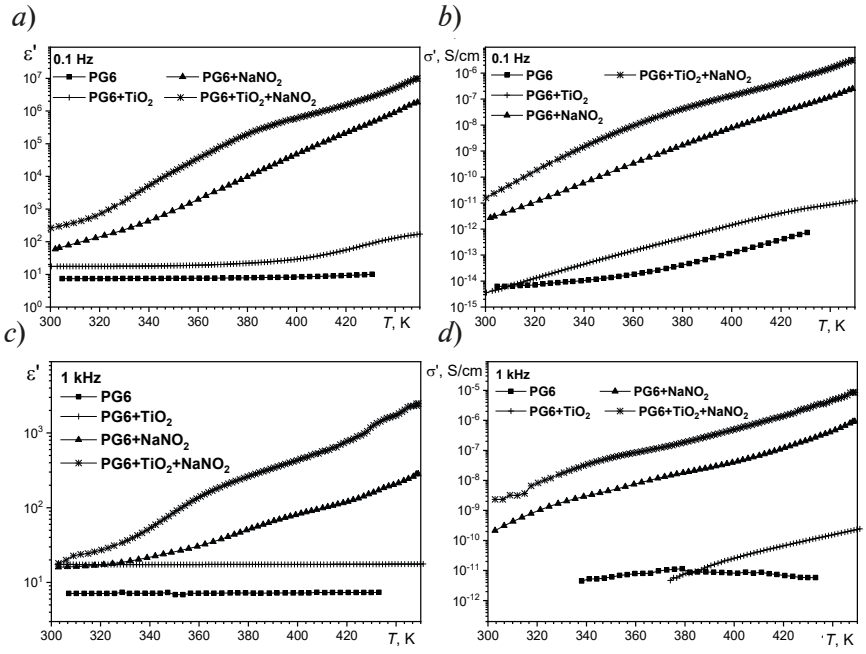


Рис. 3. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости ε' (*a*, *c*) и проводимости σ' (*b*, *d*) НКМ PG6, PG6 + TiO_2, PG6 + $NaNO_2$ и PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$ на частотах 0,1 Гц (*a*, *b*) и 1 кГц (*c*, *d*)

на порядок больше, чем таковые для PG6 + $NaNO_2$. При низких температурах (вблизи комнатной) разница в значениях ε' невелика. Такое поведение диэлектрического отклика НКМ с диоксидом титана подтверждает наше предположение, выдвинутое на основе результатов структурных исследований, что процентное содержание кристаллического нитрита натрия в PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$ больше, чем в образцах PG6 + $NaNO_2$.

Для анализа физической природы диэлектрического отклика были получены и исследованы соответствующие частотные зависимости. Данные зависимости при температуре 400 K показаны на рис. 4.

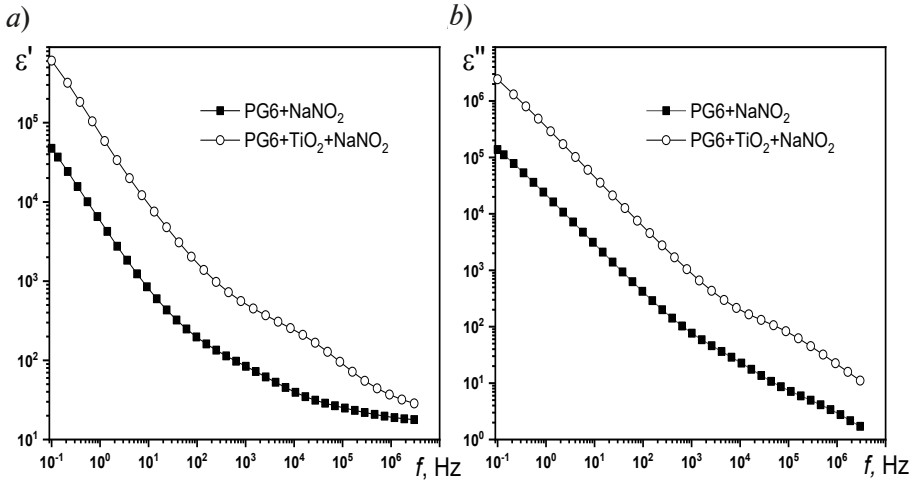


Рис. 4. Частотные зависимости диэлектрической проницаемости ε' (*a*) и потерь ε'' (*b*) образцов PG6 + $NaNO_2$ и PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$ при температуре 400 K

Следует отметить, что на сегодня не существует строгой теории для описания релаксационных вкладов, отличных от дебаевского [16, 17], поэтому для анализа результатов используют эмпирические распределения, которые хорошо описывают дисперсионные зависимости для большого числа веществ. В качестве модельной функции мы использовали выражение (1), состоящее из следующих слагаемых: сумма эмпирических функций Коула – Коула, описывающих релаксационные процессы; слагаемое от вклада фононных мод, а также член, отвечающий за проводимость на постоянном токе:

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_j \frac{\Delta\varepsilon_j}{1+(i\omega\tau_j)^\alpha} + \frac{i\sigma_{DC}}{\varepsilon_0\omega}, \quad (1)$$

где Δε – диэлектрическая сила релаксационного процесса, τ – среднее время релаксации, α – коэффициент уширения спектра относительно дебаевского, ε_∞ – вклад фононных мод и электронной поляризации, ω – циклическая частота, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, σ_{DC} – проводимость на постоянном токе.

Для описания дисперсионных зависимостей с помощью выражения (1) необходимо провести нелинейную аппроксимацию частотных зависимостей диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь. Аппроксимацию осуществляли с помощью алгоритма Левенберга – Марквардта [18]. Одновременно подгонялись кривые зависимостей ε' и ε'', что позволило существенно снизить ошибку. В исследованном частотном и температурном диапазонах удалось выявить два релаксационных процесса. Был найден вклад проводимости на постоянном токе и получены температурные зависимости параметров релаксационных процессов Δε и τ (рис. 5).

Основной вклад в диэлектрический отклик обоих композитов вносит величина $\Delta\varepsilon_2$, и этот вклад возрастает при увеличении температуры. Характерные времена релаксации этого процесса для обоих композитов составляют около секунды, и их температурные за-

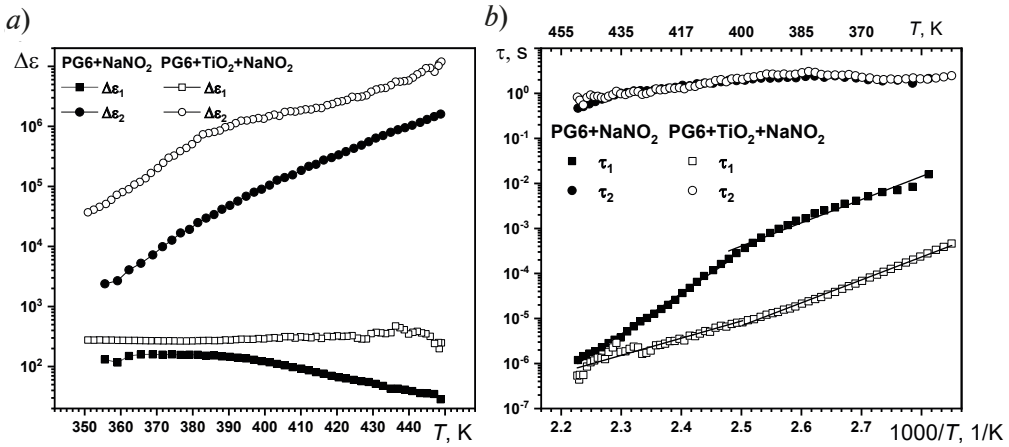


Рис. 5. Температурные зависимости диэлектрической силы релаксационного процесса Δε (*a*) и характерных значений среднего времени релаксации τ (*b*) для двух релаксационных процессов (обозначения с индексами 1 и 2) для образцов PG6 + $NaNO_2$ и PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$

висимости практически совпадают во всей исследованной температурной области. Это подтверждает эквивалентность данных процессов, даже несмотря на то, что сила данного процесса в модифицированном НКМ выше, чем в не модифицированном TiO_2 (это может быть связано с более высоким процентом кристаллической фазы нитрита натрия в данном НКМ). Данный процесс мы связываем с зарядовой поляризацией на границах зерен (наночастиц) нитрита натрия.

Величина $\Delta\varepsilon_1$ в модифицированном НКМ практически не зависит от температуры. В немодифицированном НКМ данный процесс несколько слабее, и его величина Δε уменьшается в пределах одного порядка с ростом температуры. Времена релаксации меняются от 10^{-2} с (при 350 K) до 10^{-6} с (при 450 K) для немодифицированного НКМ и от 10^{-3} до 10^{-7} с для НКМ, модифицированного TiO_2. Такие величины и температурное поведение параметров релаксационного процесса позволяют его связать с прыжковой проводимостью ионов натрия, которая уже наблюдалась ранее в НКМ PG7 + $NaNO_2$ [19, 20]. В НКМ с модифицированной поверхностью этот процесс происходит на порядок быстрее, т. е. можно предположить, что модификация поверхности пор диоксидом титана облегчает прыжковую проводимость ионов натрия. Зависимости времени релаксации для процессов 2 в обоих НКМ имеют термоактивационный характер. Можно выделить по две области с разными энергиями активации (с изменением наклона кривых) вблизи 400 K, что может быть связано с ФП в низкотемпературную фазу нитрита натрия, сместившимся по температуре вследствие размерного эффекта.

Из подгонки экспериментальных данных с помощью уравнения (1) также были получены оценки величины проводимости на постоянном токе в обоих НКМ. Температурные зависимости проводимости для образцов PG6 + $NaNO_2$ и PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$ приведены на рис. 6 в координатах Аррениуса. Модификация поверхности диоксидом титана приводит к увеличению на порядок проводимости НКМ на постоянном токе во всем исследованном интервале температур. Проводимость имеет термоактивационный характер, и на каждой зависимости было выделено по две области с разными энергиями активации, изменение энергии активации наблюдается при температуре около 400 K. Это хорошо коррелирует с данными, полученными для времен релаксации. Значение энергии активации композита, содержащего TiO_2, оказывается несколько меньше, т. е. модификация поверхности, по-видимому, облегчает прыжковую проводимость ионов натрия.

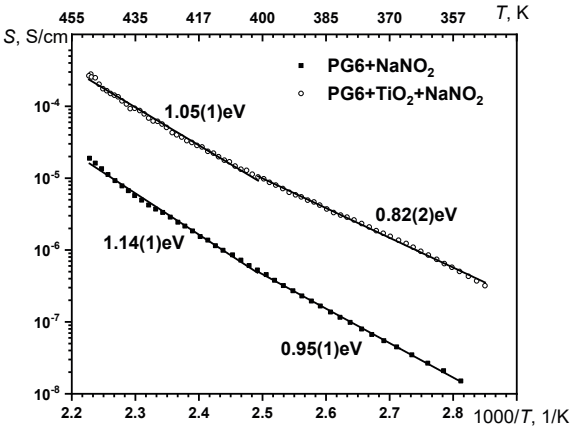


Рис. 6. Зависимости проводимости на постоянном токе от обратной температуры (на верхней шкале приведены соответствующие значения *T*) для образцов PG6 + $NaNO_2$ и PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$. Прямые линии отвечают аппроксимациям по закону Аррениуса (приведены также соответствующие значения энергий активации)

Заключение

В работе исследованы электрические и структурные свойства нанокомпозитных материалов (НКМ) на основе исходных пористых стекол со средним диаметром пор 6(1) нм и пористых стекол с поверхностью пор, модифицированной диоксидом титана, а также заполненных сегнетоэлектриком – нитритом натрия. Структурные исследования показали, что в образцах присутствует только кристаллическая фаза нитрита натрия (пиков от диоксида титана TiO_2 обнаружено не было), значит есть основания полагать, что TiO_2 находится в аморфном состоянии. Установлено, что на рентгенограмме образца НКМ PG6 + TiO_2 + $NaNO_2$ интегральная интенсивность дифракционных пиков существенно больше, чем таковая для образца PG6 + $NaNO_2$. Данный факт свидетельствует об увеличении процента кристаллической фазы нитрита натрия в порах модифицированного НКМ, по сравнению с содержанием этой фазы в НКМ, в котором нет диоксида титана.

Выявлено увеличение диэлектрической проницаемости и проводимости модифицированного НКМ, по сравнению с немодифицированным образцом. Был проанализирован диэлектрический отклик обоих композитов и выделено два релаксационных процесса в выбранных температурном и частотном диапазонах. Установлено, что основной вклад в диэлектрический отклик НКМ вносит релаксационный процесс, связанный с зарядовой поляризацией на границах зерен (наночастиц), причем в НКМ с диоксидом титана этот релаксационный процесс выражен более ярко, ввиду увеличившегося объема кристаллического нитрита натрия в порах НКМ. Второй релаксационный процесс мы связали с прыжковой проводимостью ионов натрия по каналам. В НКМ, содержащем TiO_2, этот процесс выражен с такой же силой, но он протекает гораздо быстрее, что указывает на возможное увеличение количества каналов проводимости и/или уменьшение длины прыжка, вследствие модификации поверхности пор диоксидом титана.

Таким образом показано, что, модифицируя поверхность, можно управлять диэлектрическими свойствами нанокомпозитных материалов на основе пористых матриц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Enke D., Janowski F., Schwieger W.** Porous glasses in the 21st century – a short review // Microporous and Mesoporous Materials. 2003. Vol. 60. No. 1–3. Pp. 19–30.

2. **Elmer T. H., Nordberg M. E., Carrier G. B., Korda E. J.** Phase separation in borosilicate glasses as seen by electron microscopy and scanning electron microscopy // Journal of the American Ceramic Society. 1970. Vol. 53. No. 4. Pp. 171–175.

3. **Kikukawa T., Kuraoka K., Kawabe K., Yashida K., Hirao K., Yazawa T.** Preparation of an organic-inorganic hybrid ionic conductive material with thermal and chemical stability // Journal of the American Ceramic Society. 2004. Vol. 87. No. 3. Pp. 504–506.

4. **Yazawa T., Miyamoto S., Yusa S., Jin T., Mineshige A.** Preparation of pH responsive porous glass by surface modification with COOH group // Materials Research Bulletin. 2013. Vol. 48. No. 10. Pp. 4267–4270.

5. **Dvoyashkin M., Romanova E. E., Einicke W.-D., Gläser R., Kärger J., Valiulin R.** Diffusion of cyclohexane in native and surface-modified mesoporous glasses // Adsorption. 2011. Vol. 17. No. 1. Pp. 93–99.

6. **Sawada S., Nomura S., Asao Y.** Dielectric properties of ferroelectric $NaNO_2$ // Journal of the Physical Society of Japan. 1961. Vol. 16. No. 11. Pp. 2207–2212.

7. **Kay M. I.** The structure of sodium nitrite at 150°, 185°, 225°C // Ferroelectrics. 1972. Vol. 4. No. 1. Pp. 235–243.

8. **Ravindran P., Delin A., Johansson B., Ericsson O., Wills J. M.** Electronic structure, chemical bonding, and optical properties of ferroelectric and antiferroelectric $NaNO_2$ // Physical Review B. 1999. Vol. 59. No. 3. Pp. 1776–1785.

9. **Yamada Y., Shibuya I., Hoshino S.** Phase transition in $NaNO_2$ // Journal of the Physical Society of Japan. 1963. Vol. 18. No. 11. Pp. 1594–1603.

10. **Colla E. V., Koroleva E. Y., Kumzerov Yu. A., Savenko B. N.** Ferroelectric phase transitions in materials embedded in porous media // Ferroelectrics Letters Section. 1996. Vol. 20. No. 5–6. Pp. 143–147.

11. **Kinka M., Banys J., Naberezhnov A. A.** Dielectric properties of sodium nitrite confined in porous glass // Ferroelectrics. 2007. Vol. 348. No. 1. Pp. 67–74.

12. **Kutnjak Z., Vodopivec B., Blinc R., Fokin A. V., Kumzerov Y. A., Vakhrushev S. B.** Calorimetric and dielectric studies of ferroelectric sodium nitrite confined in a nanoscale porous glass matrix // Journal of Chemical Physics. 2005. Vol. 123. No. 8. P. 084708.

13. **Naberezhnov A., Fokin A., Kumzerov Yu., Sotnikov A., Vakhrushev S., Dorner B.** Structure and properties of confined sodium nitrite // The European Physical Journal E. 2003. Vol. 12. Supplement No. 1. Pp. 21–24.

14. **Golosovsky I. V., Smirnov O. P., Delaplane R. G., Wannberg A., Kibalin Y. A., Naberezhnov A. A., Vakhrushev S. B.** Atomic motion in Se nanoparticles embedded into a porous glass matrix // The European Physical Journal B. 2006. Vol. 54. No. 2. Pp. 211–216.

15. **Naberezhnov A. A., Borisov S. A., Fokin A. V., Islamov A. Kh., Kuklin A. I., Kumzerov Yu. A.** SANS studies of nanostructured low-melting metals at room temperature // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. 2020. Vol. 11. No. 6. Pp. 690–697.

16. **Jonscher A. K.** Dielectric relaxation in solids // Journal of Physics D. 1999. Vol. 32. No. 14. P. R57.

17. **Kremer F., Schönhals A. (**Eds.). Broadband dielectric spectroscopy. Berlin, Heidelberg: Springer, 2003. 729 p.

18. **Moré J. J.** The Levenberg – Marquardt algorithm: Implementation and theory // Numerical Analysis. Lecture notes in Mathematics. Vol. 630. Ed. by G. A. Watson. Berlin, Heidelberg: Springer, 1978. Pp. 105–116.

19. **Vakhrushev S. B., Kumzerov Yu. A., Fokin A., Naberezhnov A. A., Zalar B., Lebar A., Blinc R.** ^{23}Na spin-lattice relaxation of sodium nitrite in confined geometry // Physical Review B. 2004. Vol. 70. No. 13. P. 132102.

20. **Naberezhnov A. A., Vakhrushev S. B., Kumzerov Yu. A., Fokin A. V.** Mechanism of ferroelectric phase transition in ultra-dispersed sodium nitrite particles // Ferroelectrics. 2021. Vol. 575. No. 1. Pp. 75–83.

REFERENCES

1. **Enke D., Janowski F., Schwieger W.,** Porous glasses in the 21st century – a short review, Microp. Mesopor. Mat. 60 (1–3) (2003) 19–30.

2. **Elmer T. H., Nordberg M. E., Carrier G. B., Korda E. J.,** Phase separation in borosilicate glasses as seen by electron microscopy and scanning electron microscopy, J. Am. Ceram. Soc. 53 (4) (1970) 171–175.

3. **Kikukawa T., Kuraoka K., Kawabe K., et al.,** Preparation of an organic-inorganic hybrid ionic conductive material with thermal and chemical stability, J. Am. Ceram. Soc. 87 (3) (2004) 504–506.

4. **Yazawa T., Miyamoto S., Yusa S., et al.,** Preparation of pH responsive porous glass by surface modification with COOH group, Mater. Res. Bull. 48 (10) (2013) 4267–4270.

5. **Dvoyashkin M., Romanova E. E., Einicke W-D., et al.,** Diffusion of cyclohexane in native and surface-modified mesoporous glasses, Adsorption. 17 (1) (2011) 93–99.

6. **Sawada S., Nomura S., Asao Y.,** Dielectric properties of ferroelectric $NaNO_2$, J. Phys. Soc. Jap. 16 (11) (1961) 2207–2212.

7. **Kay M. I.,** The structure of sodium nitrite at 150°, 185°, 225°C, Ferroelectrics. 4 (1) (1972) 235–243.

8. **Ravindran P., Delin A., Johansson B., et al.,** Electronic structure, chemical bonding, and optical properties of ferroelectric and antiferroelectric $NaNO_2$, Phys. Rev. B. 59 (3) (1999) 1776–1785.

9. **Yamada Y., Shibuya I., Hoshino S.,** Phase transition in $NaNO_2$, J. Phys. Soc. Jap. 18 (11) (1963) 1594–1603.

10. **Colla E. V., Koroleva E. Y., Kumzerov Yu. A., Savenko B. N.,** Ferroelectric phase transitions in materials embedded in porous media, Ferroelectrics Lett. 20 (5–6) (1996) 143–147.

11. **Kinka M., Banys J., Naberezhnov A. A.,** Dielectric properties of sodium nitrite confined in porous glass, Ferroelectrics. 348 (1) (2007) 67–74.

12. **Kutnjak Z., Vodopivec B., Blinc R., et al.,** Calorimetric and dielectric studies of ferroelectric sodium nitrite confined in a nanoscale porous glass matrix, J. Chem. Phys. 123 (8) (2005) 084708.

13. **Naberezhnov A., Fokin A., Kumzerov Yu., et al.,** Structure and properties of confined sodium nitrite, Eur. Phys. J. E. 12 (Suppl. 1) (2003) 21–24.

14. **Golosovsky I. V., Smirnov O. P., Delaplane R. G., et al.,** Atomic motion in Se nanoparticles embedded into a porous glass matrix, Eur. Phys. J. B. 54 (2) (2006) 211–216.

15. **Naberezhnov A. A., Borisov S. A., Fokin A. V., et al.,** SANS studies of nanostructured low-melting metals at room temperature, Nanosystems: Phys. Chem. Math. 11 (6) (2020) 690–697.

16. **Jonscher A. K.,** Dielectric relaxation in solids, J. Phys. D. 1999. Vol. 32 (14) (1999) R57.

17. **Kremer F., Schönhals A.** (Eds.), Broadband dielectric spectroscopy, Springer, Berlin, Heidelberg, 2003.

18. **Moré J. J.,** The Levenberg – Marquardt algorithm: Implementation and theory, In book: Numerical Analysis. Lecture notes in Mathematics, Vol. 630. Ed. by G. A. Watson, Springer, Berlin, Heidelberg (1978) 105–116.

19. **Vakhrushev S. B., Kumzerov Yu. A., Fokin A. V., et al.,** ^{23}Na spin-lattice relaxation of sodium nitrite in confined geometry, Phys. Rev. B. 70 (13) 132102.

20. **Naberezhnov A. A., Vakhrushev S. B., Kumzerov Yu. A., Fokin A. V.,** Mechanism of ferroelectric phase transition in ultra-dispersed sodium nitrite particles, Ferroelectrics. 575 (1) (2021) 75–83.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МОЛОКОВ Антон Юрьевич – *лаборант лаборатории нейтронных исследований Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

antonmol@mail.ru

ORCID: 0000-0001-5254-3806

СЫСОЕВА Анна Августовна – *научный сотрудник лаборатории нейтронных исследований Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

annasysoeva07@mail.ru

ORCID: 0000-0002-8876-9185

НАБЕРЕЖНОВ Александр Алексеевич – *доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории нейтронных исследований Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-1929-032X

КОРОЛЕВА Екатерина Юрьевна – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории нейтронных исследований Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, старший научный сотрудник научно-образовательного центра «Физика нанокомпозитных материалов электронной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-4370-5417

THE AUTHORS

MOLOKOV Anton Yu.
Ioffe Institute, RAS
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
antonmol@mail.ru
ORCID: 0000-0001-5254-3806

SYSOEVA Anna A.
Ioffe Institute, RAS
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
annasysoeva07@mail.ru
ORCID: 0000-0002-8876-9185

NABEREZHNOV Aleksandr A.
Ioffe Institute, RAS
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
alex.nabereznov@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-1929-032X

KOROLEVA Ekaterina Yu.
Ioffe Institute, RAS
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
e.yu.koroleva@mail.ioffe.ru
ORCID: 0000-0003-4370-5417

Статья поступила в редакцию 07.07.2022. Одобрена после рецензирования 12.07.2022. Принята 12.07.2022.
Received 07.07.2022. Approved after reviewing 12.07.2022. Accepted 12.07.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Математическое моделирование физических процессов

Научная статья
УДК 532.5
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15303

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА RANS-МОДЕЛЕЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ С ИЗОТРОПНОЙ ВЯЗКОСТЬЮ ДЛЯ РАСЧЕТА КОНВЕКЦИИ РАСПЛАВА КРЕМНИЯ В УСТАНОВКАХ ВЫРАЩИВАНИЯ КРИСТАЛЛОВ

Д. В. Борисов ✉, **В. В. Калаев**

АО «Группа СТР» – ООО «Софт-Импакт», Санкт-Петербург, Россия

✉ dmitriy.borisov@str-soft.com

Аннотация. В работе сопоставляются результаты RANS-расчетов турбулентной конвекции в расплаве кремния, полученные по нескольким моделям турбулентности с изотропной вязкостью, с ранее опубликованными данными вихреразрешающих ILES-вычислений для аналогичных условий. Выбирается модель турбулентности для ее последующей проблемно-ориентированной модификации с алгебраическим введением факторов, которые могут продуцировать нужную анизотропию тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока, входящих в осредненные по Рейнольдсу уравнения движения и энергии. Показано, что применительно к задачам расчета конвекции в тиглях установок, где используют метод Чохральского, целесообразно взять для модификации либо однопараметрическую k-модель, либо двухпараметрическую k-ε модель в качестве исходной RANS-модели.

Ключевые слова: метод Чохральского, ILES, RANS, тензор рейнольдсовых напряжений, турбулентный теплоперенос, конвекция

Для цитирования: Борисов Д. В., Калаев В. В. Сравнительная оценка RANS-моделей турбулентности с изотропной вязкостью для расчета конвекции расплава кремния в установках выращивания кристаллов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 28–42. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15303

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15303

COMPARATIVE EVALUATION OF RANS EDDY-VISCOSITY TURBULENCE MODELS FOR CALCULATING THE SILICON MELT CONVECTION IN CRYSTAL GROWTH SYSTEMS

D. V. Borisov ✉, **V. V. Kalaev**

STR Group, Inc. – Soft-Impact, Ltd., St. Petersburg, Russia

✉ dmitriy.borisov@str-soft.com

Abstract. In the paper, the results of RANS calculations of turbulent convection in silicon melt, obtained using several eddy-viscosity turbulence models, have been compared with previously

© Борисов Д. В., Калаев В. В., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

published ILES eddy-resolving calculation data for similar conditions. A turbulence model was chosen for its subsequent problem-oriented modification with the algebraic introduction of factors that could produce the required anisotropy of the Reynolds stress tensor and the turbulent heat flux vector including in the Reynolds-averaged equations of momentum and energy. As applied to the problems of calculating the convection in crystal growth furnace crucibles using the Czochralski method, it was shown the expediency of taking either the one-equation k-model or the two-equation k-ε model as the initial RANS-model for modification.

Keywords: Czochralski method, ILES, RANS, Reynolds stress tensor, turbulent heat transfer

For citation: Borisov D. V., Kalaev V. V., Comparative evaluation of RANS eddy-viscosity turbulence models for calculating the silicon melt convection in crystal growth systems, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 28–42. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15303

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

Введение

Метод Чохральского является одним из основных методов производства полупроводниковых кристаллов кремния, широко применяемых в электронной промышленности [1 – 3]. Для получения монокристаллов высокого качества необходимо контролировать массоперенос примесей в расплаве, попадающих в кристалл во время ростового процесса. Течение расплава кремния, как правило, – турбулентное, что задается условиями выращивания кристаллов даже относительно малого диаметра (10 см) в лабораторных установках. Наличие разномасштабных турбулентных структур в тиглях для промышленного выращивания кристаллов диаметром 20 –30 см затрудняет контроль концентрации примесей, а также может приводить к смене монокристаллического режима роста поликристаллическим [4]. Экспериментальное исследование турбулентного течения расплава кремния затруднено как высокими температурами процессов, так и требованиями к точности оборудования, используемого для измерения турбулентных пульсаций. В связи с этим, на сегодняшний день численное моделирование представляется наиболее перспективным методом исследования турбулентного течения и процессов тепло- и массообмена в расплаве кремния.

Наиболее точным методом расчета турбулентных течений является прямое численное моделирование (*англ*. Direct Numerical Simulation (DNS)), призванное разрешать все пространственно-временные масштабы турбулентности и не требующее дополнительных гипотез для замыкания уравнений [2, 3]. Однако данный метод требует значительных вычислительных ресурсов, что делает невозможным его применение в практических инженерных расчетах. Наиболее востребованным и относительно экономичным на сегодняшний день является подход, использующий уравнения Навье – Стокса, осредненные по Рейнольдсу (*англ*. Reynolds-averaged Navier – Stokes (RANS)), и позволяющий проводить расчеты в осесимметричной постановке (в том числе).

Для того чтобы численно изучать влияние вращения тигля на теплообмен в расплаве кремния на основе RANS-подхода, авторы работы [5] использовали k-ε модель турбулентности. Результаты расчетов показали общее качественное согласие с экспериментальными данными. В работе [6] выполнены расчеты с использованием низкорейнольдсовой k-ε модели, которые выявили, в частности, факт усиления тепло- и массопереноса по мере увеличения скорости вращения тигля. Подобных результатов не удавалось достичь при проведении предыдущих расчетов, заданных в ламинарной постановке, которая не подразумевает использования какой-либо модели турбулентности. Было показано также хорошее согласие расчетных распределений температуры в расплаве и формы интерфейса с экспериментальными данными. Авторы статьи [7] провели тестирование трех моделей турбулентности для расчета турбулентной конвекции расплава: «стандартной» k-ε модели с использованием пристенных функций; двухслойной k-ε модели, сочетаемой с

© Borisov D. V. Kalaev V. V., 2022. Published by Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University.

моделью одного уравнения у твердых стенок; и низкорейнольдсовой k-ε модели Лаундера – Джонса [8]. Было продемонстрировано преимущество последней из указанных моделей, которое заключалось в способности давать решения, близкие к ламинарным, в случае вырождения турбулентности. В работе [9] были исследованы турбулентные характеристики расплава кремния в идеализированном цилиндрическом тигле с применением нестационарного RANS-подхода (Unsteady RANS (URANS)) в трехмерной постановке. В своих расчетах они использовали k-ε модель Лаундера – Шармы [10], а также k-ω SST-модель Ментера [11, 12]. Результаты этих URANS-расчетов показали преимущество SST-модели, которое заключается в лучшем разрешении структуры течения, температурных градиентов в окрестности стенок, а также получении более интенсивного течения на свободной поверхности расплава.

При численном моделировании конвекции расплава кремния в тиглях установок (работа по методу Чохральского), проведенном на основе осесимметричной RANS-формулировки, определенные успехи были достигнуты. Однако ряда важных характеристик тепло- и массопереноса в расплаве воспроизвести в рамках этого подхода не удалось. Например, для корректного моделирования термических напряжений и точечных дефектов в объеме кристалла необходимо правильно предсказывать форму фронта кристаллизации, которая существенно зависит от структуры течения и теплообмена в расплаве. В частности, в работах [13 – 16], где для моделирования теплопереноса в расплаве использовали RANS-подход, говорится о различии в 2 – 3 раза экспериментального и расчетного прогибов интерфейса. Ключевая причина такого рассогласования для кристаллов диаметром 100 мм заключается в том, что RANS-расчеты предсказывают интенсивное нисходящее течение в окрестности оси симметрии тигля, которое не наблюдается экспериментально [17]. Авторы работы [16] вводили специальные поправки в RANS-модель турбулентности для улучшенного предсказания формы фронта кристаллизации при моделировании процесса роста кристаллов диаметром 300 мм, создаваемых методом Чохральского. Однако, как отмечают сами авторы, применение данных поправок было направлено на частное, искусственное устранение недостатка RANS-модели турбулентности в подкристальной зоне, а не на общее улучшение собственно модели.

Другой важной характеристикой конвекции в расплаве кремния, влияющей на свойства и качество кристалла, выступает концентрация кислорода в расплаве. Предпринятые ранее попытки использования RANS-модели турбулентности для предсказания уровня концентрации кислорода в широком диапазоне параметров, управляющих работой установки по методу Чохральского, не приводили к результатам, согласующимся с опытными данными [6, 18].

Большинство RANS-моделей исходит из гипотезы Буссинеска, основанной на концепции изотропной турбулентной вязкости и из стандартной гипотезы градиентной диффузии (*англ.* Standard Gradient Diffusion Hypothesis (SGDH)), замыкающей осредненные по Рейнольдсу уравнения переноса температуры и/или концентрации.

В работе [19] мы исследовали вопросы локальной применимости гипотез Буссинеска и SGDH для моделирования тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока в расплаве кремния. Для этого были специально обработаны и затем проанализированы результаты вычислений, выполненных на основе вихреразрешающего метода (*англ.* Implicit LES (ILES)). При этом было установлено, что сильная анизотропия тензора рейнольдсовых напряжений в окрестности стенки тигля, интерфейса кристаллизации, а также у свободной поверхности расплава не воспроизводится на основе гипотезы Буссинеска; последняя исходно нацелена лишь на описание сдвиговых напряжений. Кроме того, выраженная анизотропия турбулентного теплопереноса у свободной поверхности также не описывается в рамках гипотезы SGDH.

Основные цели данного исследования формулируются следующим образом:

сопоставить результаты RANS-расчетов турбулентной конвекции в расплаве кремния, полученные по нескольким моделям турбулентности с изотропной вязкостью, с данными, полученными в рамках вихреразрешающего подхода ILES и опубликованными ранее в работе [19];

выбрать RANS-модели турбулентности для последующих их модификаций с настройкой на основе данных ILES-расчета.

Представляемые в данной статье результаты RANS-расчетов сопряженного теплообмена получены с применением программного пакета Flow Module, который является частью программного продукта CGSim, разработанного в STR Group и предназначенного для моделирования тепло- и массопереноса при выращивании кристаллов различными методами [20].

Мы использовали следующие низкорейнольдсовы модели турбулентности: *k*-модель Вольфштайна [21], *k*-ε модель Чена [22] и *k*-ω SST-модель Ментера [11, 12].

Применяя пакеты Flow Module и ANSYS Fluent для случая модели Ментера, мы также провели кросс-верификационные расчеты в условиях упрощенной задачи: с моделированием турбулентной конвекции только расплава.

Математическая модель

При численном моделировании процесса выращивания кристаллов кремния методом Чохральского рассматривается турбулентная конвекция и теплообмен в расплаве и в инертном газе (аргон), который прокачивается над расплавом. Одновременно рассчитывается теплопроводность в кварцевом и графитовом тиглях, а также в монокристалле кремния. Математическая модель на основе RANS-подхода включает стационарные уравнения баланса массы, импульса и температуры:

$$\nabla\cdot\left(\rho\overline{\mathbf{u}}\right)=0, \tag{1}$$

$$\nabla\cdot\left(\rho\overline{\mathbf{u}}\,\overline{\mathbf{u}}\right)=-\nabla\overline{p}+\nabla\cdot\left(\boldsymbol{\tau}-\rho\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}\right)+\left(\rho-\rho_0\right)\mathbf{g}, \tag{2}$$

$$\boldsymbol{\tau}=\mu\left(\nabla\overline{\mathbf{u}}+\left(\nabla\overline{\mathbf{u}}\right)^T\right)-\frac{2}{3}\mu\left(\nabla\cdot\overline{\mathbf{u}}\right)\mathbf{E}, \tag{3}$$

$$\nabla\cdot\left(\rho c_p\overline{\mathbf{u}T}\right)=\nabla\cdot\left(\lambda\nabla\overline{T}-\rho c_p\overline{\mathbf{u}'T'}\right), \tag{4}$$

$$\rho=\begin{cases}\rho\left(T\right), & \text{если расплав или твердый блок;}\\ \dfrac{p_0M}{R_gT}, & \text{если газ.}\end{cases} \tag{5}$$

Здесь ρ, ρ_0, кг/м^3, – локальная и равновесная плотности, соответственно; **u**, м/с, – вектор скорости; p, p_0, Па, – локальное давление и давление газа в ростовой установке, соответственно; **g** – ускорение свободного падения; **τ** – тензор вязких напряжений; **E** – единичный тензор; μ, Па·с, – динамическая вязкость; c_p, Дж/(кг·К), – удельная теплоемкость при постоянном давлении; T, К, – температура; λ, Вт/(м·К), – коэффициент теплопроводности; M, а.е.м., – молекулярная масса; R_g, Дж/(кмоль·К), – универсальная газовая постоянная.

Верхняя черта означает осреднение величины по Рейнольдсу, верхний штрих – пульсационную величину; $\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}$ и $\overline{\mathbf{u}'T'}$ означают тензор рейнольдсовых напряжений и вектор турбулентного теплового потока, соответственно.

Турбулентный перенос импульса и тепла моделируются в рамках концепции изотропной турбулентной вязкости и стандартной гипотезы градиентной диффузии:

$$\overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'}=\frac{2}{3}k\mathbf{E}-\nu_t\left(\nabla\overline{\mathbf{u}}+\left(\nabla\overline{\mathbf{u}}\right)^T-\frac{2}{3}\left(\nabla\cdot\overline{\mathbf{u}}\right)\mathbf{E}\right); \tag{6}$$

$$\overline{\mathbf{u}'T'}=-\frac{\nu_t}{\mathrm{Pr}_t}\nabla\overline{T}, \tag{7}$$

где ν_t, м^2/с, – кинематическая турбулентная вязкость, которая определяется в соответствии с моделью турбулентности; Pr_t – турбулентное число Прандтля.

Система уравнений (1) – (5) дополняется одним или двумя уравнениями переноса: кинетической энергии турбулентности k, м^2/с^2 (для всех использованных моделей), скорости диссипации ε, м^2/с^3 (для модели Чена) и удельной скорости диссипации ω, 1/с (для модели Ментера).

Согласно моделям Вольфштайна и Чена, турбулентная вязкость определяется следующим образом:

$$\nu_t = C_\mu f_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \tag{8}$$

где C_μ – эмпирическая константа, f_μ – демпфирующая функция.

Согласно SST-модели Ментера, турбулентная вязкость определяется как

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max(a_1\omega, SF_2)}, \tag{9}$$

где a_1 – константа модели; S, 1/с, – модуль тензора скоростей деформаций, F_2 – функция модели, введенная в работе [11].

Вычислительные средства

Расчеты турбулентного теплопереноса в расплаве проводились в двумерной/осесимметричной версии программного пакета Flow Module. Для дискретизации системы уравнений (1) – (5) применялся метод конечных объемов. Решение дискретизированных уравнений осуществлялось на основе алгоритма SIMPLEC. Расчет конвективных потоков температуры и компонент скорости выполнялся с использованием схемы QUICK, а кинетической энергии турбулентности и удельной диссипации – с использованием противопоточной схемы первого порядка точности. Расчет диффузионных потоков осуществлялся с точностью второго порядка.

При проведении кросс-верификационных расчетов для представленной ниже упрощенной модельной задачи использовалась также двумерная/осесимметричная версия программного пакета ANSYS Fluent. Использовался алгоритм SIMPLEC для решения дискретизированных уравнений, расчет конвективных потоков компонент скорости и температуры проводился по схеме QUICK, конвективные потоки k и ω рассчитывались по противопоточной схеме первого порядка точности.

Модельная задача

Расчетная область модельной задачи включала в себя только область расплава (рис. 1). Радиус тигля R_c составлял 170 мм, радиус кристалла $R_s = 50$ мм, высота расплава $H = 97$ мм.

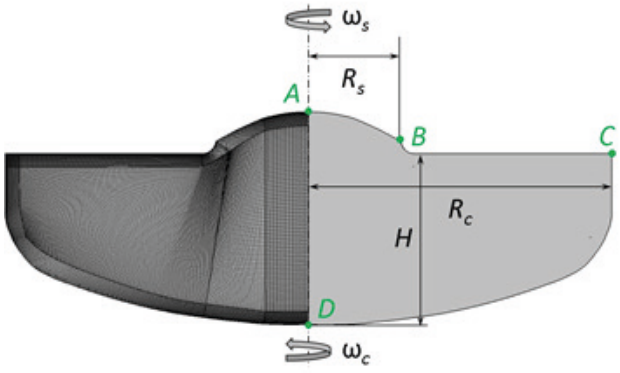


Рис. 1. Расчетные область (справа) и сетка (слева) модельной задачи:
AB – граница раздела расплав – кристалл; BC, CD – поверхности раздела расплав – газ (свободная) и расплав – тигель; DA – ось симметрии; R_c, R_s – радиусы расплава и кристалла соответственно; H – высота расплава; ω_c, ω_s – угловые скорости вращения тигля и кристалла соответственно

Ставились следующие граничные условия: на стенке тигля и фронте кристаллизации использовалось условие прилипания; на свободной поверхности расплава задавалось нулевое сдвиговое напряжение; на стенке тигля задавалась зависимость температуры от отношения радиуса к глубине расплава, полученная из экспериментальных значений [17]; фронт кристаллизации брался при постоянной температуре, равной температуре плавления кремния; свободная поверхность считалась адиабатической.

Свойства жидкого кремния, использованные в расчетах, представлены в табл. 1. Модельная задача решалась без учета эффекта Марангони. Скорости вращения стенки тигля ω_c и стенки кристалла ω_s составляли −5 и 20 об/мин соответственно (см. рис. 1).

Расчетная сетка содержала около 72 тыс. ячеек, размер первой приповерхностной ячейки составлял около 0,12 мм, размер ячейки в объеме − около 1,8 мм. Безразмерная координата y^+ в первой пристенной ячейке не превышала единицы.

Таблица 1

Значения параметров жидкого кремния, использованные в расчетах

Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение параметра
Плотность	ρ	кг/м^3	$3194 - 0{,}3701 \cdot T$
Равновесная плотность	ρ_0	кг/м^3	2570
Теплопроводность	λ	Вт/(м·К)	66,5
Теплоемкость	c_p	Дж/(кг·К)	915
Динамическая вязкость	μ	Па·с	$8 \cdot 10^{-4}$
Температура плавления	T_m	К	1685
Коэффициент Марангони	$\partial\sigma/\partial T$	Н/(м·К)	$-1 \cdot 10^{-4}$
Степень черноты	ε_{rad}	–	0,3

Примечание. Данные, приведенные в двух последних строках, будут использованы далее.

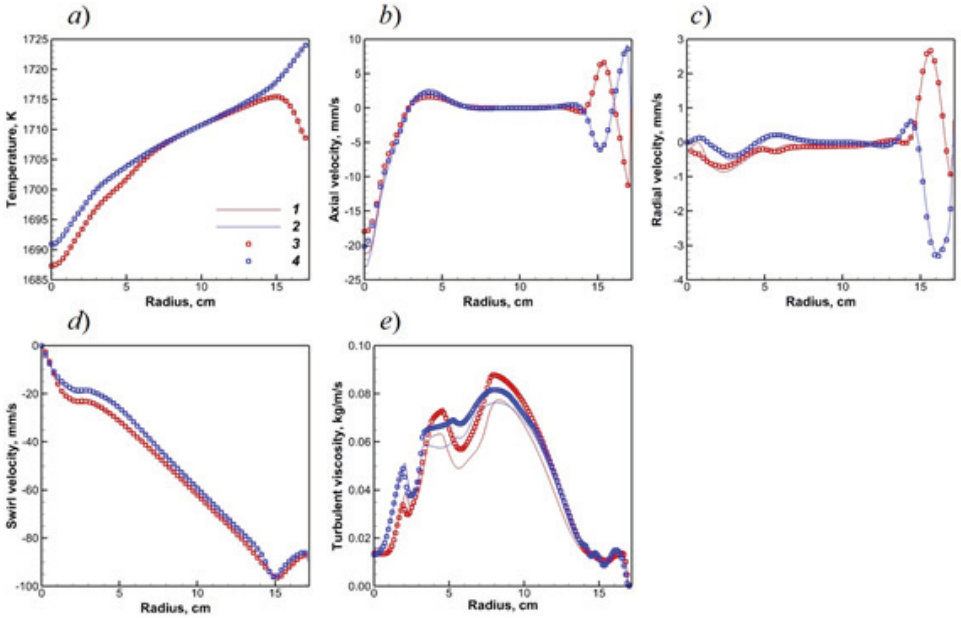


Рис. 2. Сравнения радиальных распределений температуры (*a*); осевой (*b*), радиальной (*c*), окружной (*d*) компонент скорости, а также турбулентной вязкости (*e*), рассчитанных при разной глубине расплава: 1 см (*1*, *3*) и 3 см (*2*, *4*) и при использовании программных пакетов ANSYS Fluent (*1*, *2*) и Flow Module (*3*, *4*)

На рис. 2 представлены сравнения радиальных распределений температуры, компонент скорости и турбулентной вязкости на глубине расплава 1 и 3 см, полученных с использованием программных пакетов Flow Module и ANSYS Fluent. Видно, что результаты, полученные с использованием обоих пакетов, хорошо согласуются между собой. Можно отметить небольшие различия в распределениях осевой и радиальной компонент скорости в окрестности оси симметрии, что может быть обусловлено различными аппроксимациями слагаемых, обратно пропорциональных радиальной координате; слагаемые возникают при записи уравнения баланса импульса в цилиндрической системе координат.

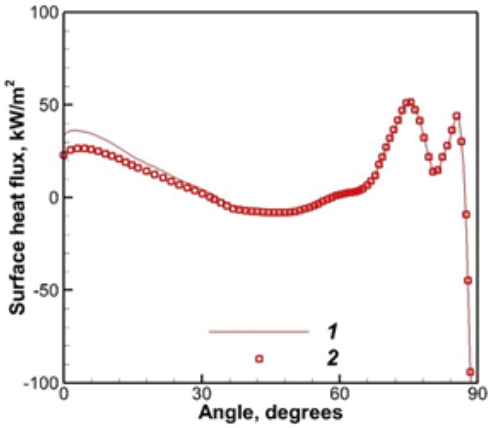


Рис. 3. Распределения плотности теплового потока вдоль тигля, полученные с помощью ANSYS Fluent (*1*) и Flow Module (*2*)

На рис. 3 приведено сравнение распределений плотности теплового потока вдоль стенки тигля, полученных с помощью пакетов Flow Module и ANSYS Fluent. Разница между распределениями нарастает по мере приближения к оси симметрии, что может быть следствием различий в структуре течения. Несмотря на небольшое расхождение между результатами, полученными с использованием обоих кодов, можно сделать вывод о корректности имплементации модели Ментера в программный пакет Flow Module.

Постановка сопряженной задачи

Расчетная область сопряженной задачи, сформулированной на основе данных для ростовой установки EKZ-1300 [23], включает расплав, кристалл, кварцевый и графитовый тигли, а также часть газовой области над расплавом. Схема расчетной области приведена на рис. 4. Радиус тигля R_c составлял 170 мм, радиус кристалла R_s = 50 мм, высота расплава H = 97 мм.

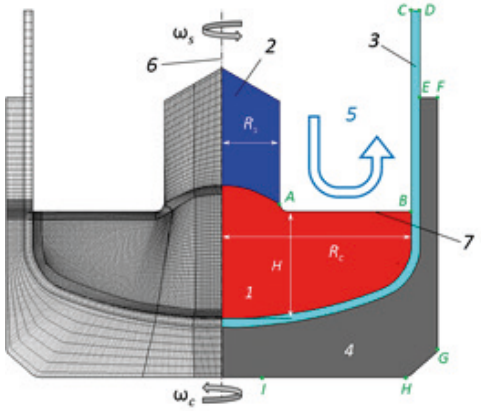


Рис. 4. Схема расчетных области (справа) и сетки (слева) сопряженной задачи:
1 – расплав; *2* – кристалл; *3*, *4* – кварцевый и графитовый тигли, соответственно; *5* – течение аргона; *6* – ось симметрии; *7* – свободная поверхность (остальные обозначения те же, что на рис. 1)

Ставятся следующие граничные условия: на границах раздела расплав-тигель и расплав-кристалл задается условие прилипания, на выходной границе – нулевое выходное давление.

Граничное условие на свободной поверхности расплава учитывает термокапиллярный эффект Марангони:

$$\left(\mu\frac{\partial u_\tau}{\partial n}\right)_{melt} = \left(\mu\frac{\partial u_\tau}{\partial n}\right)_{gas} + \frac{\partial\sigma}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial\tau}, \tag{10}$$

τ соответствует направлению, касательному к свободной поверхности, а n – нормальному; индексы *melt* и *gas* обозначают расплав и газ, соответственно.

Фронт кристаллизации поддерживается при постоянной температуре, равной температуре плавления кремния.

На внешних границах используется следующее граничное условие:

$$\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{ext} = \left(\lambda\frac{\partial T}{\partial n}\right)_{gas} + \sigma_{SB}\varepsilon_{rad}T_{ext}^4 - Q_{rad}^{in}, \tag{11}$$

где σ_{SB} – константа Стефана – Больцмана; ε_{rad} – степень черноты; Q_{rad}^{in} – падающий радиационный тепловой поток, полученный из решения задачи глобального теплообмена для установки EKZ-1300 (рис. 5); индекс *ext* соответствует внешней границе, индекс *gas* – соседнему газовому блоку.

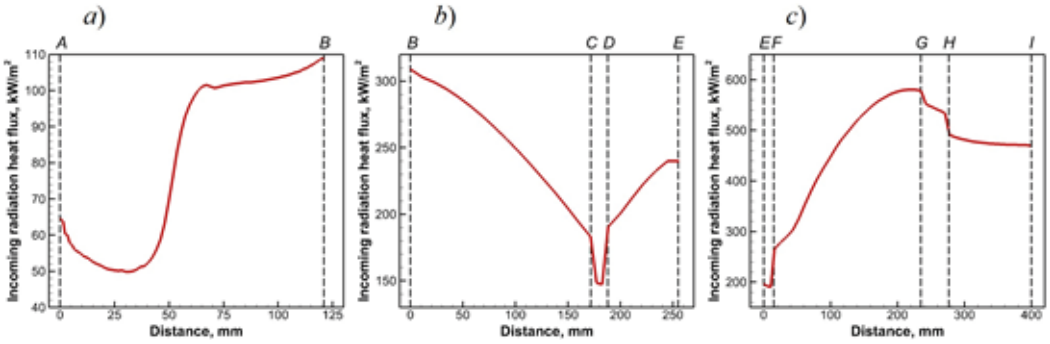


Рис. 5. Распределения падающего радиационного теплового потока вдоль свободной поверхности (*a*), а также вдоль кварцевого (*b*) и графитового (*c*) тиглей
Вертикальными пунктирами выделены особенности кривых, соответствующих конструкции тиглей (см. рис. 4)

На входной границе задается постоянное значение скорости прокачки газа v = 0,66 м/с. Скорости вращения тигля ω_c и кристалла ω_s составляли –5 и 20 об/мин соответственно. Свойства материалов, использованные в расчетах, представлены в табл. 2.

Определяющими параметрами данной задачи являлись число Прандтля Pr, число Грасгофа Gr, число Рэлея Ra, вращательные числа Рейнольдса Re_c (тигля) и Re_s (кристалла), число Марангони Ma, а также число DN, характеризующее влияние сдвигового напряжения газа на течение расплава вдоль свободной поверхности. Они определяются следующим образом:

Таблица 2

Характеристики веществ, использованные в расчетах сопряженной задачи

Вещество	Значение параметра			
	ρ, кг/м³	λ, Вт/(м·К)	c_p, Дж/(кг·К)	ε_{rad}
Твердый кремний	2330	$44-0{,}0138\cdot T$	$687-0{,}236\cdot T$	$0{,}9016-0{,}00026208\cdot T$
Кварц	2650	4	1232	0,85
Графит	2000	$70{,}7-0{,}0191\cdot T$	2019	0,80
Аргон	$\frac{p_0 M}{R_g T}$	$0{,}01-2{,}5\cdot 10^{-5} T$	532	–
	$\mu = 8{,}466\cdot 10^{-6} + 5{,}365\cdot 10^{-6}\cdot T - 8{,}682\cdot 10^{-12} T^2$ Па·с; $\rho_0 = 0{,}01$ кг/м³; $p_0 = 3000$ Па; $M = 40$ а.е.м.			

Примечание. Свойства жидкого кремния уже приведены в табл. 1.
Обозначения: p_0 – давление газа в ростовой установке; M – молекулярная масса; остальные соответствуют приведенным в табл. 1.

$$\mathrm{Pr} = \frac{\mu c_p}{\lambda} = 1{,}1\cdot 10^{-2}, \tag{12}$$

$$\mathrm{Gr} = \frac{g\beta\Delta T_{bulk} H^3}{\nu^2} = 3{,}4\cdot 10^8, \tag{13}$$

$$\mathrm{Ra} = \mathrm{Gr}\cdot\mathrm{Pr} = 3{,}7\cdot 10^6, \tag{14}$$

$$\mathrm{Re}_c = \frac{\omega_c R_c^2}{\nu} = 4{,}9\cdot 10^4, \tag{15}$$

$$\mathrm{Re}_s = \frac{\omega_s R_s^2}{\nu} = 1{,}7\cdot 10^4, \tag{16}$$

$$\mathrm{Ma} = -\frac{\partial\sigma}{\partial T}\frac{H^2\Delta T_{fs}}{L\mu a} = 6{,}7\cdot 10^3, \tag{17}$$

$$\mathrm{DN} = \frac{\left\langle \tau_g \right\rangle H^2 \rho}{\mu^2} = 2{,}6\cdot 10^6. \tag{18}$$

Здесь $\Delta T_{bulk} = 25{,}2$ K – перепад температуры между точкой пересечения фронта кристаллизации с осью симметрии и точкой пересечения границы раздела расплав – тигель с осью симметрии; ν, м²/с, – кинематический коэффициент вязкости, $\nu = \mu/\rho$; $\Delta T_{fs} = 19{,}3$ K – перепад температуры между тройными точками расплав-газ-кристалл и расплав-газ-тигель; L, м, – характерная протяженность свободной поверхности, $L = R_c - R_s$; a, м²/с, – коэффициент температуропроводности, $a = \nu/\mathrm{Pr}$; $\left\langle \tau_g \right\rangle$, Па, – среднее значение газового сдвигового напряжения вдоль свободной поверхности.

Для исследования сеточной чувствительности были проведены расчеты на трех сетках (с использованием модели Вольфштайна). Базовая сетка содержала около 20 тыс. ячеек, размер первой приповерхностной ячейки составлял около 0,3 мм, размер ячейки в объеме расплава – около 3,6 мм (см. рис. 4). Огрубленная и измельченная сетки получались путем уменьшения и увеличения числа ячеек в 2 раза по каждому направлению в расплаве и в 1 – 2 раза в остальных блоках.

Результаты расчетов сопряженной задачи

На рис. 6 приведены радиальные профили температуры, модуля меридиональной составляющей скорости на глубине 2 см от свободной поверхности расплава, а также распределения температуры вдоль границы раздела расплав – тигель, полученные в расчетах на трех сетках. Как видно из данных распределений, различия между результатами, полученными на базовой и измельченной сетках, меньше, чем при сравнении данных, полученных на огрубленной и базовой сетках, из чего можно сделать вывод о сеточной сходимости проведенных вычислений. Ввиду небольшой разницы между решениями, полученными на базовой и измельченной сетках, последующие расчеты были проведены на базовой сетке.

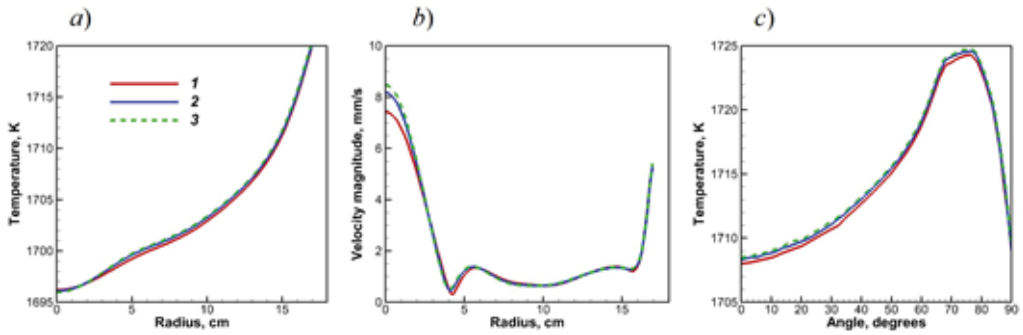


Рис. 6. Сравнение радиальных профилей температуры (*a*) и модуля меридиональной составляющей скорости (*b*) на глубине 2 см от свободной поверхности расплава с угловым распределением температуры вдоль границы раздела расплав – тигель (*c*). Также сравниваются результаты использования огрубленной (*1*), базовой (*2*) и измельченной (*3*) сеток.
Углы 0° и 90° соответствуют точкам пересечения стенки тигля с осью симметрии и со свободной поверхностью расплава, соответственно

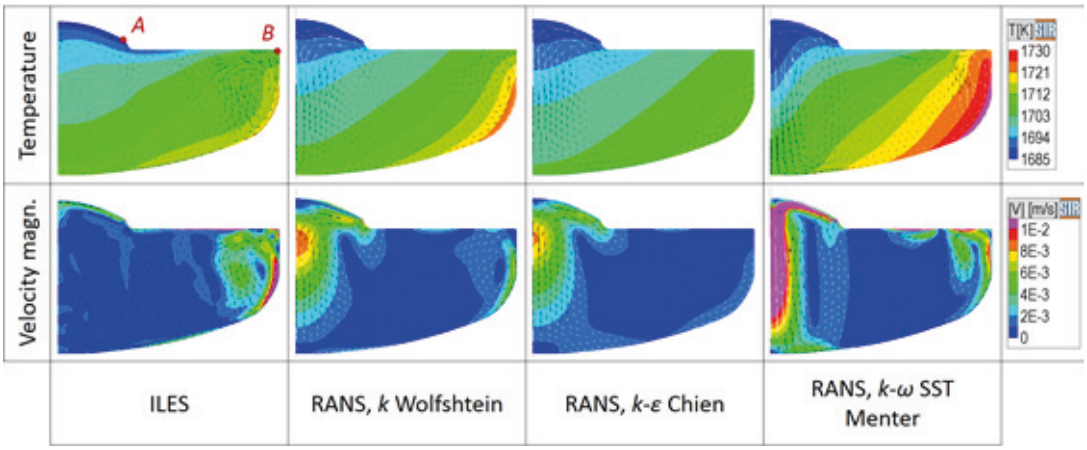


Рис. 7. Распределения температуры (верхний ряд), модуля меридиональной составляющей скорости (нижний ряд) по расплаву, а также векторные поля скорости (обозначены стрелками), полученные путем ILES- и RANS-расчетов по моделям Вольфштайна, Чена и Ментера (слева направо)

На рис. 7 сравниваются поля температуры, модуля меридиональной составляющей скорости, а также векторов скорости, полученные с использованием ILES- и RANS-подходов. Перепад температуры, наиболее близкий к данным ILES-расчета, дает модель Вольфштайна, в то время как модель Чена предсказывает заниженный перепад, а модель Ментера, напротив, завышенный. Вихревая структура в окрестности вертикальной стенки тигля, отчетливо проявляющаяся в ILES-решении, воспроизводится и по моделям Вольфштайна и Ментера, тогда как модель Чена предсказывает иную структуру течения: с относительно низкими скоростями на периферии расплава.

Следует отметить, что все рассматриваемые в данной работе модели турбулентности предсказывают выраженное нисходящее течение расплава в окрестности оси симметрии, что противоречит результатам ILES-вычислений, где высоких скоростей расплава в подкристальной области не наблюдается. Наиболее интенсивное нисходящее течение предсказывает модель Ментера, при этом она дает наименьший уровень турбулентной вязкости.

Сравнение сдвиговой компоненты $\overline{u'v'}$ тензора рейнольдсовых напряжений, полученных в рамках вычислений ILES и RANS, представлено на рис. 8 (верхний ряд графиков). Здесь u' соответствует радиальной пульсации скорости, а v' – осевой. Можно отметить качественное несоответствие распределений компоненты $u'v'$, предсказываемых ILES- и RANS-подходами. В ILES-расчете наиболее высокие абсолютные значения $u'v'$ наблюдаются в окрестности мениска, вблизи тройной точки расплав-газ-тигель и у закругленной части стенки тигля. Как установлено в работе [19], эта особенность связана с анизотропией пульсаций скорости, которая заключается в более сильном демпфировании нормальных пульсаций, по сравнению с продольными пульсациями у твердой стенки, а также демпфированием только нормальных пульсаций у свободной поверхности.

Таким образом, качественное различие распределений компоненты $\overline{u'v'}$ в ILES- и RANS-расчетах обусловлено отсутствием в концепции изотропной вязкости фактора, вызывающего поверхностную анизотропию.

В среднем и нижнем рядах графиков рис. 8 дается сравнение компонент вектора турбулентного теплового потока. ILES-подход предсказывает падение компоненты $\overline{v'T'}$ у горизонтальной части свободной поверхности, в то время как для компоненты $u'T'$ наблюдаются высокие отрицательные значения. Средний уровень турбулентного теплового потока согласуется в ILES- и RANS-расчетах. Ввиду отсутствия специальных поправок, учитывающих влияние свободной поверхности на турбулентность, уровень турбулентной вязкости на свободной поверхности получается того же порядка, что и в объеме расплава. Это, в свою очередь, приводит в RANS-расчетах к высоким значениям как горизонтальной, так и вертикальной компонент потока, что противоречит результатам ILES-расчета, где имеет

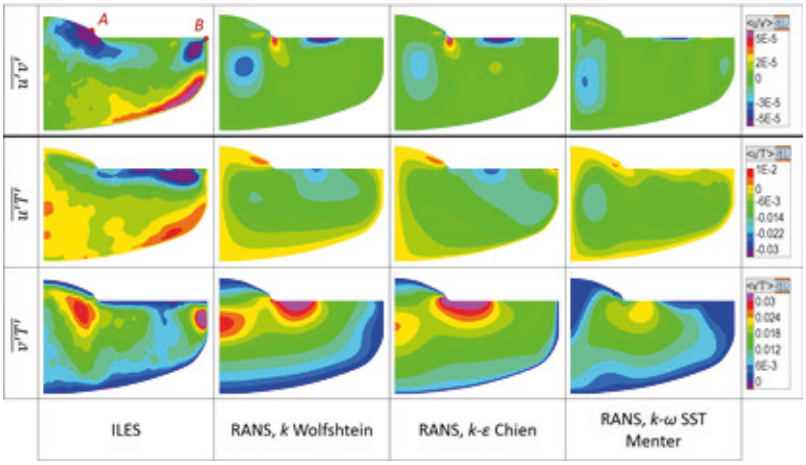


Рис. 8. Распределения сдвиговой компоненты $\overline{u'v'}$ тензора рейнольдсовых напряжений (верхний ряд) и компонент вектора турбулентного теплового потока (средний и нижний ряды), полученные в ILES- и RANS-расчетах по моделям Вольфштайна, Чена и Ментера (слева направо)

место выраженная анизотропия теплопереноса, а снижение значений компоненты $\overline{v'T'}$ обусловлено демпфированием нормальных пульсаций скорости.

Заключение

Проведено сопоставление результатов RANS-расчетов турбулентной конвекции в расплаве кремния, полученных по нескольким моделям турбулентности с изотропной вязкостью, с ранее опубликованными данными ILES-вычислений для аналогичных условий.

Модели изотропной турбулентной вязкости в среднем отражают характеристики теплопереноса в расплаве установок выращивания кристаллов по методу Чохральского, если основываться на температурных распределениях. Однако детали тепло- и массопереноса в расплаве, важные для изучения влияния ростовых параметров с целью оптимизации процесса выращивания, не могут быть корректно учтены в рамках моделей изотропной вязкости. Вместе с тем, можно сделать вывод об отсутствии преимуществ моделей с двумя дифференциальными уравнениями для предсказания структуры течения и поля температуры, по сравнению с моделью, включающей только одно уравнение. Среди трех рассмотренных RANS-моделей наиболее сильные различия в структуре конвекции, по сравнению с данными ILES, наблюдаются в случае k-ω SST-модели.

Для преодоления недостатков RANS-моделей с изотропной вязкостью можно использовать модели переноса рейнольдсовых напряжений, требующие дополнительного решения нескольких, существенно нелинейных дифференциальных уравнений. Однако это может приводить к численным сложностям для получения стационарного решения [24]. Другой путь – это проблемно-ориентированная модификация исходных моделей изотропной вязкости с алгебраическим введением факторов, которые, как показано в нашей работе [25], могут продуцировать желаемую анизотропию тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного теплового потока, входящих в осредненные по Рейнольдсу уравнения движения и энергии. Представленное в настоящей статье сопоставление результатов RANS- и ILES-расчетов позволяет заключить, что, применительно к задачам расчета конвекции в тиглях установок метода Чохральского, в качестве исходной RANS-модели для модификации целесообразно взять либо однопараметрическую k-модель, либо двухпараметрическую k-ε модель.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Vegad M., Bhatt N. M.** Review of some aspects of single crystal growth using Czochralski crystal growth technique // Procedia Technology. 2014. Vol. 14. 2nd International Conference on Innovations in Automation and Mechatronics Engineering (ICIAME 2014). Pp. 438–446.

2. **Wagner C., Friedrich R.** Direct numerical simulation of momentum and heat transport in idealized Czochralski crystal growth configurations // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2004. Vol. 25. No. 3. Pp. 431–443.

3. **Raufeisen A., Breuer M., Botsch T., Delgado A.** DNS of rotating buoyancy- and surface tension-driven flow // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2008. Vol. 51. No. 25–26. Pp. 6219–6234.

4. **Gräbner O., Mühe A., Müller G., Tomzig E., Virbulis J., Ammon W. V.** Analysis of turbulent flow in silicon melts by optical temperature measurement // Materials Science and Engineering. B. 2000. Vol. 73. No. 1–3 Pp. 130–133.

5. **Kobayashi S., Miyahara S., Fujiwara T., Kubo T., Fujiwara H.** Turbulent heat transfer through the melt in silicon Czochralski growth // Journal of Crystal Growth. 1991. Vol. 109. No. 1–4. Pp. 149–154.

6. **Kinney T. A., Brown R. A.** Application of turbulence modeling to the integrated hydrodynamic thermal-capillary model of Czochralski crystal growth of silicon // Journal of Crystal Growth. 1993. Vol. 132. No. 3–4. Pp. 551–574.

7. **Lipchin A., Brown R. A.** Comparison of three turbulence models for simulation of melt convection in Czochralski crystal growth of silicon // Journal of Crystal Growth. 1999. Vol. 205. No. 1–2. Pp. 71–91.

8. **Jones W. P., Launder B. E.** The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1972. Vol. 15. No. 2. Pp. 301–314.

9. **Verma S., Dewan A.** Thermofluid characteristics of Czochralski melt convection using 3D URANS computations // ASME Journal of Thermal Science and Engineering Applications. 2019. Vol. 11. No. 6. P. 061017.

10. **Launder B. E., Sharma B. I.** Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc // Letters in Heat and Mass Transfer. 1974. Vol. 1. No. 2. Pp. 131–137.

11. **Menter F. R.** Zonal two equation k-ω turbulence models for aerodynamic flows // Proceedings of the 24th Fluid Dynamics Conference. July 6 – 9, 1993, Orlando, Florida, USA. American Institute of Aeronautics & Astronautics (AIAA). 1993. Paper 1993–2906.

12. **Menter F. R., Kuntz M., Langtry R.** Ten years of industrial experience with the SST turbulence model // "Turbulence, Heat and Mass Transfer 4". Proceedings of the Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer. 12 – 17 October, 2003. Antalya, Turkey. Ed. by Hanjalić K., Nagano Y., Tummers M. J. Book Series: Turbulence, Heat and Mass Transfer. Vol. 4. USA: Begell House Inc., 2003. Pp. 625–632.

13. **Lipchin A., Brown R. A.** Hybrid finite-volume/finite-element simulation of heat transfer and melt turbulence in Czochralski crystal growth of silicon // Journal of Crystal Growth. 2000. Vol. 216. No. 1–4. Pp. 192–203.

14. **Kalaev V. V., Lukanin D. P., Zabelin V. A., Makarov Y. N., Virbulis J., Dornberger E., Ammon W. V.** Prediction of bulk defects in CZ Si crystals using 3D unsteady calculations of melt convection // Materials Science in Semiconductor Processing. 2002. Vol. 5. No. 4–5. Pp. 369–373.

15. **Kalaev V. V., Lukanin D. P., Zabelin V. A., Makarov Y. N., Virbulis J., Dornberger E., Ammon W. V.** Calculation of bulk defects in CZ Si growth impact of melt turbulent fluctuations // Journal of Crystal Growth. 2003. Vol. 250. No. 1–2. Pp. 203–208.

16. **Wetzel T., Virbulis J., Muiznieks A., Ammon W. V., Tomzig E., Raming G., Weber M.** Prediction of the growth interface shape in industrial 300 mm CZ Si crystal growth // Journal of Crystal Growth. 2004. Vol. 266. No. 1–3. Pp. 34–39.

17. **Gräbner O., Müller G., Virbulis J., Tomzig E., Ammon W. V.** Effects of various magnetic field configurations on temperature distributions in Czochralski silicon melts // Microelectronic Engineering. 2001. Vol. 56. No. 1–2. Pp. 83–88.

18. **Müller G, Mühe A., Backofen R., Tomzig E., Ammon W. V.** Study of oxygen transport in Czochralski growth of silicon // Microelectronic Engineering. 1999. Vol. 45. No. 2–3. Pp. 135–147.

19. **Borisov D. V., Kalaev V. V.** ILES of melt turbulent convection with conjugated heat transfer in the crucible and gas flow for Czochralski silicon crystal growth system // Journal of Crystal Growth. 2021. Vol. 573. 1 November. P. 126305.

20. Программный пакет CGSim [Электронный ресурс]. URL: http://www.str-soft.com/products/CGSim/ (Дата обращения: 29.03.2022).

21. **Wolfshtein M.** The velocity and temperature distribution in one-dimensional flow with turbulence augmentation and pressure gradient // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1969. Vol. 12. No. 3. Pp. 301–318.

22. **Chien K.-Y.** Predictions of channel and boundary-layer flows with a low-Reynolds number turbulence model // American Institute of Aeronautics & Astronautics (AIAA) Journal. 1982. Vol. 20. No. 1. Pp. 33–38.

23. **Kalaev V., Sattler A., Kadinski L.** Crystal twisting in Cz Si growth // Journal of Crystal Growth. 2015. Vol. 413. 1 March. Pp. 12–16.

24. **Ristorcelli J. R., Lumley J. L.** A second-order turbulence simulation of the Czochralski crystal growth melt: the buoyantly driven flow // Journal of Crystal Growth.1993. Vol. 129. No. 1–2. Pp. 249–265.

25. **Kalaev V., Borisov D., Smirnov A.** A modified hypothesis of Reynolds stress tensor modeling for mixed turbulent convection in crystal growth // Journal of Crystal Growth. 2022. Vol. 580. 15 February. P. 126464.

REFERENCES

1. **Vegad M., Bhatt N. M.,** Review of some aspects of single crystal growth using Czochralski crystal growth technique, Procedia Technol. 14 (2nd Int. Conf. on Innovations in Automation and Mechatronics Engin. (ICIAME 2014)) (2014) 438–446.

2. **Wagner C., Friedrich R.,** Direct numerical simulation of momentum and heat transport in idealized Czochralski crystal growth configurations, Int. J. Heat & Fluid Flow. 25 (3) (2004) 431–443.

3. **Raufeisen A., Breuer M., Botsch T., Delgado A.,** DNS of rotating buoyancy- and surface tension-driven flow, Int. J. Heat & Mass Transfer. 51 (25–26) (2008) 6219–6234.

4. **Gräbner O., Mühe A., Müller G., et al.,** Analysis of turbulent flow in silicon melts by optical temperature measurement, Mater. Sci. Eng. B. 73 (1–3) (2000) 130–133.

5. **Kobayashi S., Miyahara S., Fujiwara T., et al.,** Turbulent heat transfer through the melt in silicon Czochralski growth, J. Cryst. Growth. 109 (1–4) (1991) 149–154.

6. **Kinney T. A., Brown R. A.,** Application of turbulence modeling to the integrated hydrodynamic thermal-capillary model of Czochralski crystal growth of silicon, J. Cryst. Growth. 132 (3–4) (1993) 551–574.

7. **Lipchin A., Brown R. A.,** Comparison of three turbulence models for simulation of melt convection in Czochralski crystal growth of silicon, J. Cryst. Growth. 205 (1–2) (1999) 71–91.

8. **Jones W. P., Launder B. E.,** The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence, Int. J. Heat & Mass Transfer. 15 (2) (1972) 301–314.

9. **Verma S., Dewan A.,** Thermofluid characteristics of Czochralski melt convection using 3D URANS computations, ASME J. Therm. Sci. Eng. Appl. 11 (6) (2019) 061017.

10. **Launder B. E., Sharma B. I.,** Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc, Lett. Heat & Mass Transfer. 1 (2) (1974) 131–137.

11. **Menter F. R.,** Zonal two equation k-ω turbulence models for aerodynamic flows, Proc. 24th Fluid Dynamics Conf., July 6 – 9, 1993, Orlando, Florida, USA, American Institute of Aeronautics & Astronautics (AIAA), 1993. Paper 1993–2906.

12. **Menter F. R., Kuntz M., Langtry R.,** Ten years of industrial experience with the SST turbulence model, In book: "Turbulence, Heat and Mass Transfer 4". Proc. Symp. on Turbulence, Heat & Mass Transfer. 12–17 Oct., 2003, Antalya, Turkey. Ed. by Hanjalić K., Nagano Y., Tummers M. J., Book Ser. Turbulence, Heat & Mass Transfer. Vol. 4, Begell House Inc., USA (2003) 625–632.

13. **Lipchin A., Brown R. A.,** Hybrid finite-volume/finite-element simulation of heat transfer and melt turbulence in Czochralski crystal growth of silicon, J. Cryst. Growth. 216 (1–4) (2000) 192–203.

14. **Kalaev V. V., Lukanin D. P., Zabelin V. A., et al.,** Prediction of bulk defects in CZ Si crystals using 3D unsteady calculations of melt convection, Mater. Sci. Semicond. Proc. 5 (4–5) (2002) 369–373.

15. **Kalaev V. V., Lukanin D. P, Zabelin V. A., et al.,** Calculation of bulk defects in CZ Si growth impact of melt turbulent fluctuations, J. Cryst. Growth. 250 (1–2) (2003) 203–208.

16. **Wetzel T., Virbulis J., Muiznieks A., et al.,** Prediction of the growth interface shape in industrial 300 mm CZ Si crystal growth, J. Cryst. Growth. 266 (1–3) (2004) 34–39.

17. **Gräbner O., Müller G., Virbulis J., et al.,** Effects of various magnetic field configurations on temperature distributions in Czochralski silicon melts, Microelectr. Eng. 56 (1–2) (2001) 83–88.

18. **Müller G, Mühe A., Backofen R., et al.,** Study of oxygen transport in Czochralski growth of silicon, Microelectr. Eng. 45 (2–3) (1999) 135–147.

19. **Borisov D. V., Kalaev V. V.,** ILES of melt turbulent convection with conjugated heat transfer in the crucible and gas flow for Czochralski silicon crystal growth system, J. Cryst. Growth. 573 (1 November) (2021) 126305.

20. Software package CGSim [Electronic resource]. URL: http://www.str-soft.com/products/CGSim/ (Last accessed date: March 29, 2022).

21. **Wolfshtein M.,** The velocity and temperature distribution in one-dimensional flow with turbulence augmentation and pressure gradient, Int. J. Heat & Mass Transfer. 12 (3) (1969) 301–318.

22. **Chien K.-Y.,** Predictions of channel and boundary-layer flows with a low-Reynolds number turbulence model, AIAA J. 20 (1) (1982) 33–38.

23. **Kalaev V., Sattler A., Kadinski L.,** Crystal twisting in Cz Si growth, J. Cryst. Growth. 413 (1 March) (2015) 12–16.

24. **Ristorcelli J. R., Lumley J. L.,** A second-order turbulence simulation of the Czochralski crystal growth melt: the buoyantly driven flow, J. Cryst. Growth. 129 (1–2) (1993) 249–265.

25. **Kalaev V., Borisov D., Smirnov A.,** A modified hypothesis of Reynolds stress tensor modeling for mixed turbulent convection in crystal growth, J. Cryst. Growth. 580 (15 February) (2022) 126464.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БОРИСОВ Дмитрий Витальевич — *инженер-программист АО «Группа СТР» — ООО «Софт-Импакт», Санкт-Петербург, Россия.*
194044, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой Сампсониевский пр., 64
dmitriy.borisov@str-soft.com
ORCID: 0000-0002-7481-8265

КАЛАЕВ Владимир Владимирович — *кандидат физико-математических наук, технический директор АО «Группа СТР» — ООО «Софт-Импакт», Санкт-Петербург, Россия.*
194044, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой Сампсониевский пр., 64
vladimir.kalaev@str-soft.com
ORCID: 0000-0001-9231-0740

THE AUTHORS

BORISOV Dmitry V.
STR Group, Inc. — Soft-Impact, Ltd.
64, Bolshoi Sampsonievskii Ave., St. Petersburg, 194044, Russia
dmitriy.borisov@str-soft.com
ORCID: 0000-0002-7481-8265

KALAEV Vladimir V.
STR Group, Inc. - Soft-Impact, Ltd.
64, Bolshoi Sampsonievskii Ave., St. Petersburg, 194044, Russia
vladimir.kalaev@str-soft.com
ORCID: 0000-0001-9231-0740

Статья поступила в редакцию 29.03.2022. Одобрена после рецензирования 30.05.2022. Принята 30.05.2022.
Received 29.03.2022. Approved after reviewing 30.05.2022. Accepted 30.05.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Научная статья
УДК 536.25
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15304

ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ ДЛЯ РАСЧЕТА КОНВЕКЦИИ ЖИДКОГО МЕТАЛЛА В ПОДОГРЕВАЕМОМ СНИЗУ ЦИЛИНДРЕ

С. И. Смирнов ✉, Е. М. Смирнов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ sergeysmirnov92@mail.ru

Аннотация. Статья содержит оценку возможностей трех известных RANS-моделей турбулентности (k-ω SST, k-ε RNG и одной из дифференциальных RSM-моделей) по предсказанию локальных и интегральных характеристик статистически трехмерной рэлей-бенаровской конвекции жидкого металла с определяющей ролью крупномасштабной циркуляции (КМЦ). Расчеты на основе Unsteady-RANS-подхода на различных по измельченности сетках проведены при числе Рэлея 10^6 и числе Прандтля 0,025 для подогреваемой снизу цилиндрической емкости при равенстве ее диаметра высоте. Рассмотрен случай слабого наклона объекта, когда в нем КМЦ принимает «зафиксированное» азимутальное положение. Работоспособность использованных моделей турбулентности оценивается через сопоставление результатов с ранее полученными данными прямого численного моделирования для тех же условий.

Ключевые слова: конвекция Рэлея – Бенара, крупномасштабная циркуляция, турбулентность, осредненные по Рейнольдсу уравнения

Финансирование: Исследование частично финансировалось Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030» (Соглашение 075-15-2021-1333 от 30.09.2021).

Для цитирования: Смирнов С. И., Смирнов Е. М. Опыт применения полуэмпирических дифференциальных моделей турбулентности для расчета конвекции жидкого металла в подогреваемом снизу цилиндре // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 43–60. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15304

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

© Смирнов С. И., Смирнов Е. М., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15304

EXPERIENCE OF USING SEMIEMPIRICAL DIFFERENTIAL MODELS OF TURBULENCE FOR CALCULATION OF LIQUID-METAL CONVECTION IN A BOTTOM HEATED CYLINDER

S. I. Smirnov ✉, **E. M. Smirnov**

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

✉ sergeysmirnov92@mail.ru

Abstract. The paper deals with assessments of ability of the three RANS turbulence models (k-ω SST, k-ε RNG and one of the differential RSM formulations) to predict local and integral characteristics of the statistically 3D Rayleigh – Bénard liquid-metal convection with a key role of large-scale circulation (LSC). URANS-based calculations at the Rayleigh number of 10^6 and the Prandtl number of 0.025 have been performed for a bottom heated cylindrical container with equal diameter to height, using computational grids of varied cell sizes. The case of the slightly tilted container was considered where the LSC azimuth position being fixed. The suitability of the used turbulence models was evaluated by comparing the obtained results with the direct numerical simulation data obtained earlier for the same conditions.

Keywords: Rayleigh – Bénard convection, large scale circulation, RANS model, turbulence, cylinder

Funding: The research has been funded in part by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, within the framework of strategic academic leadership "Priority 2030" (Agreement No. 075-15-2021-1333 dated September 30, 2021).

For citation: Smirnov S. I., Smirnov E. M., Experience of using semiempirical differential models of turbulence for calculation of liquid-metal convection in a bottom heated cylinder, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 43–60. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15304

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

Введение

Характерная особенность свободноконвективного течения, которое развивается в цилиндрической емкости, подогреваемой снизу, – это наличие крупномасштабных вихревых структур, занимающих всю область (см., например, обзорные работы [1, 2]). В частности, при равенстве диаметра цилиндра его высоте, ведущей структурой конвективного течения оказывается единичный вихрь, называемый также конвективной ячейкой, или крупномасштабной циркуляцией (КМЦ) [3 – 7]. При строго вертикальной ориентации емкости и осесимметричных граничных условиях, у КМЦ нет выделенного азимутального расположения и, соответственно, ничто ей не препятствует время от времени совершать случайные перемещения в азимутальном направлении. Это подтверждают как экспериментальные [8 – 11], так и численные [12 – 15] исследования турбулентной конвекции Рэлея – Бенара в цилиндрических емкостях. При экспериментальных исследованиях конкретное азимутальное поведение КМЦ определяется малыми, сложно контролируемыми отклонениями от осевой симметрии, неизбежно присутствующими в лабораторной модели. Азимутальная неустойчивость конвективной ячейки обычно проявляется и в численных исследованиях, где в качестве «внешнего» фактора, влияющего на случайные осцилляции КМЦ, выступает несимметричность вычислительной сетки или особенности реализации численных алгоритмов.

© Smirnov S. I., Smirnov E. M., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Случайные азимутальные перемещения конвективной ячейки сильно затрудняют процесс получения статистических данных о ее трехмерной структуре, в том числе величин, характеризующих «фоновую» турбулентность: полей рейнольдсовых напряжений и турбулентного потока тепла. Однако есть возможность подавить указанные низкочастотные перемещения и, таким образом, «зафиксировать» КМЦ в определенном азимутальном положении, если искусственно ввести стабилизирующий внешний фактор; в качестве последнего может выступать, например, небольшой наклон емкости. Данный способ «фиксации» КМЦ используется в экспериментальных [8, 16 – 20] и численных [20 – 24] исследованиях.

На сегодняшний день для описания турбулентной рэлей-бенаровской конвекции в областях с относительно простой геометрией широко используется метод прямого численного моделирования (Direct Numerical Simulation (DNS)). Данный подход предполагает разрешение всех масштабов турбулентного движения жидкости и, как следствие, оказывается наиболее информативным (см., например, работы [25 – 30] для случая вертикально ориентированного цилиндра и работы [23, 24] для случая слегка наклоненной емкости). Однако разрешение всего спектра масштабов сопряжено с большими вычислительными затратами, очень быстро возрастающими при увеличении числа Рэлея.

Снизить затраты позволяет применение метода моделирования крупных вихрей (Large Eddy Simulation (LES)), в частности, в его «упрощенном» варианте Implicit LES (ILES), при реализации которого подсеточная турбулентная вязкость в уравнения переноса явно не вводится, а роль физической вязкости на малых масштабах играют диссипативные свойства численной схемы. Опыт применения ILES-подхода к моделированию турбулентной конвекции Рэлея – Бенара в цилиндрических емкостях содержится в работах [22, 31, 32]. В недавней работе [33] методом ILES исследованы вопросы анизотропии турбулентного переноса в смешаноконвективном течении, развивающемся в тигле установки по выращиванию кристаллов кремния методом Чохральского.

Хорошо известно, однако, что с увеличением числа Рэлея расчет конвективных течений по методу LES требует все большего измельчения расчетной сетки в пристеночных слоях, при этом измельчение требуется по всем пространственным направлениям. Как следствие, получение достоверных численных данных для широкого круга практических задач, характеризуемых большими числами Рэлея, опять-таки, сопряжено с очень большими вычислительными затратами.

В этих условиях сохраняется значительный интерес к численному моделированию турбулентных свободно- и смешаноконвективных течений на основе осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье – Стокса (Reynolds-Averaged Navier – Stokes (RANS)), замкнутых по той или иной полуэмпирической дифференциальной модели турбулентности. Здесь, однако, сразу следует отметить, что в случае конвекции рэлей-бенаровского типа возможность получения стационарного RANS-решения весьма ограничена и зависит от применяемой модели турбулентности. Это предопределяет интерес к постановке задачи, изначально предполагающей проведение расчетов на основе нестационарных уравнений Рейнольдса. Данный подход трактуется как Unsteady RANS (URANS) или Transient RANS (TRANS).

В работах [34 – 36] были обстоятельно изучены возможности URANS-подхода для воспроизведения нестационарных когерентных структур и интенсивности турбулентного переноса в «классическом», статистически одномерном случае свободной конвекции между двумя разнонагретыми горизонтальными пластинами. Авторами этих работ особо отмечается наличие в движении двух различных масштабов: больших амплитуд, связанных с плюмами, термиками и конвективными ячейками, а также турбулентности, возникающей в основном в пристеночных пограничных слоях и переносимой крупномасштабными структурами. Эта особенность делает турбулентную конвекцию Рэлея – Бенара весьма подходящим объектом для расчетов на основе нестационарных уравнений Рейнольдса. Результаты расчетов [34 – 36], проведенных по методу URANS с замыканием по трехпараметрической модели турбулентности, показывают, что осредненный профиль температуры, моменты второго порядка и интегральная теплопередача находятся в хорошем согласии с данными большинства DNS-расчетов и экспериментальными данными по конвекции между горизонтальными пластинами.

В последние годы возрос интерес к RANS-расчетам свободноконвективных течений с замыканием по какому-либо варианту из семейства моделей рейнольдсовых напряжений (Reynolds Stress Model (RSM)) на основе либо стационарных, либо нестационарных формулировок [37 – 41]. В общем случае RSM-модель предполагает решение дифференциальных уравнений переноса всех компонент тензора рейнольдсовых напряжений и вектора турбулентного потока тепла. Стремление несколько упростить модель и уменьшить вычислительные затраты обусловливает интерес к применению «урезанных» формулировок, согласно которым дифференциальные уравнения переноса решаются только для рейнольдсовых напряжений, а расчет турбулентного потока тепла проводится на основе градиентной гипотезы через осредненные параметры потока.

Представленный в литературе опыт применения моделей рейнольдсовых напряжений для расчета турбулентных свободноконвективных течений в поле силы тяжести охватывает, в основном, модельные конфигурации с разнонагретыми вертикальными стенками или же случай пограничного слоя у вертикальной нагретой поверхности [37 – 41].

В настоящей работе одна из хорошо известных RSM-моделей (реализованная, в частности, в программном пакете ANSYS Fluent) применяется для URANS-расчетов конвекции ртути в слегка наклоненном цилиндре, подогреваемом снизу. Аналогичные расчеты проводятся также по двум моделям турбулентности с изотропной вязкостью, из семейств k-ω и k-ε моделей. Результаты расчетов статистических характеристик первого и второго порядков сравниваются с данными работы [23], полученными ранее для рассматриваемой конфигурации на основе DNS-подхода.

Постановка задачи и математическая модель

Рассматривается турбулентная конвекция жидкости в подогреваемой снизу цилиндрической емкости с единичным отношением ее диаметра к высоте ($\Gamma = D/H = 1$). Емкость наклонена на небольшой угол ($\varphi = 2°$) по отношению к вектору гравитационного ускорения **g** (рис. 1, *а*).

На всех границах емкости задаются условия непроницаемости и прилипания. Горизонтальные стенки полагаются изотермическими: нижняя стенка имеет температуру T_h, бульшую, чем верхняя (T_c). Боковая стенка полагается теплоизолированной.

Безразмерными определяющими параметрами задачи являются число Прандтля Pr и число Рэлея Ra:

$$\mathrm{Pr} = \mu C_p / \lambda, \;\; \mathrm{Ra} = \mathrm{Pr}\cdot(\rho^2 g\beta\Delta T H^3 / \mu^2),$$

где μ – коэффициент динамической вязкости; C_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении; λ – коэффициент теплопроводности; ρ – плотность; β – коэффициент объемного расширения; g – ускорение свободного падения; ΔT – температурный перепад между горячей и холодной стенками, $\Delta T = T_h - T_c$.

Характерной (масштабной) скоростью течения (скорость плавучести) служит величина $V_b = (g\beta\Delta T H)^{0,5}$. Масштабом времени является характерное конвективное время $t_b = H/V_b$.

Представляемые расчеты были проведены при значениях гидродинамических чисел Pr = 0,025 и $\mathrm{Ra} = 10^6$.

Конвективное движение рассчитывается на основе системы нестационарных осредненных по Рейнольдсу уравнений динамики и теплопереноса (1) – (3), которая включает уравнения Навье – Стокса, записанные в приближении Буссинеска для учета эффектов плавучести в поле гравитационной силы, уравнение неразрывности и уравнение энергии:

$$\frac{\partial V_j}{\partial x_j} = 0, \tag{1}$$

$$\rho\frac{\partial V_i}{\partial t} + \rho V_j\frac{\partial V_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial\left(\tau_{ij} + \tau_{t,ij}\right)}{\partial x_j} - \rho\beta\left(T - T_0\right)g_i, \tag{2}$$

$$\rho C_p\frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p V_j\frac{\partial T}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(q_j + q_{t,j}\right). \tag{3}$$

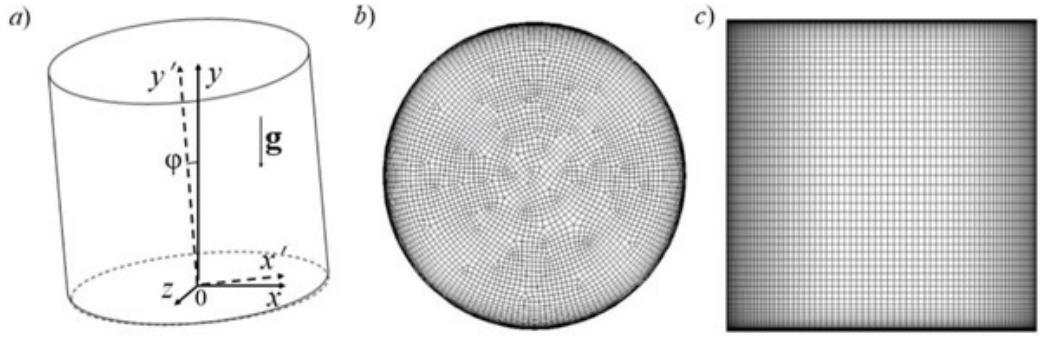


Рис. 1. Изображения цилиндрической емкости к постановке задачи: *a* – геометрия вычислительной области; *b*, *c* – характерный вид расчетных сеток в горизонтальном (*b*) и центральном вертикальном (*c*) сечениях

Уравнения решаются в системе координат, связанной с цилиндрической емкостью $x_j = (x', y', z' = z)$, показанной на рис. 1, *a*. Буквами V_i и T обозначены компоненты осредненной по Рейнольдсу скорости ($i(j) = 1, 2, 3$) и температуры; τ_{ij}, q_j – компоненты тензора вязких напряжений и вектора плотности диффузионного потока тепла, вычисляемые через осредненные по Рейнольдсу величины:

$$\tau_{ij} = \mu\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i}\right), \tag{4}$$

$$q_j = -\lambda\frac{\partial T}{\partial x_j}. \tag{5}$$

Входящие в уравнения (2), (3) величины $\tau_{t,ij}$, $q_{t,j}$ – это компоненты тензора турбулентных (рейнольдсовых) напряжений и вектора турбулентного потока тепла, возникающих при рейнольдсовом осреднении и отражающих наличие в актуальном движении относительно высокочастотных флуктуаций скорости v_i и температуры θ.

Соответственно,

$$\tau_{t,ij} = -\rho\overline{v_i v_j}, \tag{6}$$

$$q_{t,j} = -\rho C_p\overline{v_j\theta}, \tag{7}$$

где черта сверху указывает на осреднение по Рейнольдсу.

Система уравнений (1) – (3) не замкнута. Для замыкания системы требуется определить метод (модель) для расчета величин $\tau_{t,ij}$ и $q_{t,j}$.

Представляемые в настоящей работе расчетные данные получены при замыкании системы (1) – (3) по трем моделям.

Модели *k*-ε RNG и *k*-ω SST. Данные модели принадлежат к классу дифференциальных двухпараметрических моделей турбулентности, основанных на концепции изотропной турбулентной вязкости (гипотезе Буссинеска). Согласно этой концепции, компоненты тензора турбулентных напряжений и вектора турбулентного потока тепла связаны с осредненными по Рейнольдсу параметрами течения следующим образом:

$$\tau_{t,ij} = \mu_t\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}k\delta_{ij}, \tag{8}$$

$$q_{t,j} = -\lambda_t\frac{\partial T}{\partial x_j}, \tag{9}$$

где μ_t – коэффициент турбулентной вязкости, определяемый через рассчитываемые параметры турбулентности (k, ε или ω); λ_t – коэффициент турбулентной теплопроводности, $\lambda_t = C_p\mu_t/\mathrm{Pr}_t$ (Pr_t – турбулентное число Прандтля (в настоящих расчетах полагалось равным 0,8)); k – кинетическая энергия турбулентных пульсаций.

Полная формулировка моделей k-ε RNG и k-ω SST дается в работах [42] и [43, 44] соответственно.

Модель рейнольдсовых напряжений. В настоящей работе применялась дифференциальная модель рейнольдсовых напряжений, реализованная в пакете ANSYS Fluent 18.2. Эта модель предполагает решение уравнений переноса только для турбулентных напряжений, при этом компоненты вектора турбулентного потока тепла вычисляются через осредненные параметры потока на основе градиентной гипотезы.

Уравнения переноса рейнольдсовых напряжений в общем случае формулируются в следующем виде:

$$\rho\frac{\partial\left(\overline{v_iv_j}\right)}{\partial t}+\rho V_j\frac{\partial\left(\overline{v_iv_j}\right)}{\partial x_j}=D_{ij}^m+D_{ij}^t+R_{ij}+G_{ij}+\varphi_{ij}-\varepsilon_{ij}, \tag{10}$$

где D_{ij}^m, D_{ij}^t – слагаемые, отражающие молекулярный (m) и турбулентный (t) диффузионные переносы; R_{ij}, G_{ij} – слагаемые, характеризующие процессы получения энергии от осредненного движения и генерации за счет сил плавучести, соответственно; φ_{ij} – величина, отвечающая за перераспределение энергии между тензорами напряжений и скоростей деформации; ε_{ij} – диссипативный член.

Совместно с уравнениями для рейнольдсовых напряжений решается дифференциальное уравнение переноса величины ω – удельной скорости диссипации кинетической энергии, используемой для замыкания уравнений (10). Из опций, доступных пользователю пакета ANSYS Fluent и определяющих конкретный вид данного уравнения, при проведении представляемых расчетов была выбрана опция “Stress Omega”.

Компоненты вектора турбулентного потока тепла $\overline{v_i\theta}$ вычисляются по формулам:

$$\overline{v_i\theta}=\frac{\mu_t}{\rho\,\mathrm{Pr}_t}\frac{\partial T}{\partial x_i},\ \mu_t=\frac{\rho k}{\omega},\ k=\frac{1}{2}\overline{v_iv_i}, \tag{11}$$

где $\mathrm{Pr}_t = 0{,}8$ (как и ранее).

Описание составляющих модели рейнольдсовых напряжений содержится в работах [45 – 47], а также в пользовательской документации к программному пакету ANSYS Fluent 18.2.

Аспекты вычислений и обработки данных

Сопоставительные расчеты по реализованному в пакете ANSYS Fluent методу конечных объемов выполнялись на двух сетках, состоявших из гексагональных элементов, размерностью 0,47 млн. (сетка С1) и 3,7 млн. ячеек (С2). Структура сеток в поперечном и продольном (центральном) сечениях иллюстрируется на рис. 1, *b*, *c*. Сетки сгущались к стенкам, при этом размер пристенного элемента составлял $1{,}5\cdot10^{-4}H$. Характерной особенностью сеток было наличие центральной «неструктурированной» (асимметричной) подобласти диаметром около $0{,}8D$ (см. рис. 1, *b*).

Предварительные расчеты привели к заключению о невозможности получения стационарного решения задачи ни по одной из примененных моделей турбулентности. Все последующие расчеты были выполнены в нестационарной постановке. Продвижение по времени проводилось на основе метода дробных шагов второго порядка. Временной шаг составлял около одной сотой от масштабного времени задачи t_b, и примерно в 10 раз превышал тот, который использовался в работе [23] при расчетах по методу DNS.

Пространственная аппроксимация конвективных слагаемых в уравнениях переноса осуществлялась по схеме QUICK, имеющей номинально третий порядок точности. Диффузионные члены аппроксимировались по центрально-разностной схеме второго порядка точности.

Все расчеты стартовали с нулевого начального поля скорости и однородного температурного поля, с предписанным значением $(T_c + T_h)/2$. Выборки для временного осреднения, выполнявшегося по прошествии переходного участка, во всех расчетах составляли $3000t_b$.

Обработка расчетных данных для получения статистических характеристик первого и второго порядка основывалась на следующих предпосылках.

Во-первых, считалось, что актуальные значения скорости и температуры, присутствующие в реальном течении (помечены звездочкой), можно разложить на низко- и высокочастотную составляющие:

$$V_i^* = V_i + v_i,\ T^* = T + \theta. \tag{12}$$

Во-вторых, полагалось, что осредненное по Рейнольдсу движение содержит лишь низкочастотные «крупномасштабные» составляющие полей скорости и температуры, т. е.

$$\overline{V_i^*} = V_i,\ \overline{T^*} = T, \tag{13}$$

которые, в свою очередь, можно разложить на средние величины, полученные осреднением по достаточно большой временной выборке t_{avr}, и пульсационные составляющие:

$$V_i = \langle V_i \rangle + V_i',\ T = \langle T \rangle + T'. \tag{14}$$

Здесь угловые скобки $\langle ... \rangle$ указывают на временно́е осреднение, а штрихом помечается пульсация.

При этом

$$\langle V_i^* \rangle = \langle V_i \rangle,\ \langle T^* \rangle = \langle T \rangle. \tag{15}$$

Введем далее обозначения для статистических характеристик второго порядка (вторых моментов):

$$P_{ij}^t = \langle V_i^* V_j^* \rangle - \langle V_i^* \rangle \langle V_j^* \rangle, \tag{16}$$

$$Q_i^t = \langle V_i^* T^* \rangle - \langle V_i^* \rangle \langle T^* \rangle, \tag{17}$$

которые представляют собой компоненты тензора (взятые с обратным знаком) полных турбулентных напряжений и полного вектора турбулентного потока тепла.

Учитывая разложения (12), (14), получим:

$$P_{ij}^t = \langle V_i' V_j' \rangle + \langle \overline{v_i v_j} \rangle + \langle V_i' v_j \rangle + \langle v_i V_j' \rangle, \tag{18}$$

$$Q_i^t = \langle V_i' T' \rangle + \langle \overline{v_i \theta} \rangle + \langle V_i' \theta \rangle + \langle v_i T' \rangle. \tag{19}$$

В правых частях выражений (18) и (19) первые слагаемые отражают вклад численно разрешаемых составляющих движения, вторые – вклад моделируемых составляющих, третьи и четвертые – так называемые перекрестные члены, которые вынужденно отбрасываются (как и в работах [34 – 36]), ввиду предположения о слабой скоррелированности низко- и высокочастотной составляющих движения. Приемлемость такого предположения в случае непрерывного спектра пульсаций в актуальном турбулентном течении обычно оценивается апостериори, т. е. по итогам сравнения с «эталонными» данными численных и экспериментальных исследований.

Таким образом, для сравнения с данными статьи [23], полученными нами ранее на основе метода DNS, значения полных турбулентных напряжений, компонент полного вектора турбулентного потока тепла и суммарной кинетической энергии пульсационного движения рассчитывались как

$$P_{ij}^t = \left\langle V_i' V_j' \right\rangle + \left\langle \overline{v_i v_j} \right\rangle, \tag{20}$$

$$Q_i^t = \left\langle V_i' T' \right\rangle + \left\langle \overline{v_i \theta} \right\rangle, \tag{21}$$

$$K^t = \frac{1}{2} P_{ii}^t. \tag{22}$$

При вычислениях по модели рейнольдсовых напряжений, вклад моделируемой части величины P_{ij}^t определялся через осреднение рейнольдсовых напряжений, полученных за время t_{avr} при решении уравнений переноса (10).

Вклад моделируемой составляющей в суммарный вектор турбулентного потока тепла оценивался следующим образом:

$$\left\langle \overline{v_i \theta} \right\rangle = \left\langle \frac{\mu_t}{\rho \, \mathrm{Pr}_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right\rangle \approx \frac{\left\langle \mu_t \right\rangle}{\rho \, \mathrm{Pr}_t} \frac{\partial \left\langle T \right\rangle}{\partial x_i}. \tag{23}$$

Данное выражение получено на основе градиентной гипотезы (11) в предположении о слабой скоррелированности пульсаций турбулентной вязкости и численно разрешаемых пульсаций температуры.

Результаты расчетов и их обсуждение

Ниже представлены результаты расчетов в безразмерном виде. Значения координат отнесены к высоте емкости H. При этом подразумевается следующее соответствие:

$$x_{i(j)} = x', y', z' \text{ при } i(j) = 1, 2, 3.$$

Составляющие скорости отнесены к скорости плавучести V_b, турбулентные напряжения P_{ij}^t и кинетическая энергия K^t – к квадрату скорости плавучести; составляющие вектора турбулентного потока тепла Q_i^t нормированы на произведение $V_b \Delta T$.

Средние по времени поля течения и локальная теплоотдача. Рис. 2, *a* иллюстрирует осредненную картину конвекции ртути в подогреваемом снизу цилиндре с отчетливо выраженной КМЦ, предсказываемой по результатам URANS-расчетов для различных моделей турбулентности.

На рис. 2, *b* приводится поле осредненной по времени осевой составляющей скорости $\left\langle V_{y'} \right\rangle$ в центральном поперечном сечении цилиндра. Видно, что при «фиксации» КМЦ в данном азимутальном положении течение симметрично относительно плоскости $x'0y'$. Распределения осредненной осевой скорости вдоль координаты x' в том же сечении (рис. 2, *c*), рассчитанные для различных RANS-моделей, практически идентичны и очень близки к распределению, полученному в нашей работе [23] по DNS-методу.

Распределения средней температуры вдоль центральной оси емкости, рассчитанные для трех RANS-моделей, сопоставляются между собой и с данными DNS на рис. 2, *d*. Наблюдается в целом хорошая согласованность результатов, полученных по различным моделям/подходам: в частности, все из них предсказывают наличие протяженной центральной зоны с обратным градиентом температуры. Вместе с тем, более детальный анализ распределений в области, прилегающей к торцевой стенке (см. увеличенный фрагмент на рис. 2, *d*) позволяет заключить, что в случае k-ε RNG-модели градиент температуры в этой области, а значит и локальный тепловой поток на стенке, несколько меньше (на 2 – 3 %), чем в случае двух других RANS-моделей, которые предсказывают значения градиента, практически совпадающие с результатом DNS-расчета.

На рис. 3 приведены распределения осредненного по времени локального числа Нуссельта на нижней стенке, иллюстрирующие, в частности, сильную пространственную неоднородность данной величины, которая обусловлена наличием КМЦ. Результаты RANS-расчетов находятся в весьма удовлетворительном согласии с DNS-данными, особенно для варианта RSM-модели: в этом случае воспроизводится не только серповидная зона максимальной теплоотдачи, но и ясно очерченная область наименьших значений числа Нуссельта.

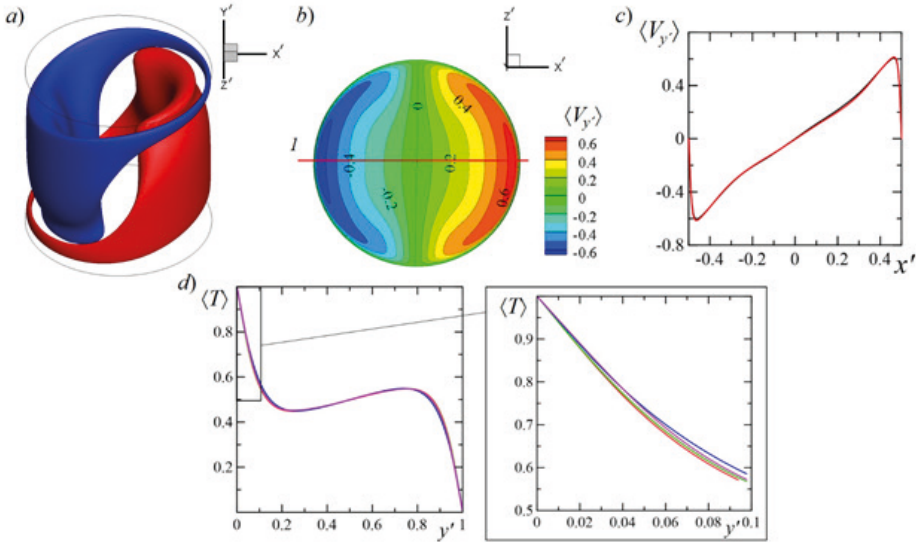


Рис. 2. Сопоставление графиков расчетных величин задачи, полученных с использованием разных моделей: URANS (*a*, *b*), URANS, DNS (*c*), DNS, RSM, *k*-ω SST, *k*-ε RNG (*d*). Представлены изоповерхности осредненной по времени осевой компоненты скорости восходящего (красный цвет) и нисходящего (синий) течений, $|\langle V_{y'}\rangle| = 0{,}3$ (*a*); поле осредненной осевой составляющей скорости в центральном поперечном сечении (*b*), а также распределения этой скорости вдоль линии *1* (две кривые совпадают) (*c*); распределения осредненной температуры вдоль оси емкости по моделям DNS (красные кривые), RSM (зеленые), *k*-ω SST (синие), *k*-ε RNG (лиловые) (*d*)

Осреднение по поверхности стенки распределений, показанных на рис. 3, дает интегральные числа Нуссельта, приведенные в таблице. Видно, что эти значения, полученные по разным RANS-моделям, отличаются от данных DNS не более, чем на 3,6 %: в случае *k*-ε RNG-модели отклонение наблюдается в меньшую сторону, а для двух других моделей – в бульшую. Результат, наиболее близкий к полученному методом DNS, дает модель рейнольдсовых напряжений.

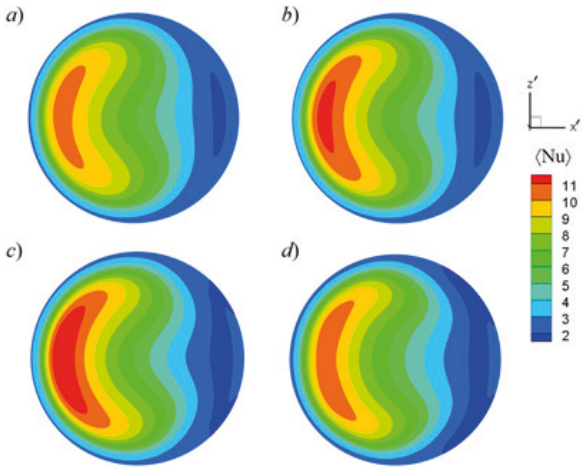


Рис. 3. Распределения на нижней стенке цилиндра осредненного по времени локального числа Нуссельта, полученные с помощью моделей: DNS [23] (*a*), RSM (*b*), *k*-ω SST (*c*) и *k*-ε RNG (*d*)

Таблица

Сравнение значений интегрального числа Нуссельта, полученных по разным RANS-моделям, с данными DNS

Модель	*k*-ε RNG	*k*-ω SST	RSM	DNS [23]
Nu	5,46	5,84	5,78	5,64

В завершение данного подраздела отметим, что представленные в нем данные URANS-расчетов были получены с использованием сетки C1. Аналогичные расчеты были выполнены на сетке C2, содержащей большее число ячеек (почти на порядок). Было установлено, что осредненные по времени распределения/профили скорости, температуры и локального числа Нуссельта, рассчитанные на двух сетках, практически совпадают (с точностью до толщины визуализирующих линий). Интегральные числа Нуссельта отличались лишь в четвертом знаке. Таким образом, применительно к родственным задачам о трехмерной рэлей-бенаровской конвекции жидкого металла можно заключить, что размерности сеток около полумиллиона ячеек достаточно для предсказания статистических данных первого порядка на основе URANS-подхода при значениях числа Рэлея порядка 10^6.

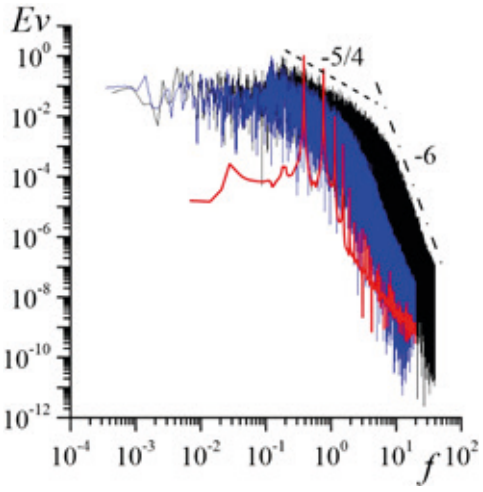


Рис. 4. Энергетические спектры пульсаций осевой компоненты скорости $V_{y'}$ в точке при $x' = 0{,}35$ на линии пересечения плоскости $x'0y'$ и центрального поперечного сечения (см. рис. 1, *a*); данные получены по разным моделям:
DNS [23] (черная кривая), RSM (синяя), *k*-ε RNG (красная); аппроксимации функциями $Ev \sim f^{-5/4}$ (штриховая линия) и f^{-6} (штрихпунктирная)

Спектральные характеристики. На рис. 4 показаны энергетические спектры пульсаций осевой компоненты скорости в точке, расположенной при $x' = 0{,}35$ на линии пересечения плоскости $x'0y'$ и центрального поперечного сечения. Спектры, полученные в расчетах на измельченной сетке (C2, 3,7 млн. ячеек) для моделей RSM и *k*-ε RNG сравниваются со спектром из работы [23], вычисленным по методу DNS на сетке, содержащей около 15 млн. ячеек. Отметим, что спектр, рассчитанный по модели *k*-ω SST, практически накладывается на спектр, полученный по модели рейнольдсовых напряжений (на рис. 4 не показан).

В случае модели RSM (а также *k*-ω SST) полученный спектр указывает на численное разрешение турбулентных пульсаций в заметной части квазиинерционного интервала, более выраженного в случае DNS-расчетов и указывающего на убывание спектральной плотности пропорционально $f^{-5/4}$; данный темп убывания близок к классическому закону $Ev \sim f^{-5/3}$ (Ev – спектральная плотность энергии, обезразмеренная на свое максимальное значение, f – безразмерная частота) для инерционного интервала в случае развитой изотропной турбулентности. Соответственно происходит более ранний, по сравнению с DNS, переход на выраженный «диссипативный» участок очень быстрого убывания, приблизительно пропорционального f^{-6}. В противоположность этому, согласно модели *k*-ε RNG, предсказывается нестационарный режим конвекции с квазипериодическими пульсациями, охватывающими область промежуточных частот. Различие в результатах, полученных по моделям *k*-ω SST и *k*-ε RNG, обусловлено прежде всего тем, что последняя генерирует существенно более высокий уровень турбулентной вязкости, по сравнению с *k*-ω SST-моделью.

Турбулентные напряжения и турбулентный поток тепла. Далее перейдем к рассмотрению результатов, полученных по RANS-моделям для моментов второго порядка.

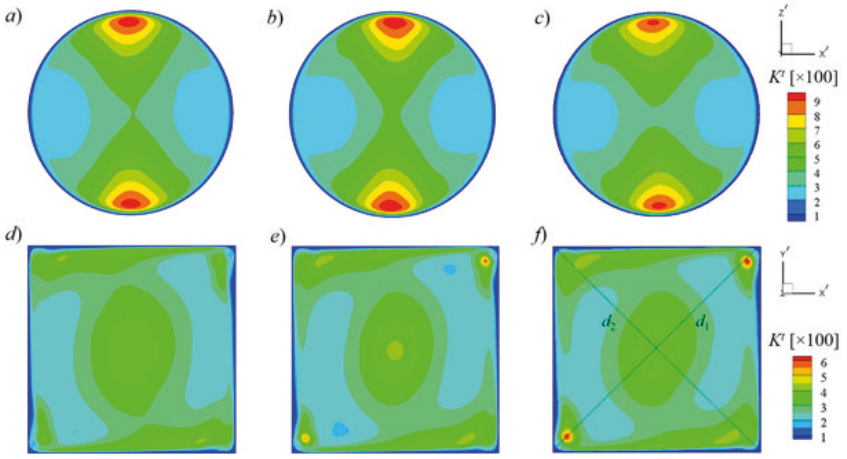


Рис. 5. Распределения кинетической энергии турбулентности в двух центральных сечениях цилиндра, полученные по моделям RSM (*a*, *b*, *d*, *e*) и DNS [23] (*c*, *f*), а также с использованием сеток C1 (*a*, *d*) и C2 (*b*, *e*)

Рис. 5 иллюстрирует влияние размерности расчетной сетки на качество предсказания RSM-моделью характерных особенностей, наблюдаемых в поле кинетической энергии турбулентности, в сопоставлении с данными DNS.

Указанные особенности заключаются в следующем:

1) наиболее интенсивный уровень пульсаций (красно-желтые зоны на рис. 5, $a - c$) наблюдается в слоях смешения, формирующихся при взаимодействии восходящего и нисходящего потоков в КМЦ;

2) в областях интенсивных восходящего и нисходящего потоков наблюдается крайне слабое пульсационное движение, и кинетическая энергия принимает в этих областях минимальные значения;

3) небольшие по размеру зоны с повышенными значениями кинетической энергии наблюдаются в угловых областях (красно-желтые «пятна» на рис. 5, *e*, *f*), где формируются стационарные в среднем, угловые вихри (это показано в работе [23]) и, соответственно, слои смешения с глобальным вихрем в виде КМЦ. В расчетах по RSM-модели первые две особенности хорошо воспроизводятся на обеих сетках, тогда как третью не удается предсказать при использовании огрубленной сетки (см. рис. 5, *d*). То же относится и к полям турбулентных напряжений в угловых областях, которые анализируются далее.

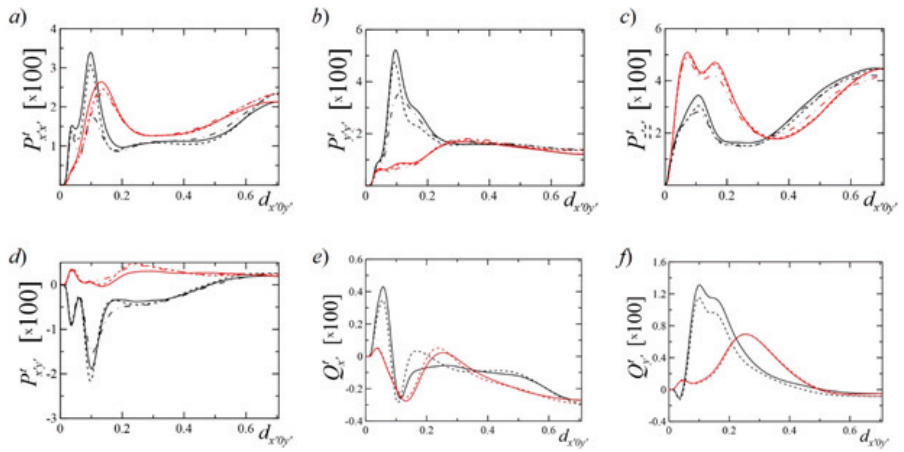


Рис. 6. Распределения компонент тензора турбулентных напряжений ($a - d$) и компонент вектора турбулентного потока тепла (*e*, *f*) вдоль диагоналей d_1 (черные кривые) и d_2 (красные) (см. рис. 5, *f*).

Данные получены по разным моделям: DNS [23] (сплошные кривые), URANS-расчеты по RSM-модели (остальные), а также с использованием сеток C1 (штрихпунктиры) и C2 (пунктиры)

На рис. 6 представлены рассчитанные распределения компонент тензора полных турбулентных напряжений и вектора турбулентного потока тепла вдоль диагоналей центрального продольного сечения емкости (см. рис. 5, *f*). Анализ факторов, определяющих вид представленных кривых, проведен в нашей работе [23]. В случае URANS-расчетов по RSM-модели кривые отражают суммарный вклад двух составляющих рассматриваемых величин: численно разрешаемой и моделируемой. Видно, что результаты URANS-вычислений на сетке C2 весьма удовлетворительно согласуются с данными DNS. Как отмечалось выше, на огрубленной сетке C1 не воспроизводятся особенности статистики второго порядка в слоях смешения, формирующихся при взаимодействии угловых вихрей и КМЦ: этот недостаток отчетливо прослеживается по расчетным результатам, представленным на рис. 6, *a*, *b*. С учетом этого факта результаты URANS-вычислений вектора турбулентного потока тепла (см. рис. 6, *e*, *f*) показаны только для измельченной сетки. Здесь также можно видеть в целом хорошую согласованность с данными DNS.

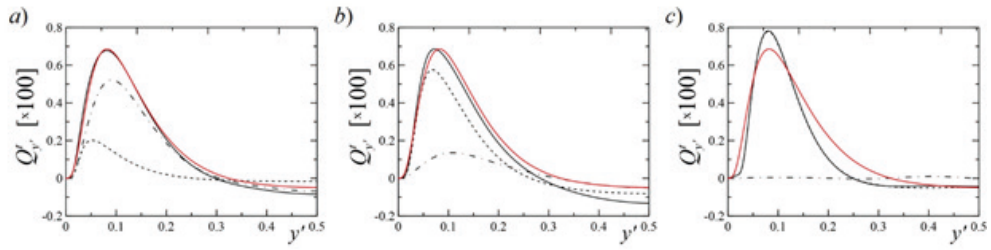


Рис. 7. Распределения осевой компоненты турбулентного потока тепла вдоль оси цилиндра; сравнение между расчетными данными разных RANS-моделей (черные кривые) и данными DNS [23] (красные), а также между вкладами составляющих турбулентного потока: моделируемой (пунктиры), численно разрешаемой (штрихпунктиры) и суммарной двух составляющих (сплошные линии). RANS-модели: RSM (*a*), *k*-ω SST (*b*), *k*-ε RNG (*c*)

Профили осевой компоненты вектора турбулентного потока тепла, полученные по различным моделям турбулентности для линии, совпадающей с осью цилиндра, сопоставляются с данными DNS на рис. 7, где отражены вклады численно разрешаемой и моделируемой составляющих потока, а также их суммарный вклад. Видны сильные различия между результатами вычислений по различным RANS-моделям. Для области $|y'| < 0{,}2$ с большими градиентами средней температуры (см. рис. 2, *d*) модель рейнольдсовых напряжений дает сопоставимые по величине значения для обеих составляющих полного потока, но с выраженным преобладанием разрешаемой составляющей.

В случае модели *k*-ω SST (рис. 7, *b*), наоборот, преобладает моделируемая составляющая, а при использовании *k*-ε RNG-модели вклад разрешаемой составляющей практически отсутствует. Последнее обстоятельство, очевидно, связано с повышенным уровнем турбулентной вязкости в случае *k*-ε RNG-модели и относительно низкой интенсивностью предсказываемого квазипериодического течения. Соответственно, и профиль полного турбулентного теплового потока хуже всего оценивается в случае *k*-ε RNG.

На рис. 7 видно, что результаты, полученные по модели рейнольдсовых напряжений, находятся в очень хорошем согласии с данными DNS, несмотря на то, что для оценки моделируемой составляющей использовался упрощенный подход, основанный на применении градиентной гипотезы. Следовательно, можно заключить, что в случае URANS-расчетов рэлей-бенаровской конвекции с трехмерной КМЦ, проведенных по модели рейнольдсовых напряжений на достаточно измельченных сетках, нет необходимости решать дифференциальные уравнения переноса для компонент вектора турбулентного потока тепла.

Заключение

В работе проведена оценка возможностей трех различных RANS-моделей турбулентности (k-ω SST, k-ε RNG и одной из хорошо известных дифференциальных RSM-моделей) по предсказанию локальных и интегральных характеристик статистически трехмерной рэлей-бенаровской конвекции жидкого металла с определяющей ролью крупномасштабной циркуляции (КМЦ). Сформулированные выводы основаны на результатах нестационарных расчетов конвекции (Unsteady RANS), проведенных для слабо наклоненной цилиндрической емкости при числе Рэлея $Ra = 10^6$ и числе Прандтля $Pr = 0{,}025$, в сопоставлении с ранее полученными данными прямого численного моделирования (DNS) для тех же условий.

По результатам тестовых расчетов установлено, что при использовании программного средства, реализующего численные схемы второго порядка точности, размерности сеток около полумиллиона ячеек достаточно для предсказания осредненных по времени полей скорости, температуры, локальной и интегральной теплоотдачи. Этот вывод может быть распространен на случай близких по геометрии задач о трехмерной рэлей-бенаровской конвекции жидкого металла. Для аккуратного предсказания статистических данных второго порядка (полных турбулентных напряжений и составляющих вектора турбулентного потока тепла) требуются сетки с числом ячеек, бóльшим на порядок.

Все использованные RANS-модели турбулентности предсказывают осредненные во времени поля скорости и температуры, а также локальную теплоотдачу на торцевых стенках, которые хорошо согласуются с данными DNS. Интегральные значения числа Нуссельта, полученные по разным RANS-моделям, отличаются от данных DNS не более, чем на 3,6 %; при этом в случае k-ε RNG-модели наблюдается отклонение в меньшую сторону, а для двух других моделей – в бóльшую. Результат, наиболее близкий к полученному по методу DNS, дает модель рейнольдсовых напряжений.

При использовании моделей k-ω SST и RSM численное решение, полученное на сетке размерностью 3,7 млн. ячеек, имеет турбулентный характер, со сплошным спектром разрешаемых пульсаций, вносящих большой вклад в статистические характеристики второго порядка. В противоположность этому, модель k-ε RNG предсказывает нестационарный режим конвекции с квазипериодическими пульсациями малой интенсивности, и практически весь вклад в моменты второго порядка дает моделируемая составляющая. Наилучшее согласие с данными DNS по суммарным моментам второго порядка получено при использовании модели рейнольдсовых напряжений.

С учетом вышеизложенного, представленный в настоящей работе опыт применения данного подхода для решения модельной задачи может быть полезен при численном исследовании широкого круга индустриальных и геофизических проблем, связанных с изучением конвекции рэлей-бенаровсокого типа, в которой важную или даже определяющую роль играет статистически трехмерная крупномасштабная циркуляция.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ahlers G., Grossmann S., Lohse D.** Heat transfer and large scale dynamics in turbulent Rayleigh – Bénard convection // Reviews of Modern Physics. 2009. Vol. 81. No. 2. Pp. 503–538.

2. **Chilla F., Schumacher J.** New perspectives in turbulent Rayleigh – Bénard convection // The European Physical Journal. E. 2012. Vol. 35. No. 7. P. 58.

3. **Castaing B., Gunaratne G., Heslot F., Kadanoff L., Libchaber A., Thomae S., Wu X.-Z., Zaleski S., Zanetti G.** Scaling of hard thermal turbulence in Rayleigh – Bénard convection // Journal of Fluid Mechanics. 1989. Vol. 204. July. Pp. 1–30.

4. **Ahlers G., Xu X.** Prandtl-number dependence of heat transport in turbulent Rayleigh – Bénard convection // Physical Review Letters. 2001. Vol. 86. No. 15. Pp. 3320–3323.

5. **Shishkina O., Thess A.** Mean temperature profiles in turbulent Rayleigh –Bénard convection of water // Journal of Fluid Mechanics. 2009. Vol. 633. 25 August. Pp. 449–460.

6. **Li Y.-R., Ouyang Y.-Q., Peng L., Wu S.-Y.** Direct numerical simulation of Rayleigh – Bénard convection in a cylindrical container of aspect ratio 1 for moderate Prandtl number fluid // Physics of Fluids. 2012. Vol. 24. No. 7. P. 074103.

7. **Lakkaraju R., Stevens R. J. A. M., Verzicco R., Grossmann S., Prosperetti A., Sun C., Lohse D.** Spatial distribution of heat flux and fluctuations in turbulent Rayleigh – Bénard convection // Physical Review. E. 2012. Vol. 86. No. 5. P. 056315.

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

9. **Qui X.-L., Tong P.** Large-scale velocity structures in turbulent thermal convection // Physical Review. E. 2001. Vol. 64. No. 3. P. 036304.

10. **Sreenivasan K. R., Bershadskii A., Niemela J. J.** Mean wind and its reversal in thermal convection // Physical Review. E. 2002. Vol. 65. No. 5. P. 056306.

11. **Zürner T., Schindler F., Vogt T., Eckert S., Schumacher J.** Combined measurement of velocity and temperature in liquid metal convection // Journal of Fluid Mechanics. 2019. Vol. 876. 10 October. Pp. 1108–1128.

12. **Abramov A. G., Ivanov N. G., Smirnov E. M.** Numerical study of high-Ra Rayleigh – Bénard mercury and water convection in confined enclosures using a hybrid RANS/LES technique // Proceedings of the Eurotherm Seminar 74 "Heat Transfer in Unsteady and Transitional Flows". March 23–26, 2003; Eindhoven, the Netherlands. Ed. by H. C. de Lange, A. A. van Steenhoven, TUE, 2003. Pp. 33–38.

13. **Stevens R. J. A. M., Clercx H. J. H., Lohse D.** Effect of plumes on measuring the large scale circulation in turbulent Rayleigh – Bénard convection // Physics of Fluids. 2011. Vol. 23. No. 9. P. 095110.

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

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

16. **Chilla F., Rastello M., Chaumat S., Castaing B.** Long relaxation times and tilt sensitivity in Rayleigh – Bénard turbulence // The European Physical Journal. B. 2004. Vol. 40. No. 2. Pp. 223–227.

17. **Brown E., Ahlers G.** Rotations and cessations of the large-scale circulation in turbulent Rayleigh – Bénard convection // Journal of Fluid Mechanics. 2006. Vol. 568. 10 December. Pp. 351–386.

18. **Xi H.-D., Xia K.-Q.** Azimuthal motion, reorientation, cessation, and reversal of the large-scale circulation in turbulent thermal convection: A comparative study in aspect ratio one and one-half geometries // Physical Review. E. 2008. Vol. 78. No. 3. P. 036326.

19. **Ji D., Bai K., Brown E.** Effects of tilt on the orientation dynamics of the large-scale circulation in turbulent Rayleigh – Bénard convection // Physics of Fluids. 2020. Vol. 32. No. 7. P. 075118.

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

21. **Shishkina O., Horn S.** Thermal convection in inclined cylindrical containers // Journal of Fluid Mechanics. 2016. Vol. 790. 10 March. P. R3.

22. **Smirnov S. I., Abramov A. G., Smirnov E. M.** Numerical simulation of turbulent Rayleigh – Bénard mercury convection in a circular cylinder with introducing small deviations from the axisymmetric formulation // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1359. No. 1. P. 012077.

23. **Смирнов С. И., Смирнов Е. М.** Прямое численное моделирование турбулентной конвекции Рэлея – Бенара в слегка наклоненном цилиндрическом контейнере // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 1. С. 14–25.

24. **Smirnov S., Smirnovsky A., Bogdanov S.** The emergence and identification of large-scale coherent structures in free convective flows of the Rayleigh – Bénard type // Fluids. 2021. Vol. 6. No. 12. Pp. 431–450.

25. **Van der Poel E. P., Stevens R. J. A. M., Lohse D.** Comparison between two- and three-dimensional Rayleigh – Bénard convection // Journal of Fluid Mechanics. 2013. Vol. 736. 10 December. Pp. 177–194.

26. **Horn S., Shishkina O.** Toroidal and poloidal energy in rotating Rayleigh – Bénard convection // Journal of Fluid Mechanics. 2015. Vol. 762. 10 January. Pp. 232–255.

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

28. **Sakievich P. J., Peet Y. T., Adrian R. J.** Large-scale thermal motions of turbulent Rayleigh – Bénard convection in a wide aspect-ratio cylindrical domain // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2016. Vol. 61. No. 2. Pp. 193–196.

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

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

31. **Смирнов С. И., Смирнов Е. М., Смирновский А. А.** Влияние теплопереноса в торцевых стенках на турбулентную конвекцию ртути во вращающемся цилиндре // Научно-технические ведомости СПбПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 1. С. 31–46.

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

33. **Borisov D. V., Kalaev V. V.** ILES of melt turbulent convection with conjugated heat transfer in the crucible and gas flow for Czochralski silicon crystal growth system // Journal of Crystal Growth. 2021. Vol. 573. No. 3. P. 126305.

34. **Kenjereš S., Hanjalić K.** Transient analysis of Rayleigh – Bénard convection with a RANS model // International Journal of Heat and Fluid Flow. 1999. Vol. 20. No. 3. Pp. 329–340.

35. **Hanjalić K., Kenjereš S.** Reorganization of turbulence structure in magnetic Rayleigh – Bénard convection: a T-RANS study // Journal of Turbulence. 2000. Vol. 1. No. 8. Pp. 1–22.

36. **Kenjereš S., Hanjalić K.** LES, T-RANS and hybrid simulations of thermal convection at high Ra numbers // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2006. Vol. 27. No. 5. Pp. 800–810.

37. **Choi S.-K., Han J.-W., Choi H.-K.** Performance of second-moment differential stress and flux models for natural convection in an enclosure // International Communications in Heat and Mass Transfer. 2018. Vol. 99. December. Pp. 54–61.

38. **Clifford C. E., Kimber M. L.** Assessment of RANS and LES turbulence models for natural convection in a differentially heated square cavity // Numerical Heat Transfer. Part A. 2020. Vol. 78. No. 10. Pp. 560–594.

39. **Левченя А. М., Трунова С. Н., Колесник Е. В.** Оценка возможностей RANS-моделей турбулентности по результатам расчетов свободной конвекции, развивающейся вблизи внезапно нагретой вертикальной пластины // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 2. С. 27–40.

40. **Katsamis C., Craft T., Iacovides H., Uribe J. C.** Use of 2-D and 3-D unsteady RANS in the computation of wall bounded buoyant flows // International Journal of Heat and Fluid Flow. 2022. Vol. 93. February. P. 108914.

41. **Левченя А. М., Смирнов Е. М., Трунова С. Н.** Влияние периодической макрошероховатости на развитие турбулентной свободной конвекции у внезапно нагреваемой вертикальной пластины // Письма в Журнал технической физики. 2022. Т. 48. № 3. С. 47–50.

42. **Orszag S. A., Yakhot V., Flannery W. S., Boysan F., Choudhury D., Maruzewski J., Patel B.** Renormalization group modeling and turbulence simulations // Proceedings of the International Conference on Near-Wall Turbulent Flows, Tempe, Arizona, USA, 15–17 March 1993. P. 1031.

43. **Menter F. R.** Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA Journal (Journal of the American Institute of Aeronautics and Astronautics). 1994. Vol. 32. No. 8. Pp. 1598–1605.

44. **Menter F. R., Kuntz M., Langtry R.** Ten 2022s of industrial experience with the SST turbulence model // Turbulence, Heat and Mass Transfer. Vol. 4. Proceedings of the Fourth International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer. Antalya, Turkey, 12–17 October, 2003. Pp. 625–632.

45. **Launder B. E., Reece G. J., Rodi W.** Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure // Journal of Fluid Mechanics. 1975. Vol. 68. No. 3. Pp. 537–566.

46. **Gibson M. M., Launder B. E.** Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric

boundary layer // Journal of Fluid Mechanics. 1978. Vol. 86. No. 3. Pp. 491–511.

47. **Wilcox D. C.** Turbulence modeling for CFD. 2nd edition. La Canada, California: DCW Industries, 1998. 457 p.

REFERENCES

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

2. **Chilla F., Schumacher J.,** New perspectives in turbulent Rayleigh – Bénard convection, Eur. Phys. J. E. 35 (7) (2012) 58.

3. **Castaing B., Gunaratne G., Heslot F., et al.,** Scaling of hard thermal turbulence in Rayleigh – Bénard convection, J. Fluid Mech. 204 (July) (1989) 1–30.

4. **Ahlers G., Xu X.,** Prandtl-number dependence of heat transport in turbulent Rayleigh – Bénard convection, Phys. Rev. Lett. 86 (15) (2001) 3320–3323.

5. **Shishkina O., Thess A.,** Mean temperature profiles in turbulent Rayleigh –Bénard convection of water, J. Fluid Mech. 633 (25 August) (2009) 449–460.

6. **Li Y.-R., Ouyang Y.-Q., Peng L., Wu S.-Y.,** Direct numerical simulation of Rayleigh – Bénard convection in a cylindrical container of aspect ratio 1 for moderate Prandtl number fluid, Phys. Fluids. 24 (7) (2012) 074103.

7. **Lakkaraju R., Stevens R. J. A. M., Verzicco R., et al.,** Spatial distribution of heat flux and fluctuations in turbulent Rayleigh – Bénard convection, Phys. Rev. E. 86 (5) (2012) 056315.

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

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

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

11. **Zürner T., Schindler F., Vogt T., et al.,** Combined measurement of velocity and temperature in liquid metal convection, J. Fluid Mech. 876 (10 October) (2019) 1108–1128.

12. **Abramov A. G., Ivanov N. G., Smirnov E. M.,** Numerical study of high-Ra Rayleigh – Bénard mercury and water convection in confined enclosures using a hybrid RANS/LES technique, Proc. Eurotherm Seminar 74 "Heat Transfer in Unsteady and Transitional Flows", March 23–26, 2003, Eindhoven, the Netherlands; Ed. by H. C. de Lange, A. A. van Steenhoven, TUE (2003) 33–38.

13. **Stevens R. J. A. M., Clercx H. J. H., Lohse D.,** Effect of plumes on measuring the large scale circulation in turbulent Rayleigh – Bénard convection, Phys. Fluids. 23 (9) (2011) 095110.

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

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

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

17. **Brown E., Ahlers G.,** Rotations and cessations of the large-scale circulation in turbulent Rayleigh – Bénard convection, J. Fluid Mech. 568 (10 December) (2006) 351–386.

18. **Xi H.-D., Xia K.-Q.,** Azimuthal motion, reorientation, cessation, and reversal of the large-scale circulation in turbulent thermal convection: A comparative study in aspect ratio one and one-half geometries, Phys. Rev. E. 78 (3) (2008) 036326.

19. **Ji D., Bai K., Brown E.,** Effects of tilt on the orientation dynamics of the large-scale circulation in turbulent Rayleigh – Bénard convection, Phys. Fluids. 32 (7) (2020) 075118.

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

21. **Shishkina O., Horn S.,** Thermal convection in inclined cylindrical containers J. Fluid Mech. 790 (10 March) (2016) R3.

22. **Smirnov S. I., Abramov A. G., Smirnov E. M.,** Numerical simulation of turbulent Rayleigh – Bénard mercury convection in a circular cylinder with introducing small deviations from the axisymmetric formulation, J. Phys. Conf. Ser. 1359 (1) (2019) 012077.

23. **Smirnov S. I., Smirnov E. M.,** Direct numerical simulation of the turbulent Rayleigh – Bénard convection in a slightly tilted cylindrical contain, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 13 (1) (2020) 14–25 (in Russian).

24. **Smirnov S., Smirnovsky A., Bogdanov S.,** The emergence and identification of large-scale coherent structures in free convective flows of the Rayleigh – Bénard type, Fluids. 6 (12) (2021) 431–450.

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

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

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

28. **Sakievich P. J., Peet Y. T., Adrian R. J.,** Large-scale thermal motions of turbulent Rayleigh–Bénard convection in a wide aspect-ratio cylindrical domain, Int. J. Heat Fluid Flow. 61 (2) (2016) 193–196.

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

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

31. **Smirnov S. I., Smirnov E. M., Smirnovskiy A. A.,** Endwall heat transfer effects on the turbulent mercury convection in a rotating cylinder, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 10 (1) (2017) 31–46 (in Russian).

32. **Smirnov S. I., Smirnovskiy A. A.,** Numerical simulation of turbulent mercury natural convection in a heated-from-below cylinder with zero and non-zero thickness of the horizontal walls, Teplovyye Protsessy v Tekhnike [Thermal Processes in Technology]. 10 (3–4) (2018) 94–100 (in Russian).

33. **Borisov D. V., Kalaev V. V.,** ILES of melt turbulent convection with conjugated heat transfer in the crucible and gas flow for Czochralski silicon crystal growth system, J. Cryst. Growth. 573 (3) (2021) 126305.

34. **Kenjereš S., Hanjalić K.** Transient analysis of Rayleigh – Bénard convection with a RANS model, Int. J. Heat Fluid Flow. 20 (3) (1999) 329–340.

35. **Hanjalić K., Kenjereš S.,** Reorganization of turbulence structure in magnetic Rayleigh – Bénard convection: a T-RANS study, J. Turbul. 1 (8) (2000) 1–22.

36. **Kenjereš S., Hanjalić K.,** LES, T-RANS and hybrid simulations of thermal convection at high Ra numbers, Int. J. Heat Fluid Flow. 27 (5) (2006) 800–810.

37. **Choi S.-K., Han J.-W., Choi H.-K.,** Performance of second-moment differential stress and flux models for natural convection in an enclosure, Int. Commun. Heat Mass Transf. 99 (December) (2018) 54–61.

38. **Clifford C. E., Kimber M. L.,** Assessment of RANS and LES turbulence models for natural convection in a differentially heated square cavity, Numer. Heat Transf. Part A. 78 (10) (2020) 560–594.

39. **Levchenya A. M., Trunova S. N., Kolesnik E. V.,** Assessment of RANS turbulence models capabilities based on computational results for free convection developing near a suddenly heated vertical plate, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 13 (2) (2020) 27–40 (in Russian).

40. **Katsamis C., Craft T., Iacovides H., Uribe J. C.,** Use of 2-D and 3-D unsteady RANS in the computation of wall bounded buoyant flows, Int. J. Heat Fluid Flow. 93 (February) (2022) 108914.

41. **Levchenya A. M., Smirnov E. M., Trunova S. N.,** Vliyaniye periodicheskoy makrosherokhovatosti na razvitiye turbulentnoy svobodnoy konvektsii u vnezapno nagrevayemoy vertikalnoy plastiny [The influence of periodical macroroughness on the development of free turbulent convection near a suddenly heated vertical plate], Pisma v Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki. 48 (3) (2022) 47–50 (in Russian).

42. **Orszag S. A., Yakhot V., Flannery W. S., et al.,** Renormalization group modeling and turbulence simulations, Proc. Int. Conf. Near-Wall Turbulent Flows, Tempe, Arizona, USA, 15–17 March (1993) 1031.

43. **Menter F. R.,** Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications, AIAA J. 32 (8) (1994) 1598–1605.

44. **Menter F. R., Kuntz M., Langtry R.,** Ten 2022s of industrial experience with the SST turbulence model, In Book: Turbulence, Heat and Mass Transfer. Vol. 4. Proc. Fourth Int. Symp. Turbulence, Heat & Mass Transfer. Antalya, Turkey, 12–17 October (2003) 625–632.

45. **Launder B. E., Reece G. J., Rodi W.,** Progress in the development of a Reynolds-stress turbulence closure, J. Fluid Mech. 68 (3) (1975) 537–566.

46. **Gibson M. M., Launder B. E.,** Ground effects on pressure fluctuations in the atmospheric boundary layer, J. Fluid Mech. 86 (3) (1978) 491–511.

47. **Wilcox D. C.,** Turbulence modeling for CFD. 2nd edition, DCW Industries, La Canada, California, 1998.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СМИРНОВ Сергей Игоревич – *кандидат физико-математических наук, инженер научно-образовательного центра «Компьютерные технологии в аэродинамике и теплотехнике» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sergeysmirnov92@mail.ru
ORCID: 0000-0002-3972-9259

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

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
smirnov_em@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-7218-6372

THE AUTHORS

SMIRNOV Sergei I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
sergeysmirnov92@mail.ru
ORCID: 0000-0002-3972-9259

SMIRNOV Evgeny M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
smirnov_em@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-7218-6372

Статья поступила в редакцию 01.04.2022. Одобрена после рецензирования 06.06.2022. Принята 06.06.2022.

Received 01.04.2022. Approved after reviewing 06.06.2022. Accepted 06.06.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Научная статья
УДК 532/529
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15305

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО ТЕЧЕНИЯ И ПЕРЕМЕШИВАНИЯ МЕЛКОДИСПЕРСНОЙ ГАЗОВЗВЕСИ В ЗАМКНУТОМ ОБЪЕМЕ ГИБРИДНЫМ МЕТОДОМ КРУПНЫХ ЧАСТИЦ

Е. Н. Широкова ✉

Военно-космическая академия имени А. Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Россия

✉ shirokhelen-78@mail.ru

Аннотация. Гидродинамические эффекты конвективного переноса и перемешивания диспергированных реагентов в ряде случаев определяют результативность протекания химических реакций. В работе поставлена и численно решена задача импульсного истечения и перемешивания газовзвеси в объеме, ограниченном стенками. Определена начальная концентрация дисперсной фазы, при которой происходит смена аномального дозвукового режима течения (с образованием ударно-волновой структуры) сверхзвуковым режимом (по скорости несущей газовой фазы). Установлено, что при длительном временном интервале доминируют явления развития неустойчивости и образования вихрей. Продемонстрирована разрешающая способность гибридного метода крупных частиц для данного класса задач.

Ключевые слова: газовзвесь, ударно-волновая структура, конвективный перенос, перемешивание, гибридный метод крупных частиц

Для цитирования: Широкова Е. Н. Моделирование нестационарного течения и перемешивания мелкодисперсной газовзвеси в замкнутом объеме гибридным методом крупных частиц // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 61–70. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15305

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15305

SIMULATION OF AN UNSTEADY FLOW AND MIXING OF FINE GAS SUSPENSION IN A CLOSED VOLUME BY THE HYBRID METHODOF LARGE PARTICLES

E. N. Shirokova ✉

Military Space Academy named after A. F. Mozhaysky, St. Petersburg, Russia

✉ shirokhelen-78@mail.ru

Abstract. Hydrodynamic effects of convective transport and mixing of dispersed reagents determine the efficiency of chemical reactions in some cases. The paper sets and numerically solves the problem of a pulsed outflow and mixing of gas suspension in a volume limited by walls. The initial dispersed-phase concentration at which an anomalous subsonic regime (with the shock-wave structure formation) is replaced by supersonic one (as to the velocity of the carrier gas phase) has been found. It was established that phenomena of instability development and eddying dominate for a long-time interval. The resolution of the hybrid large-particles method was demonstrated for this class of problems.

© Широкова Е. Н., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Keywords: gas suspension, shock-wave structure, convective transport, mixing, hybrid large-particle method

For citation: Shirokova E. N., Simulation of an unsteady flow and mixing of fine gas suspension in a closed volume by the hybrid method of large particles, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 61–70. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15305

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

Введение

Химические технологии основаны на комплексных взаимосвязанных гидромеханических явлениях (псевдоожижение, осаждение, перемешивание), тепломассобменных (испарение, конденсация, кристаллизация) и химических (синтез, катализ, окисление) процессах [1 – 4]. В настоящее время находят широкое применение методы математического моделирования при проектировании химических производств. В ряде технологических процессов важную роль играют эффекты волнового и конвективного переноса, а также перемешивания химических диспергированных реагентов.

Численные методы исследования гидродинамических явлений связаны с сеточным воспроизведением ударно-волновых процессов, которые адекватно решаются в рамках уравнений Эйлера. Моделирование различных видов неустойчивостей, перемешивания и развития турбулентности, в общем случае, требуют привлечения более сложных подходов, которые традиционно подразделяют на методы прямого численного моделирования DNS (Direct Numerical Simulation), крупных вихрей LES (Large Eddy Simulation) и осреднения по Рейнольдсу RANS (Reynolds-averaged Navier – Stokes) и их гибридные комбинации [5, 6].

Законы сохранения в общем виде включают конвективную, диффузионную (вязкую) части уравнений в дифференциальной или интегральной форме и правые части, зависящие от решения (источники). Разрешающая способность численного метода в значительной степени определяется уровнем численной диссипации при аппроксимации конвективных членов уравнений. Например, в работе [7] выполнен анализ точности конвективных схем второго и третьего порядков пакетов CFX и FLUENT. В обзорной статье [8] рассмотрены современные методы математического моделирования развития гидродинамических неустойчивостей и турбулентного перемешивания, где особое внимание уделено вопросам аппроксимации конвективных потоков различных численных схем.

Работоспособность и диссипативные свойства численных методов при аппроксимации потоковых слагаемых обычно определяют при решении тестовых задач в невязкой постановке, например при моделировании неустойчивостей Рэлея – Тейлора [9], Кельвина – Гельмгольца [10] и Рихтмайера – Мешкова [11]. При этом разрывы сглаживаются, а вихревые слагаемые воспроизводятся в сеточном решении в большей или меньшей степени, в зависимости от диссипативных свойств численных схем.

Моделирование двухфазных течений встречает ряд дополнительных принципиальных проблем [12]. Одна из них – жесткость задач, которые включают быстрые и медленные компоненты решения. Эта проблема, по-видимому, впервые была поставлена и решена для газодисперсных систем в работе [13]. Задачи свободных и импактных двухфазных струйных течений и цилиндрического разлета газовзвесей численно и экспериментально изучались в работах [14 – 16].

В нашем исследовании рассматривается новая постановка задачи газодинамических процессов волнового и конвективного переноса и перемешивания идеального несущего газа и твердых взвешенных частиц при их импульсном истечении в замкнутый объем.

Основные уравнения

Законы сохранения газодисперсной среды запишем в формулировке взаимопроникающих континуумов [17]:

© Shirokova E. N. 2022. Published by Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University.

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho_i\mathbf{v}_i)=0,\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_1\mathbf{v}_1)+\nabla(\rho_1\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1)+\alpha_1\nabla p=-\mathbf{F}_\mu,$$
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_2\mathbf{v}_2)+\nabla(\rho_2\mathbf{v}_2\mathbf{v}_2)+\alpha_2\nabla p=\mathbf{F}_\mu,\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho_2 e_2)+\nabla\cdot(\rho_2 e_2\mathbf{v}_2)=Q, \qquad (1)$$
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_1 E_1+\rho_2 E_2)+\nabla\cdot(\rho_1 E_1\mathbf{v}_1+\rho_2 E_2\mathbf{v}_2)+\nabla\cdot\left[p(\alpha_1\mathbf{v}_1+\alpha_2\mathbf{v}_2)\right]=0,$$
$$\rho_i=\rho_i^\circ\alpha_i,\ (i=1,\ 2),\ \alpha_1+\alpha_2=1,\ \rho=\rho_1+\rho_2,\ E_i=e_i+\mathbf{v}_i^2/2,$$

где α_i, ρ_i, $\mathbf{v}_i$, E_i, e_i, p – объемная доля, приведенная плотность [кг/м^3], вектор скорости [м/с], полная и внутренняя энергии [Дж/кг] i-ой составляющей континуума (i = 1 для газа или i = 2 для дисперсной фазы), давление газа [Па] соответственно; $\mathbf{F}_\mu$, Q – сила трения [Н/м^3] и мощность теплообмена [Вт/м^3] между газом и частицами; t, с, – время; индексом «$\circ$» помечены истинные значения плотности газа и материала частиц.

Система уравнений (1) замыкается уравнением состояния идеального, калорически совершенного газа и несжимаемых твердых частиц:

$$p=(\gamma_1-1)\rho_1^\circ e_1,\ e_1=c_v T_1\ ,e_2=c_2 T_2,\ \{\gamma_1,c_v,c_2,\rho_2^\circ\}\equiv\text{const},$$

где T_1, T_2, K, – температуры несущей фазы и частиц; γ_1, c_v – показатель адиабаты и удельная теплоемкость газа при постоянном объеме [Дж/(кг·К)]; c_2, Дж/(кг·К), – удельная теплоемкость частиц.

Межфазное трение и теплообмен $\mathbf{F}_\mu$, Q_T определяются из эмпирических зависимостей [18]:

$$\mathbf{F}_\mu=(3/8)(\alpha_2/r)C_\mu(\mathrm{Re}_{12})\rho_1(\mathbf{v}_1-\mathbf{v}_2)|\mathbf{v}_1-\mathbf{v}_2|,$$
$$C_\mu=\begin{cases}C_\mu^{(1)}=\dfrac{24}{\mathrm{Re}_{12}}+\dfrac{4,4}{\mathrm{Re}_{12}^{1/2}}+0,42,\ \alpha_2\le 0,08,\\ C_\mu^{(2)}=\dfrac{4}{3\alpha_1}\left(1,75+\dfrac{150\alpha_2}{\alpha_1\mathrm{Re}_{12}}\right),\ \alpha_2\ge 0,45,\\ \dfrac{(\alpha_2-0,08)C_\mu^{(2)}+(0,45-\alpha_2)C_\mu^{(1)}}{0,37},\ 0,08<\alpha_2<0,45,\end{cases}$$
$$Q_T=(3/2)(\alpha_2/r^2)\lambda_1\mathrm{Nu}_1(T_1-T_2),$$
$$\mathrm{Nu}_1=\begin{cases}2+0,106\mathrm{Re}_{12}\mathrm{Pr}_1^{1/3}(\mathrm{Re}_{12}\le 200),\\ 2,274+0,6\mathrm{Re}_{12}^{0,67}\mathrm{Pr}_1^{1/3}(\mathrm{Re}_{12}>200),\end{cases}$$
$$\mathrm{Re}_{12}=2r\rho_1^\circ|\mathbf{v}_1-\mathbf{v}_2|/\mu_1,\ \mathrm{Pr}_1=c_v\gamma_1\mu_1/\lambda_1,$$

где Re_{12}, Nu_1, Pr_1 – числа Рейнольдса, Нуссельта и Прандтля соответственно; C_μ, μ_1, r – коэффициент межфазного трения, динамическая вязкость [Па·с] и радиус частицы [м].

Постановка задачи и метод расчета

Рассмотрим осесимметричную задачу импульсного истечения газовзвеси из цилиндрического канала *1* длиной L = 0,1 м и радиусом R = 0,01 м в замкнутый объем *2* (рис. 1). В начальный момент времени канал заполнен неподвижной смесью воздуха повышенного давления ($p^{(1)}=10^6$ Па) и твердыми частицами диаметром d = 1 мкм, плотностью $\rho_2^\circ=2500$ кг/м^3 при термодинамическом равновесии $T_1^{(1)}=T_2^{(1)}=293$ K. Дисперсная фаза занимает объемную долю $\alpha_2^{(1)}=0,1$. Вне канала в замкнутом объеме 2 находится чистый воздух с параметрами $p^{(2)}=10^5$ Па, $T_1^{(2)}=293$ K. Граничные условия заданы в виде непротекания (равенство нулю нормальных составляющих фаз).

Для численного моделирования использован гибридный метод крупных частиц [19] с центрированной гибридной реконструкцией потоков фаз в виде [20], пригодный для решения жестких задач. Расчеты выполнены в цилиндрической системе координат на равномерной сетке с шагом $h = L / 400$ м. Шаг по времени определялся числом Куранта CFL = 0,4.

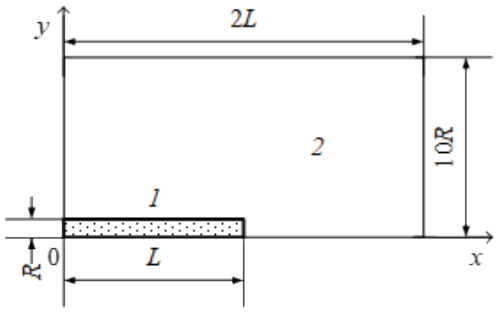


Рис. 1. Расчетная схема задачи (до оси симметрии 0x):
1 – канал длиной L и радиусом R; *2* – замкнутый объем

Результаты расчетов

Результаты расчетов удобно представить в безразмерном виде. За линейный масштаб выбрана длина канала L. Давления и плотности фаз отнесены к соответствующим начальным параметрам в канале $p^{(1)}$ и $\rho_i^{(1)}$. Скорости фаз нормированы двумя величинами: локальной скоростью звука в несущем газе $a_1 = \left(\gamma_1 p / \rho_1^{\circ}\right)^{1/2}$ или локальной эффективной скоростью смеси $a_e = \left[\gamma_e p / \left(\rho\alpha_1\right)\right]^{1/2}$. Эффективный показатель политропы двухфазной среды в формуле для a_e определен из выражения [19]:

$$\gamma_e = \left(x_1 c_v + x_2 c_2 + x_1 R_1\right) / \left(x_1 c_v + x_2 c_2\right),$$

где $x_i = \rho_i / \rho$ – массовые доли фаз; R_1, Дж/(кг·К), – газовая постоянная.

Время отсчитывалось в безразмерном виде (числах Струхаля) $\mathrm{Sh} = a_e t / L$. Например, момент времени Sh = 1 соответствует приходу равновесной волны разрежения после распада начального разрыва на дно канала.

Начальный этап истечения при Sh = 0,5 в виде распределения числе Маха $\mathrm{M} = u_2 / a_1$ по непрерывной тоновой шкале оттенков серого показан на рис. 2, *a*. Нижняя часть рисунка (рис. 2,*b*) представляет численные шлирен-изображения функции градиента относительной плотности дисперсной фазы $S\left(\rho_2 / \rho_2^{(1)}\right)$, которая рассчитывалась по методике, описанной в статье [21].

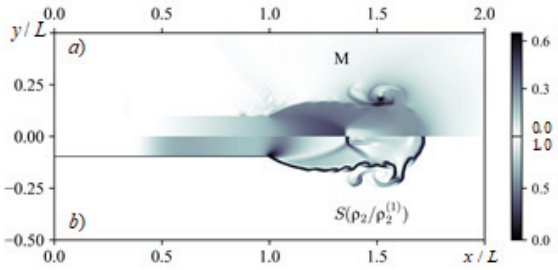


Рис. 2. Распределение чисел Маха M по непрерывной шкале оттенков серого цвета (*a*) и численные шлирен-изображения $S(\rho_2/\rho_2^{(1)})$ – функции градиента относительной плотности дисперсной фазы (*b*)
(оба графика для момента времени Sh = 0,5)

В рассматриваемый момент времени Sh = 0,5 фронт волны разрежения внутри канала достиг относительной координаты $x / L = 0{,}5$. В истекающей газовзвеси сформировалась первая «бочка» с диском Маха, расположенным в сечении $x / L \approx 1{,}3$. В головной части струи образовались первичный и вторичный кольцевые вихри. На боковой поверхности струи развивается вихревая неустойчивость Кельвина – Гельмгольца, которая визуализируется на шлирен-изображении рис. 2. Как видно из распределения числа Маха, ударно-волновая структура аномально формируется на дозвуковом по несущему газу режиме течения. Это явление ранее было обнаружено, а также подтверждено численно и экспериментально в ряде работ, например, в статье [14].

Известно, что в чистом газе скачки уплотнения образуются на сверхзвуковой скорости потока. В связи с этим представляет интерес, при каких концентрациях частиц происходит смена режима течения газовзвеси. Для этого проведена серия расчетов с принятыми выше исходными данными, но с изменением начальной концентрации дисперсной фазы: $\alpha_2^{(1)} = 0{,}01;\ 0{,}02;\ 0{,}10$. Результаты приведены на рис. 3, *a* в виде осевых распределений чисел Маха, вычисленных по локальной скорости несущего газа. Внутри канала на участке $0{,}5 < x / L < 1{,}0$ двухфазная среда ускоряется в одномерной волне разрежения. Скорости фаз в выходном сечении трубы при $x / L = 1$ для рассматриваемых концентраций частиц – дозвуковые. Их аналитические значения, вычисленные по формулам [19], нанесены на рис. 3, *a* маркерами.

За срезом канала до диска Маха $1{,}0 < x / L < 1{,}3$ происходит дальнейший разгон газовзвеси в виде недорасширенной двумерной струи. При этом для начальных концентраций частиц $\alpha_2^{(1)} < 0{,}02$ двухфазная среда ускоряется на некотором расстоянии от выходного сечения до сверхзвуковой скорости по несущему газу. Напротив, при $\alpha_2^{(1)} > 0{,}02$ течение смеси на оси симметрии всюду дозвуковое.

Причина аномалии заключается в том, что газодисперсная среда с достаточно мелкими частицами подчиняется закономерностям «тяжелого газа», с отличающимися от чистого газа уравнением состояния и эффективной скоростью звука. На рис. 3,*b* показаны распределения числа Маха, нормированного по локальной эффективной скорости звука двухфазной среды. Отметим, что в этом представлении кривые $\mathrm{Me} = u_2 / a_e$ на интервале волны разрежения до диска Маха $0{,}5 < x / L < 1{,}3$ для различных концентраций частиц практически совпадают. В критическом сечении, при $x / L = 1$, скорость потока равна местной скорости звука $\mathrm{M}_e = 1$. А за срезом канала поток газовзвеси ускоряется до сверхзвуковой скорости в масштабе a_e, до скачка уплотнения.

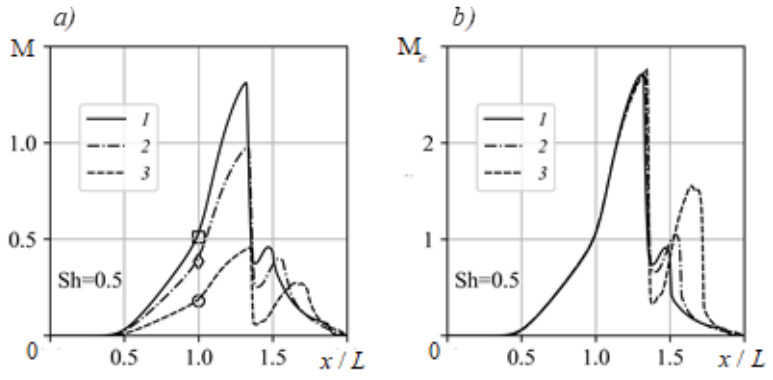


Рис. 3. Осевые распределения чисел Маха в момент времени Sh = 0,5, вычисленные по локальной скорости звука в несущей газовой фазе (*a*) и локальной эффективной скорости смеси (*b*), для начальных концентраций дисперсной фазы $\alpha_2^{(1)}$: 0,001 (*1*); 0,02 (*2*); 0,10 (*3*). Маркерами показаны аналитические значения чисел Маха в критическом сечении для указанных концентраций

Развивающаяся картина динамики газовзвеси показана в виде численных шлирен-изображений функции градиента относительной плотности дисперсной фазы $S\left(\rho_2 / \rho_2^{(1)}\right)$ на рис. 4. В момент безразмерного времени Sh = 0,72 головная часть двухфазной струи достигает стенки при $x / L = 2$. После этого начинается ее радиальное растекание (рис. 4,*a*). Бокообразная структура двухфазного потока вдоль оси симметрии сохраняется примерно до Sh ≈ 2. В дальнейшем происходит ее разрушение с преобладанием вихревого характера течения (рис. 4, *c* – *f*). Значительное заполнение замкнутого объема с перемешиванием внутри него газовзвеси происходит к моменту времени Sh ≈ 6.

За время протекания процесса объемная концентрация частиц не достигает состояния плотной упаковки. В таблице приведены максимальные значения объемной доли частиц α_{max} во всем поле течения для последовательных безразмерных моментов времени Sh.

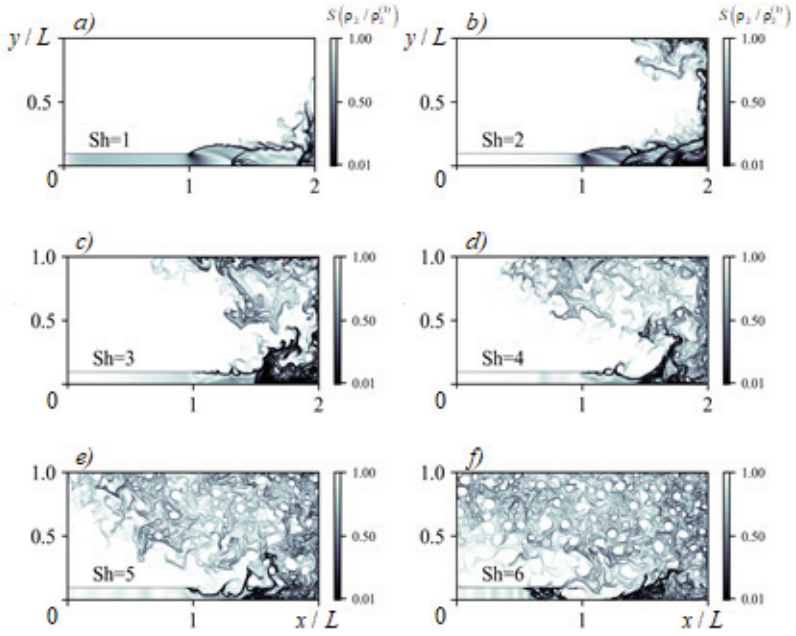


Рис. 4. Численные шлирен-изображения функции градиента относительной плотности дисперсной фазы в последовательные моменты времени (Sh = 1 – 6)

Таблица

Максимальные объемные доли частиц в безразмерные моменты времени

Sh	1	2	3	4	5	6
α_{max}	0,093	0,158	0,147	0,090	0,075	0,049

Выполнена оценка давления в дисперсной фазе p_d по более общей модели газовзвеси [14]. Величина p_d оценивалась при условии равновесия конкурирующих процессов генерации хаотического движения частиц за счет действия сил Магнуса и вихревого обтекания частиц, а также диссипации хаотического вращения, поступательного движения и при соударениях дисперсных частиц. Для достаточно мелких частиц реагента диаметром $d = 1$ мкм, рассматриваемых в нашей работе, и в диапазоне относительного движения составляющих смеси $0 < |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2| < 100$ м/с, давление в дисперсной фазе p_d на два порядка меньше газодинамического давления p в несущей фазе. Полученная оценка позволяет допустить применимость используемой бесстолкновительной модели (1).

Корректное моделирование этого этапа процесса с определением характеристик турбулентности предполагает применение моделей турбулентности DNS, LES, RANS или их комбинации. Вместе с тем, картина течения качественно воспроизводится адекватно. Кроме того, исследования явлений развития неустойчивостей в неоднородных средах показали количественное соответствие деформации и осредненной динамики границ экспериментальным данным и результатам расчетов различными методами, например, при моделировании развития неустойчивости Рихтмайера – Мешкова [22].

На сетке средней детализации гибридный метод крупных частиц в рассмотренной задаче продемонстрировал высокую разрешающую способность и малую диссипативность аппроксимации конвективной части законов сохранения.

Заключение

В рамках взаимопроникающих континуумов, гибридным методом крупных частиц численно решена задача импульсного истечения газовзвеси в объем, ограниченный твердыми стенками. Выявлены два характерных временных интервала процесса. На начальном этапе преобладающими являются волновые эффекты потока двухфазной смеси с образованием ударно-волновой структуры. В серии расчетов определена начальная концентрация дисперсной фазы, при которой происходит смена аномального дозвукового режима течения сверхзвуковым по несущей газовой фазе. Для второго временного интервала доминируют явления развития неустойчивости и образования вихрей. Продемонстрированы возможности гибридного метода крупных частиц для данного класса задач. Метод обладает малой численной вязкостью при аппроксимации конвективной части уравнений и может служить основой при построении численных схем для моделирования турбулентных течений газовзвесей. Планируется, что указанная задача будет предметом наших дальнейших исследований.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Huilin L., Gidaspow D., Bouillard J., Wentie L.** Hydrodynamic simulation of gas-solid flow in a riser using kinetic theory of granular flow // Chemical Engineering Journal. 2003. Vol. 95. No. 1–3. Pp. 1–13.

2. **Zi C., Sun J., Yang Y., Huang Z., Liao Z., Wang J., Yang Y., Han G.** CFD simulation and hydrodynamics characterization of solids oscillation behavior in a circulating fluidized bed with sweeping bend return // Chemical Engineering Journal. 2017. Vol. 307. 1 January. Pp. 604– 620.

3. **Gao X., Li T., Rogers W. A., Smith K., Gaston K., Wiggins G., Parks J. E.** Validation and application of a multiphase CFD model for hydrodynamics, temperature field and RTD simulation in a pilot-scale biomass pyrolysis vapor phase upgrading reactor // Chemical Engineering Journal. 2020. Vol. 388. 15 May. P. 124279.

4. **Løge I. A., Bentzon J. R., Klingaa C. G., Walther J. H., Anabaraonye B. U., Fosbøl P. L.** Scale attachment and detachment: The role of hydrodynamics and surface morphology // Chemical Engineering Journal. 2022. Vol. 430. Part 2. 15 February. P. 132583.

5. **Волков К. Н., Емельянов В. Н.** Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений. М.: Физматлит, 2008. 368 с.

6. **Гарбарук А. В.** Современные подходы к моделированию турбулентности. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2016. 233 с.

7. **Исаев С. А., Лысенко Д. А.** Тестирование численных методов, конвективных схем, алгоритмов аппроксимации потоков и сеточных структур на примере сверхзвукового течения в

ступенчатом канале с помощью пакетов CFX и FLUENT // Инженерно-физический журнал. 2009. Т. 82. № 2. С. 326–330.

8. **Тишкин В. Ф., Гасилов В. А., Змитренко Н. В., Кучугов П. А., Ладонкина М. Е., Повещенко Ю. А.** Современные методы математического моделирования развития гидродинамических неустойчивостей и турбулентного перемешивания // Математическое моделирование. 2020. Т. 32. № 8. С. 57–90.

9. **Shi J., Zhang Y.-T., Shu C.-W.** Resolution of high order WENO schemes for complicated flow structures // Journal of Computational Physics. 2003. Vol. 186. No. 2. Pp. 690–696.

10. **Li J., Shu C.-W., Qiu J.** Multi-resolution HWENO schemes for hyperbolic conservation laws // Journal of Computational Physics. 2021. Vol. 446. 1 December. P. 110653.

11. **Wang B., Xiang G., Hu X. Y.** An incremental-stencil WENO reconstruction for simulation of compressible two-phase flows // International Journal of Multiphase Flow. 2018. Vol. 104. July. Pp. 20–31.

12. **Садин Д. В., Голиков И. О., Давидчук В. А.** Моделирование взаимодействия ударной волны с ограниченным неоднородным слоем газовзвеси гибридным методом крупных частиц // Вычислительные методы и программирование. 2021. Т. 22. № 1. С. 1–13.

13. **Садин Д. В.** Модифицированный метод крупных частиц для расчета нестационарных течений газа в пористой среде // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1996. Т. 36. № 10. С. 158–164.

14. **Садин Д. В., Любарский С. Д., Гравченко Ю. А.** Особенности недорасширенной импульсной импактной газодисперсной струи с высокой концентрацией частиц // Журнал технической физики. 2017. Т. 87. № 1. С. 22–26.

15. **Садин Д. В.** Моделирование импульсного истечения смеси воздуха и мелкодисперсного порошка, частично заполняющего выбросной канал // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22. № 1. С. 187–192.

16. **Широкова Е. Н.** Численное исследование разлета смеси газа и частиц с осевой симметрией // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2021. Т. 21. № 4. С. 606–612.

17. **Нигматулин Р. И.** Динамика многофазных сред. Ч. 1. М.: Наука, 1987. 464 с.

18. **Ивандаев А. И., Кутушев А. Г., Рудаков Д. А.** Численное исследование метания слоя порошка сжатым газом // Физика горения и взрыва. 1995. № 4. С. 63–70.

19. **Садин Д. В.** TVD-схема для жестких задач волновой динамики гетерогенных сред негиперболического неконсервативного типа // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2016. Т. 56. № 12. С. 2098–2109.

20. **Садин Д. В.** Модификация метода крупных частиц до схемы второго порядка точности по пространству и времени для ударно-волновых течений газовзвеси // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Сер. Математическое моделирование и программирование. 2019. Т. 12. № 2. С. 112–122.

21. **Quirk J. J., Karni S.** On the dynamics of a shock-bubble interaction // Journal of the Fluid Mechanics. 1996. Vol. 318. 10 July. Pp. 129–163.

22. **Wang M., Si T., Luo X.** Experimental study on the interaction of planar shock wave with polygonal helium cylinders // Shock Waves. 2015. Vol. 25. No. 4. Pp. 347–355.

REFERENCES

1. **Huilin L., Gidaspow D., Bouillard J., Wentie L.,** Hydrodynamic simulation of gas-solid flow in a riser using kinetic theory of granular flow, Chem. Eng. J. 95 (1–3) (2003) 1–13.

2. **Zi C., Sun J., Yang Y., et al.,** CFD simulation and hydrodynamics characterization of solids oscillation behavior in a circulating fluidized bed with sweeping bend return, Chem. Eng. J. 307 (1 January) (2017) 604–620.

3. **Gao X., Li T., Rogers W. A., et al.,** Validation and application of a multiphase CFD model for hydrodynamics, temperature field and RTD simulation in a pilot-scale biomass pyrolysis vapor phase upgrading reactor, Chem. Eng. J. 388 (15 May) (2020) 124279.

4. **Løge I. A., Bentzon J. R., Klingaa C. G., et al.,** Scale attachment and detachment: The role of hydrodynamics and surface morphology, Chem. Eng. J. 430, P. 2 (15 February) (2022) 132583.

5. **Volkov K. N., Emelyanov V. N.,** Modelirovaniye krupnykh vikhrey v raschetakh turbulentnykh

techeniy [Large-eddy simulation of turbulent flows], Publishing House of Phys. & Math. Literature, Moscow, 2008 (in Russian).

6. **Garbaruk A. V.,** Sovremennyye podkhody k modelirovaniyu turbulentnosti [Modern approaches to turbulence simulation], Publishing House of Polytechnical Univ., St. Petersburg, 2016 (in Russian).

7. **Isaev S. A., Lysenko D. A.,** Testing of numerical methods, convective schemes, algorithms for approximation of flows, and grid structures by the example of a supersonic flow in a step-shaped channel with the use of the CFX and fluent packages, J. Eng. Phys. Thermophys. 82 (2) (2009) 321–326.

8. **Tishkin V. F., Gasilov V. A., Zmitrenko N. V., et al.,** Modern methods of mathematical modeling of the development of hydrodynamic instabilities and turbulent mixing, Matem. Mod. 32 (8) (2020) 57–90 (in Russian).

9. **Shi J., Zhang Y.-T., Shu C.-W.,** Resolution of high order WENO schemes for complicated flow structures, J. Comput. Phys. 186 (2) (2003) 690–696.

10. **Li J., Shu C.-W., Qiu J.,** Multi-resolution HWENO schemes for hyperbolic conservation laws, J. Comput. Phys. 446 (1 December) (2021) 110653.

11. **Wang B., Xiang G., Hu X. Y.,** An incremental-stencil WENO reconstruction for simulation of compressible two-phase flows, Int. J. Multiphase Flow. 104 (July) (2018) 20–31.

12. **Sadin D. V., Golikov I. O., Davidchuk V. A.,** Simulation of a shock wave interaction with a bounded inhomogeneous gas-particle layer using the hybrid large-particle method, Numerical Methods and Programming. 22 (1) (2021) 1–13 (in Russian).

13. **Sadin D. V.,** A modified large-particle method for calculating unsteady gas flows in a porous medium, Comput. Math. Math. Phys. 36 (10) (1996) 1453–1458.

14. **Sadin D. V., Lyubarskii S. D., Gravchenko Y. A.,** Features of an underexpanded pulsed impact gas-dispersed jet with a high particle concentration, Technical Physics. 62 (1) (2017) 18–23.

15. **Sadin D. V.,** Simulation of the pulsed outflow of air and fine powder mixture, partially filling the discharge channel, Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics. 22 (1) (2022) 187–192 (in Russian).

16. **Shirokova E. N.,** A numerical study of the expansion of a gas-particles mixture with axial symmetry, Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics. 21 (4) (2021) 606–612 (in Russian).

17. **Nigmatulin R. I.,** Dynamics of multiphase media, In 2 Vols. Hemisphere Publ. Corp., New York, USA, 1990.

18. **Ivandaev A. I., Kutushev A. G., Rudakov D. A.,** Numerical investigation of throwing a powder layer by a compressed gas, Combustion, Explosion and Shock Waves. 31 (4) (1995) 459–465.

19. **Sadin D. V.,** TVD scheme for stiff problems of wave dynamics of heterogeneous media of nonhyperbolic nonconservative type, Comput. Math. Math. Phys. 56 (12) (2016) 2068–2078.

20. **Sadin D. V.,** A modification of the large-particle method to a scheme having the second order of accuracy in space and time for shockwave flows in a gas suspension, Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software (Bulletin SUSU MMCS). 12 (2) (2019) 112–122 (in Russian).

21. **Quirk J. J., Karni S.,** On the dynamics of a shock-bubble interaction, J. Fluid Mech. 318 (10 July) (1996) 129–163.

22. **Wang M., Si T., Luo X.**, Experimental study on the interaction of planar shock wave with polygonal helium cylinders, Shock Waves. 25 (4) (2015) 347–355.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ШИРОКОВА Елена Николаевна – *кандидат химических наук, преподаватель Военно-космической академии имени А. Ф. Можайского, Санкт-Петербург, Россия.*
197198, Россия, Санкт-Петербург, Ждановская ул., 13
shirokhelen-78@mail.ru
ORCID: 0000-0002-8188-2003

THE AUTHOR

SHIROKOVA Elena N.
Military Space Academy named after A. F. Mozhaysky
13 Zhdanovskaya St., St. Petersburg, 197198, Russia
shirokhelen-78@mail.ru
ORCID: 0000-0002-8188-2003

Статья поступила в редакцию 17.04.2022. Одобрена после рецензирования 17.05.2022. Принята 17.05.2022.
Received 17.04.2022. Approved after reviewing 17.05.2022. Accepted 17.05.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Научная статья
УДК 539.3
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15306

ВЛИЯНИЕ ВЫБОРА ЛОВУШЕЧНОЙ МОДЕЛИ НА АДЕКВАТНОСТЬ ОПИСАНИЯ ДИФФУЗИИ ВОДОРОДА В МЕТАЛЛЫ ИЗ ВНЕШНЕЙ СРЕДЫ

П. М. Григорьева ✉

Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

✉ gpm@ipme.ru

Аннотация. В работе рассматривается явление диффузии водорода в металлы из внешней среды. Для того чтобы наиболее корректно описать возникновение стабильного во времени пограничного слоя (наблюдается экспериментально), обладающего концентрацией водорода, в десятки раз превышающей его концентрацию внутри тела, модифицируется ранее полученное уравнение диффузии водорода. В это уравнение, учитывающее из первых принципов взаимовлияние между напряженно-деформированным состоянием твердого тела и процессом транспорта газового компонента, вводится стоковый член, который описывает диффузию по ловушечным модам. Указанная модификация выполняется двумя способами: с помощью классической модели МакНабба и с использованием тензора поврежденности. Для обоих подходов решается краевая задача, результаты решения сравниваются с опубликованными экспериментальными данными.

Ключевые слова: диффузия водорода, ловушечная модель, твердое тело, пограничный слой, напряженно-деформированное состояние

Финансирование: исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 18-19-00160 «Разработка фундаментальных основ для расчетно-экспериментальной водородной диагностики деградации свойств конструкционных материалов в агрессивных коррозионных средах».

Для цитирования: Григорьева П. М. Влияние выбора ловушечной модели на адекватность описания диффузии водорода в металлы из внешней среды // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С71–82. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15306

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15306

THE INFLUENCE OF THE TRAPPING MODEL CHOICE ON THE ADEQUATE DESCRIPTION OF HYDROGEN DIFFUSION INTO METALS FROM EXTERNAL ENVIRONMENT

P. M. Grigoreva ✉

Institute for Problems of Mechanical Engineering RAS, St. Petersburg, Russia

✉ gpm@ipme.ru

Abstract. The paper considers the hydrogen diffusion into metals from their external environment. In order to properly describe a time-stable boundary layer (experimentally observed)

© Григорьева П. М., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

with a hydrogen concentration being tens of times higher than that inside the body, the previously obtained hydrogen diffusion equation has been modified. This equation obtained from the first principles and taking into account the influence of the stress-strain state of solid on the transport process of the gas component, was supplemented with a stock term describing the diffusion with trapping modes. This modification was carried out in two ways: using the classical McNabb model and using the tensor of damageability. The boundary-value problem was solved for both approaches. The solution results were compared with published experimental data.

Keywords: hydrogen diffusion, trap model, solid, boundary layer, stress-strain state

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (grant No. 18-19-00160). The grant is entitled "Development of fundamental principles for computational and experimental hydrogen diagnostics of the properties of structural materials in aggressive corrosive environments".

For citation: Grigoreva P. M., The influence of the trapping model choice on the adequate description of hydrogen diffusion into metals from external environment, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) ...–... . DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15306

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

Введение

Влияние эффекта водородной деградации на прочностные свойства металлов остается одной из наиболее актуальных проблем механики уже более ста лет [1]. Известно, что металлы могут поглощать водород из внешней среды, снижая собственную вязкость разрушения и прочность [2], что особенно критично в нынешней индустрии, где предъявляются повышенные требования к прочности сталей. Экспериментальные оценки и измерения профиля концентрации водорода в металлах [3 – 6] показывают, что концентрация водорода в пограничном слое в десятки и даже сотни раз превышает таковую во всем объеме металла. Недавние экспериментальные работы [7 – 9] позволяют говорить о наиболее сильном влиянии этого тонкого слоя (его толщина составляет около одного микрометра) на упругие свойства, хрупкость и вязкость металла. Таким образом, моделирование тонкого приграничного слоя, возникающего в результате диффузии водорода из окружающей среды в металл, и описание взаимного влияния между процессом диффузии и механическими свойствами металла представляет значительный теоретический и практический интерес.

В научной литературе нет установившегося мнения, как учитывать влияние механических напряжений на диффузию. Одна из первых моделей, которая широко используется до сих пор, основана на интуитивной оценке экспериментальных данных [10]. В дальнейшем широкое распространение получили модели, основанные на термодинамике необратимых процессов и представляющие собой обобщение уравнений типа Фурье, согласно которым необратимые процессы можно описывать линейными дифференциальными уравнениями с постоянными коэффициентами. В рамках этого подхода скорость диффузии пропорциональна термодинамическим силам, которые могут быть выражены через градиенты соответствующих потенциалов, зависящих, в частности, от напряженно-деформированного состояния (см., например, статьи [11 – 13]). Эти дополнительные термодинамические силы обычно связаны с изменением объема или жесткости твердого материала или с изменением концентрации газа. В ряде работ термодинамическую силу, учитывающую влияние напряжений, записывают через химические потенциалы материалов, используя в качестве химического потенциала деформируемого твердого тела тензор Эшелби [14 – 17]. Однако такие модели применяют редко, ввиду некоторых сложностей, связанных с определением модельных констант. Кроме того, эксперименты показывают, что водород не только диффундирует через кристаллическое вещество металла, но и перераспределяется в ловушечных модах [4, 18 – 20].

© Grigoreva P. M., 2022. Published by Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University.

Следовательно, диффузию водорода в металлах не следует считать обычной диффузией по границам зерен. Многие работы, посвященные диффузии водорода в металлах, рассматривают протекание этой диффузии по ловушечному механизму (см. основополагающие работы [21, 22] и многие другие, например [17, 23 – 26]). Такие модели специфичны и неадекватно описывают весь комплекс разнообразных экспериментальных данных. Это приводит к тому, что коэффициенты диффузии водорода в справочниках указываются с точностью до порядка величины (см., например, справочник [27]). Следует также отметить, что большинство моделей ловушек и объемной диффузии были верифицированы для малых градиентов концентрации водорода в материале. Это не позволяет учитывать наблюдаемый пограничный слой и требует существенной модификации этих моделей.

Для более точного описания экспериментально наблюдаемого приповерхностного слоя с высокой концентрацией водорода, который относительно стабилен во времени и не расширяется в глубь металла вследствие диффузии, в настоящей работе вводится стоковый член в уравнение транспорта водорода внутрь металла, находящегося в напряженно-деформированном состоянии (уравнение было получено ранее в ряде работ, см., например, книгу [28] и ссылки в ней).

В данной работе рассмотрены две возможности введения стокового члена. Первая – это классическая модель МакНабба [21]. Вторая возможность – это альтернативная модель двухканальной диффузии, которая отдельно учитывает поток через неоднородности внутри металла.

Диффузия водорода по ловушечным модам с учетом влияния напряженно-деформированного состояния металла

В предыдущих наших работах (см., например, книгу [28] и ссылки в ней) были исследованы возможности применения подхода линейной неравновесной термодинамики. На основе предположения о зависимости химического потенциала диффундирующего газа от тензора энергии-импульса Эшелби было получено модифицированное уравнение диффузии, которое учитывало зависимость процесса транспорта газа внутрь твердого тела от его напряженно-деформированного состояния. Указанное уравнение было записано для случая идеального газа и линейно-упругого тела следующим образом:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_{eff} \nabla c + \mathbf{V} c \right), \tag{1}$$

При этом эффективный коэффициент диффузии D_{eff} определялся как

$$D_{eff} = D_0 \left(1 + \frac{cM}{RT\rho} \frac{E}{1-2\nu} \left[-\alpha \mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon} + 3\alpha^2 c \right] \right). \tag{2}$$

Предлагаемое дополнительное слагаемое вида $\mathbf{V}c$ выражает тормозящую силу, пропорциональную концентрации, причем коэффициент пропорциональности следует выражению

$$\mathbf{V} = \frac{D_0 ME}{RT\rho} \left(\frac{\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon} \nabla(\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}) - \frac{1}{1-2\nu} \alpha c \nabla(\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}) + \frac{1}{2(1+\nu)} \nabla(\boldsymbol{\varepsilon} \cdot\cdot \boldsymbol{\varepsilon}) \right). \tag{3}$$

В формулах (2) и (3) используются следующие обозначения: c – концентрация диффузионно-подвижного водорода; T – температура; R – универсальная газовая постоянная; M, ρ – молярная масса и плотность твердого тела; D_0 – коэффициент диффузии, зависящий от температуры; E, ν – модуль Юнга и коэффициент Пуассона твердого тела; $\boldsymbol{\varepsilon}$ – тензор линейно-упругих деформаций, $\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}$ – сумма его главных значений.

Кроме того, в этой записи уравнения диффузии учитывается, что диффундирующий газ индуцирует внутренние деформации $\boldsymbol{\varepsilon}_{diff}$, пропорциональные концентрации и имеющие изотропный характер: $\boldsymbol{\varepsilon}_{diff} = \alpha c \mathbf{E}$ ($\mathbf{E}$ – единичный тензор).

Очевидно, что в случае линейной теории последнее слагаемое выражений (2) и (3) может быть отброшено за порядком малости, ввиду рассмотрения тензора линейных деформаций, однако и в этом случае уравнение диффузии будет иметь неклассический вид, и,

кроме того, содержать в себе дополнительные слагаемые, помимо широко используемых моделей диффузии, учитывающие напряженно-деформированное состояние с помощью градиента давления (в случае предложенной модели это сомножитель $\nabla(\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon})$).

Полученное уравнение диффузии при решении конкретных краевых задач действительно дает высокие градиенты концентрации газа внутри твердого тела и замедляет выравнивание профиля его концентрации по мере насыщения рассматриваемого образца газовым компонентом. Эти результаты говорят о том, что предложенное уравнение диффузии можно использовать для описания процессов транспорта водорода внутрь металла из внешней среды. Однако никакие внутренние напряжения в рамках этого подхода не способны вызвать почти стократную разницу концентраций газа на границе и в объеме твердого тела, что говорит о необходимости учета дополнительного канала диффузии.

Как упоминалось выше, многие исследователи процессов, связанных с водородной деградацией металлов, считают диффузию водорода в металле диффузией, проходящей по ловушечным модам. Эти моды могут иметь различную природу и зависеть как от механических, так и термодинамических характеристик системы металл-водород. Классические модели учета диффузии по ловушечным модам – это модель перераспределения водорода МакНабба [21] или ее упрощенный вариант, исключающий зависимость скорости перераспределения от времени, предложенный Р. А. Ориани [22].

В нашей работе модель МакНабба будет использоваться наряду с модифицированным уравнением диффузии (1) для более точного описания наблюдаемого экспериментально приповерхностного слоя с высокой концентрацией водорода, который будет относительно стабилен во времени и не будет размываться в глубь металла со временем. Несмотря на то, что эта ловушечная модель наиболее часто используется для решения проблем, связанных с диффузией водорода, ее еще ни разу не применяли для решения краевых задач, т.е. решения, которое бы учитывало влияние напряженно-деформированного состояния металла на процесс диффузии из первых принципов.

Считается, что процессы диффузии в объеме и диффузии по ловушечным модам протекают независимо друг от друга. Следовательно, мы можем разложить полную концентрацию водорода на сумму из двух концентраций:

$$c = c_{vd} + c_{trap}, \tag{4}$$

где c_{vd} – концентрация водорода, продиффундировавшего вследствие объемной диффузии; c_{trap} – концентрация водорода, диффундирующего по ловушкам.

Для того чтобы рассчитать концентрацию водорода в ловушках, вводятся две дополнительные величины: θ_{trap} – степень заполненности ловушек и N_{trap} – плотность распределения ловушек.

Соответственно, концентрация водорода в ловушках в таком случае будет выражаться как

$$c_{trap} = \theta_{trap} N_{trap}. \tag{5}$$

Плотность распределения ловушек N_{trap} считается известной (из эксперимента или дополнительных определяющих соотношений). Чтобы ориентироваться на данные, опубликованные в литературе, в этой работе предположим, что величина N_{trap} не зависит от времени.

Для нахождения степени заполненности ловушек, введем дополнительное определяющее соотношение, которое оперирует еще двумя дополнительными величинами, аналогично тому, как это сделано для c_{trap} в формуле (5): θ_{vd} – степень заполненности межзеренных промежутков; N_{vd} – плотность распределения межзеренных промежутков, в которые может продиффундировать диффузионно-подвижный водород.

Согласно сведениям, представленным в статье [21], определяющее соотношение для θ_{trap} имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \theta_{trap}}{\partial t} = p\theta_{vd}\left(1-\theta_{trap}\right) - k\theta_{trap}, \tag{6}$$

где p, k – параметры материала (металла), определяемые экспериментально.

Для учета зависимостей процесса диффузии и величины концентрации c_{vd} от напряженно-деформированного состояния твердого тела используем уравнение (1). В выражениях (2) и (3) возьмем слагаемые только первого порядка малости. Тогда система уравнений для нахождения профиля концентрации газового компонента в твердом теле, учитывающая диффузию по ловушечным модам, выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c_{vd}}{\partial t} + N_{trap}\dfrac{\partial \theta_{trap}}{\partial t} = \nabla\cdot\left(D_{eff}\nabla c_{vd} + \mathbf{V}c_{vd}\right), \\ \dfrac{\partial \theta_{vd}}{\partial t} = p\theta_{vd}\left(1-\theta_{trap}\right) - k\theta_{trap}, \\ D_{eff} = D_0\left(1 - \dfrac{cM}{RT\rho}\dfrac{E}{1-2\nu}\alpha\,\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}\right), \\ \mathbf{V} = \dfrac{D_0 ME}{RT\rho}\left(\dfrac{\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon} - \dfrac{1}{1-2\nu}\alpha c\right)\nabla(\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}), \\ c = c_{vd} + N_{trap}\theta_{trap}, \\ \nabla\cdot\left[\dfrac{\nu}{1-2\nu}\left(\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon} - 3\alpha c\right)\mathbf{E} + \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \alpha c\mathbf{E}\right)\right] = 0. \end{cases} \tag{7}$$

Последнее уравнение системы (7) – это уравнение упругости, которое учитывает деформации, индуцированные продиффундировавшим водородом.

В опубликованных литературных источниках (см., например, статьи [29 – 31]) считается, что ловушечные моды связаны с неоднородностями внутри металла (нанопоры, дислокации, микротрещины и т. п.), в которых накапливается диффундирующий водород. Недавние экспериментальные работы [32, 33] представляют результаты исследования поврежденности металлов и, таким образом, могут служить источником сведений о поврежденности и ее распределении по объему металла. В частности, в работе [33], где расширена идея скалярной величины поврежденности, предложен тензор поврежденности **D**, который определен как

$$\left(\mathbf{E}-\mathbf{D}\right)\cdot\mathbf{n}\delta S = \bar{\mathbf{n}}\left(\delta S - \delta S_T\right), \tag{8}$$

где δS – площадь некоторой элементарной площадки; δS_T – площадь повреждений на этой площадке; $\mathbf{n}$ – нормаль, задающая исследуемый поток; $\bar{\mathbf{n}}$ – нормаль к этой элементарной площадке.

Поскольку диффузия по ловушечным модам фактически является дополнительным потоком через повреждения твердого тела (микротрещины, поры, дислокации и т. п.), в качестве альтернативы подходу МакНабба можно предложить рассмотрение многоканальной диффузии, полагая, что в дополнение к обычному диффузионному потоку в системе имеет место поток водорода через повреждения металла; при этом газовый компонент оседает на этих повреждениях. Поскольку диффузионный поток газа $\mathbf{j}$ выражается как

$$\mathbf{j} = \rho\mathbf{V}S,$$

где $\mathbf{V}$ – вектор скорости потока диффундирующего газа; ρ – плотность газа; S – площадь площадки, через которую течет этот поток, то получим, что дополнительный поток по ловушечным модам $\mathbf{j}_{trap}$ равен

$$\mathbf{j}_{trap} = \mathbf{D}\cdot\mathbf{j}, \tag{9}$$

и, таким образом, уравнение диффузии в этом случае принимает вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla\cdot\Big[\big(\mathbf{E}-\mathbf{D}\big)\cdot\big(D_{eff}\nabla c + \mathbf{V}c\big)\Big]. \tag{10}$$

Здесь фактически аналогом стокового члена является слагаемое

$$-\nabla\cdot\Big[\mathbf{D}\cdot\big(D_{eff}\nabla c + \mathbf{V}c\big)\Big]. \tag{11}$$

Система уравнений для нахождения профиля концентрации газового компонента в твердом теле, учитывающая диффузию по ловушечным модам, выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c}{\partial t} = \nabla\cdot\Big[\big(\mathbf{E}-\mathbf{D}\big)\cdot\big(D_{eff}\nabla c + \mathbf{V}c\big)\Big], \\ D_{eff} = D_0\left(1-\dfrac{cM}{RT\rho}\dfrac{E}{1-2\nu}\alpha\,\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}\right), \\ \mathbf{V} = \dfrac{D_0 ME}{RT\rho}\left(\dfrac{\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon} - \dfrac{1}{1-2\nu}\alpha c\right)\nabla(\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}), \\ \nabla\cdot\left[\dfrac{\nu}{1-2\nu}\big(\mathrm{tr}\boldsymbol{\varepsilon}-3\alpha c\big)\mathbf{E} + \big(\boldsymbol{\varepsilon}-\alpha c\mathbf{E}\big)\right] = 0. \end{cases} \tag{12}$$

Поскольку основная часть экспериментов проводится на цилиндрических образцах, растягивающие напряжения на которые приложены вдоль их осей симметрии, для верификации модели рассмотрим в качестве краевой задачи цилиндр, подвергающийся одноосному растяжению (рис. 1). Полагаем, что длина цилиндра вдоль оси z превышает его радиус r_{out} значительным образом, а водород проникает только с боковой поверхности. Поэтому деформации, возникающие в цилиндре, и концентрация водорода внутри него зависят только от координаты r, в силу симметрии.

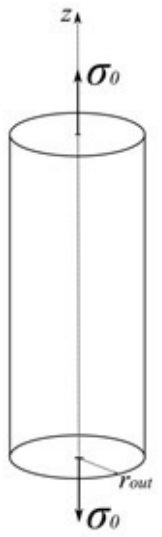


Рис. 1. Схема к постановке краевой задачи: цилиндрический образец радиусом r_{out} подвергается действию аксиальных растягивающих напряжений σ_0 и газового потока с боковой поверхности

Граничные условия для нахождения напряженно-деформированного состояния задаются растягивающими одноосными напряжениями σ_0 и свободной от напряжений боковой поверхностью, а для задачи диффузии – концентрацией газового компонента, заданной на боковой поверхности.

Следует отметить, что в уравнении упругости присутствуют слагаемые, зависящие от концентрации, а в уравнении диффузии – коэффициенты, зависящие от деформаций (как в r-, так и в z- направлениях). Таким образом, мы имеем связанную задачу, и эти два уравнения не могут быть решены по отдельности. Краевая задача (как задача упругости, так и уравнение диффузии) решается численно с использованием явной конечно-разностной схемы, которая соот-

ветствует методу конечных объемов. Для того чтобы более детально исследовать поверхностные эффекты, нами была построена сетка со сгущением к поверхности образца (т. е. при координате r, близкой к r_{out}). В схеме вместо дифференциальных уравнений локальных балансов мы рассматривали дискретные варианты соответствующих интегральных уравнений баланса. В узлах сетки задавали смещения и концентрацию, в ячейках сетки – деформации, напряжения и коэффициенты диффузии. Сама схема верифицирована и исследована на сходимость на примере задачи одномерной диффузии в цилиндрической системе координат с постоянным коэффициентом диффузии, в отсутствие напряженно-деформированного состояния.

Экспериментальные данные для расчетов взяты из работы [34] для стали Т24. Параметр α, соответствующий расширению за счет диффузии водорода, выбран так, чтобы все деформации твердого тела оставались в диапазоне линейно-упругой области. Выбранные параметры представлены в таблице. Распределение ловушек и вакансий для диффузионно-подвижного водорода и параметры p и k для модели МакНабба взяты из работ [35, 36]; значения поврежденности, зависящей от координаты и необходимой для вычисления радиальной компоненты тензора, взяты из работы [32].

Таблица

Параметры моделируемого твердого тела и газового компонента

Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение параметра
Коэффициент диффузии	D_0	мм/с^2	$3{,}5\cdot10^{-9}$
Температура	T	К	293
Модуль Юнга	E	ГПа	182
Коэффициент Пуассона	ν	–	0,295
Отношение плотности стали к ее молярной массе	ρ/М	моль/м^3	$1{,}45\cdot10^4$
Внешний радиус цилиндра	r_{out}	мм	1,1
Коэффициент линейного расширения	α	–	0,03

На рис. 2 представлены решения задачи диффузии с учетом диффузии водорода по ловушечным модам. Профиль концентрации, полученный с учетом модели МакНабба (рис. 2, *a*), практически не продвигается в глубь металла со временем, демонстрируя тот самый запирающий эффект и образование приповерхностного слоя, который наблюдался экспериментально. Стоит отметить, однако, что этот результат был получен с использованием феноменологической зависимости N_{trap} от координаты [35], которая была построена исходя из предположений о сильно неравномерном распределении водорода по образцу в результате его транспорта из внешней среды. Варьирование параметра N_{vd} не приводит к существенному изменению профилей концентрации и перераспределению водорода в ходе диффузии.

Учет же диффузии водорода по ловушкам с помощью тензора поврежденности (рис. 2, *b*) приводит к тому, что явный запирающий эффект не создается и со временем градиент концентрации имеет тенденцию к сглаживанию, а сам водород – к продвижению в глубь металлического образца. Видимо, полученный результат связан с независимостью компонент тензора поврежденности от времени и, как следствие, учесть степень заполненности этих ловушек, а также перераспределение водорода из них в межзеренные промежутки (и наоборот) оказывается невозможным. Однако и этот подход остается привлекательным для дальнейших исследований, поскольку значения компонент тензора поврежденности и их зависимость от координаты можно вычислять независимым способом.

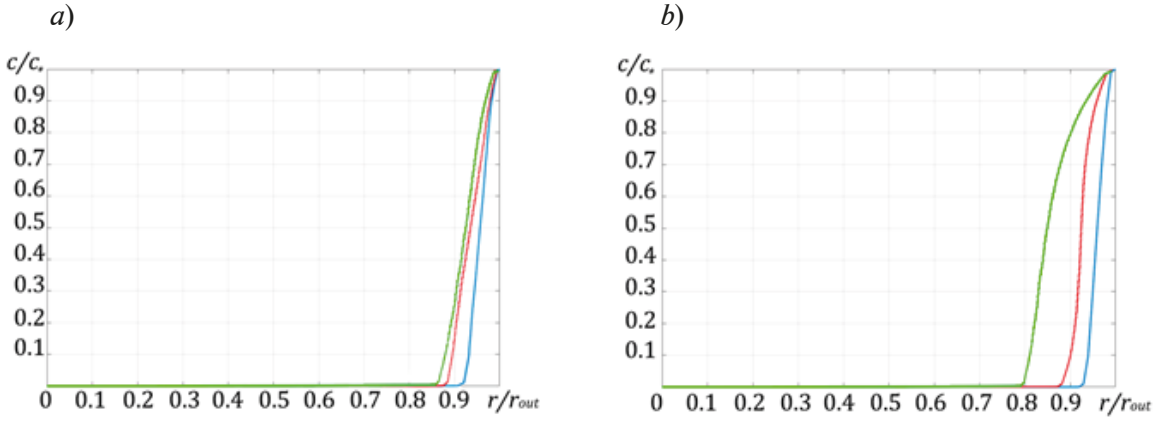


Рис. 2. Зависимости нормализованной концентрации водорода в твердом теле от нормализованного радиуса в различные моменты времени (с шагом 600 мин); расчетные данные получены с использованием ловушечной модели МакНабба, при условии неравномерного распределения ловушек N_{trap} (*a*), и модифицированной модели, где поток по ловушечным модам учтен с помощью тензора поврежденности (*b*)

Заключение

В работе теоретически исследована диффузия водорода в твердое тело, находящееся в напряженно-деформированном состоянии, и взаимовлияние между деформациями внутри тела и транспортом водорода из внешней среды, окружающей твердое тело. Для более точного описания экспериментально наблюдаемого приповерхностного слоя с высокой концентрацией водорода, который относительно стабилен во времени и не расширяется в глубь металла вследствие диффузии, предложена модификация ранее используемой модели. В полученное тогда уравнение диффузии, учитывающее влияние напряженно-деформированного состояния на диффузионный процесс, был введен стоковый член, отражающий поток водорода через ловушечные моды, в качестве второго канала диффузии. Эта модификация была проведена двумя способами: с помощью классической модели МакНабба и в рамках концепции поврежденности.

Для модифицированного уравнения диффузии с новым стоковым членом была решена краевая задача, проанализированы результаты и проведено их сравнение. Было установлено, что результаты различаются незначительно, но при использовании модели МакНабба продвижение диффузионного фронта и «размазывание» приповерхностного водородного слоя происходит медленнее, что больше соответствует экспериментальным данным.

Следует отметить, что использование концепции поврежденности позволяет избежать некоторых физических противоречий, которые неизбежно возникают в рамках модели МакНабба. При учете потока водорода по ловушечным модам в рамках концепции поврежденности, эти противоречия снимаются. Но ввиду того, что эта модель не может учитывать заполненность ловушек и не включает механизма перераспределения водорода внутри твердого тела (из ловушечных мод в межзеренные промежутки и наоборот), расчетные результаты менее точно соотносятся с экспериментальными данными. Следовательно, модификация модели не достаточна и нуждается в дальнейшем расширении.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Cailletet M. L.** First report of H embrittlement of metals // Comptes Rendus Chemie. 1864. Vol. 58. No. 23. Pp. 327–328.

2. **Хрусталев Ю. А., Симаков Ю. С., Глазунов М. П., Губин В. В.** Образование водорода при сухом трении металлов // Журнал физической химии. 1989. Т. 63. № 5. С. 1355–1357.

3. **Frolova K., Vilchevskaya E., Polyanskiy V., Alekseeva E.** Modelling of a hydrogen saturated layer within the micropolar approach // New Achievements in Continuum Mechanics and Thermodynamics. Edited by Abali B., et al. Book Series: Advanced Structured Materials. Vol. 108. Springer, Cham, 2019. Pp. 117–128.

4. **Lypez-Suárez A., Valencia C. E., López-Patico J., Vargas M. C., Fuentes B. E.** Improvement of titanium hydrogenation by low energy ion irradiation // International Journal of Hydrogen Energy. 2015. Vol. 40. No. 11. Pp. 4194–4199.

5. **Wu T.-I., Wu J.-Ch.** Effects of cathodic charging and subsequent solution treating parameters on the hydrogen redistribution and surface hardening of Ti–6Al–4V alloy // Journal of Alloys and Compounds. 2008. Vol. 466. No. 1–2. Pp. 153–159.

6. **Martinsson Å., Sandström R.** Hydrogen depth profile in phosphorus-doped, oxygen-free copper after cathodic charging // Journal of Materials Science. 2012. Vol. 47. No. 19. Pp. 6768–6776.

7. **Arseniev D. G., Belyaev A. K., Polyanskiy A. M., Polyanskiy V. A., Yakovlev Yu. A.** Benchmark study of measurements of hydrogen diffusion in metals // Dynamical Processes in Generalized Continua and Structures. Ed. by Altenbach H., et al. Book Series "Advanced Structured Materials" Switzerland: Springer, Cham, 2019. Pp. 37–61.

8. **Polyanskiy V. A., Belyaev A. K., Alekseeva E. L., Polyanskiy A. M., Tretyakov D. A., Yakovlev Yu. A.** Phenomenon of skin effect in metals due to hydrogen absorption // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2019. Vol. 31. No. 6. Pp. 1961–1975.

9. **Andronov D. Y., Arseniev D. G., Polyanskiy A. M., Polyanskiy V. A., Yakovlev Y. A.** Application of multichannel diffusion model to analysis of hydrogen measurements in solid // International Journal of Hydrogen Energy. 2017. Vol. 42. No. 1. Pp. 699–710.

10. **Sutardja P., Oldham W. G.** Modeling of stress effects in silicon oxidation // IEEE Transactions on Electron Devices. 1989. Vol. 36. No. 11. Pp. 2415–2421.

11. **Birnbaum H. K., Sofronis P.** Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture // Materials Science and Engineering A. 1994. Vol. 176. No. 1–2. Pp. 191–202.

12. **Stashchuk M., Dorosh M.** Analytical evaluation of hydrogen induced stress in metal // International Journal of Hydrogen Energy. 2017. Vol. 42. No. 9. Pp. 6394–6400.

13. **Drexler A, Bergmann C., Manke G., Kokotin V., Mraczek K., Pohl M., Ecker W.** On the local evaluation of the hydrogen susceptibility of cold-formed and heat treated advanced high strength steel (AHSS) sheets // Materials Science & Engineering. A. 2021. Vol. 800. 7 January. P. 140276.

14. **Larcht'e F. C., Cahn J. L.** The effect of self-stress on diffusion in solids // Acta Metallurgica. 1982. Vol. 30. No. 10. Pp. 1835–1845.

15. **Wu Ch. H.** The role of Eshelby stress in composition-generated and stress-assisted diffusion // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2001. Vol. 49. No. 8. Pp. 1771–1794.

16. **Knyazeva A. G.** Cross effects in solid media with diffusion // Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 2003. Vol. 44. No. 3. Pp. 373–384.

17. **Toribio J., Kharin V., Lorenzo M., Vergara D.** Role of drawing-induced residual stresses and strains in the hydrogen embrittlement susceptibility of prestressing steels // Corrosion Science. 2011. Vol. 53. Vol. 10. Pp. 3346–3355.

18. **Hadam U., Zakroczymski T.** Absorption of hydrogen in tensile strained iron and high-carbon steel studied by electrochemical permeation and desorption techniques // International Journal of Hydrogen Energy. 2009. Vol. 34. No. 5. Pp. 2449–2459.

19. **Turnbull A.** Perspectives on hydrogen uptake, diffusion and trapping // International Journal of Hydrogen Energy. 2015. Vol. 40. No. 47. Pp. 16961–16970.

20. **Liu Q., Venezuela J., Zhang M., Zhou Q., Atrens A.** Hydrogen trapping in some advanced high strength steels // Corrosion Science. 2016. Vol. 111. October. Pp. 770–785.

21. **McNabb A., Foster P. K.** A new analysis of diffusion of hydrogen in iron and ferritic steels // Transactions of the Metallurgical Society of AIME. 1963. Vol. 227. No. 3. Pp. 618–627.

22. **Oriani R. A.** The diffusion and trapping of hydrogen in steel // Acta Metallurgica. 1970. Vol. 18. No. 1. Pp. 147–157.

23. **Oudriss A., Creus J., Bouhattate J., Conforto E., Berziou C., Savall C., Feaugas X.** Grain size and grain-boundary effects on diffusion and trapping of hydrogen in pure nickel // Acta Materialia. 2012. Vol. 60. No. 19. Pp. 6814–6828.

24. **Takahashi J., Kawakami K., Kobayashi Y.** Origin of hydrogen trapping site in vanadium carbide

precipitation strengthening steel // Acta Materialia. 2018. Vol. 153. July. Pp. 193–204.

25. **Depover T., Van den Eeckhout E., Verbeken K.** Hydrogen induced mechanical degradation in tungsten alloyed steels // Materials Characterization. 2018. Vol. 136. February. Pp. 84–93.

26. **Zhang Zh., Moore K. L., McMahon G., Morana R., Preuss M.** On the role of precipitates in hydrogen trapping and hydrogen embrittlement of a nickel-based superalloy // Corrosion Science. 2019. Vol. 146. January. Pp. 58–69.

27. Физические величины. Справочник. Ред. И. С. Григорьев, Е. З. Мейлихов. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

28. **Grigoreva P. M., Vilchevskaya E. N., Polyanskiy V. A.** Influence of linear elastic stresses on hydrogen diffusion into metals // Advances in Hydrogen Embrittlement Study. Ed. by V. A. Polyanskiy and A. K. Belyaev. Switzerland: Springer, Cham, 2021. Pp. 143–157.

29. **Hu J., Liu J., Lozano-Perez S., Grovenor C. R. M., Christensen M., Wolf W., Wimmer E., Mader E. V.** Hydrogen pickup during oxidation in aqueous environments: The role of nano-pores and nano-pipes in zirconium oxide films // Acta Materialia. 2019. Vol. 180. November. Pp. 105–115.

30. **Pressouyre G. M., Bernstein I. M.** An example of the effect of hydrogen trapping on hydrogen embrittlement // Metallurgical Transactions A. 1981. Vol. 12. No. 5. Pp. 835–844.

31. **Chen L., Xiong X., Tao X., Su Y., Qiao L.** Effect of dislocation cell walls on hydrogen adsorption, hydrogen trapping and hydrogen embrittlement resistance. // Corrosion Science. 2020. Vol. 166. 15 April. P. 108428.

32. **Семенов А. С., Полянский В. А., Штукин Л. В., Третьяков Д. А.** Влияние поврежденности поверхностного слоя на акустическую анизотропию // Прикладная механика и техническая физика. 2018. Т. 59. № 6. С. 201–210.

33. **Беляев А. К., Полянский В. А., Третьяков Д. А.** Оценка механических напряжений, пластических деформаций и поврежденности посредством акустической анизотропии // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. 2020. № 4. С. 130–151.

34. **Rhode M., Mente T., Steppan E., Steger J., Kannengiesser T.** Hydrogen trapping in T24 Cr-Mo-V steel weld joints – microstructure effect vs. experimental influence on activation energy for diffusion // Welding in the World. 2018. Vol. 62. No. 2. Pp. 277–287.

35. **Taha A., Sofronis P.** A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement // Engineering Fracture Mechanics. 2001. Vol. 68. No. 6. Pp. 803–837.

36. **Sofronis P., Lufrano J.** Interaction of local elastoplasticity with hydrogen: embrittlement effects // Materials Science & Engineering. A. 1999. Vol. 260. No. 1–2. Pp. 41–47.

REFERENCES

1. **Cailletet M. L.,** First report of H embrittlement of metals, Compt. Rend. 58 (23) (1864) 327–328.

2. **Khrustalev Yu. A., Simakov Yu. S., Glazunov M. P., Gubin V. V.,** Obrazovaniye vodoroda pri sukhom trenii metallov [Hydrogen formation at dry friction of the metals] Zhurnal Fizicheskoy Khimii [Russian Journal of Physical Chemistry] 63 (5) (1989) 1355–1357 (in Russian).

3. **Frolova K., Vilchevskaya E., Polyanskiy V., Alekseeva E.,** Modelling of a hydrogen saturated layer within the micropolar approach, In Book: "New Achievements in Continuum Mechanics and Thermodynamics", Edited by Abali B., et al., Book Series: Advanced Structured Materials. Vol. 108. Springer, Cham (2019) 117–128.

4. **Lypez-Suárez A., Valencia C. E., Lypez-Patico J., et al.,** Improvement of titanium hydrogenation by low energy ion irradiation, Int. J. Hydrog. Energy. 40 (11) (2015) 4194–4199.

5. **Wu T.-I., Wu J.-Ch.,** Effects of cathodic charging and subsequent solution treating parameters on the hydrogen redistribution and surface hardening of Ti–6Al–4V alloy, J. Alloys Compd. 466 (1–2) (2008) 153–159.

6. **Martinsson Å., Sandström R.,** Hydrogen depth profile in phosphorus-doped, oxygen-free copper after cathodic charging, J. Mater. Sci. 47 (19) (2012) 6768–6776.

7. **Arseniev D. G., Belyaev A. K., Polyanskiy A. M., et al.,** Benchmark study of measurements of hydrogen diffusion in metals, In book: "Dynamical Processes in Generalized Continua and Structures", Ed. by Altenbach H., et al., Book Ser. "Advanced Structured Materials" Springer Cham, Switzerland (2019) 37–61.

8. **Polyanskiy V. A., Belyaev A. K., Alekseeva E. L., et al.,** Phenomenon of skin effect in metals due to hydrogen absorption, Contin. Mech. Thermodyn. 31 (6) (2019) 1961–1975.

9. **Andronov D. Y., Arseniev D. G., Polyanskiy A. M., et al.,** Application of multichannel diffusion model to analysis of hydrogen measurements in solid, Int. J. Hydrog. Energy. 42 (1) (2017) 699–710.

10. **Sutardja P., Oldham W. G.,** Modeling of stress effects in silicon oxidation, IEEE Trans. Electron Devices. 36 (11) (1989) 2415–2421.

11. **Birnbaum H. K., Sofronis P.,** Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture, Mater. Sci. Eng. A. 176 (1–2) (1994) 191–202.

12. **Stashchuk M., Dorosh M.,** Analytical evaluation of hydrogen induced stress in metal, Int. J. Hydrog. Energy. 42 (9) (2017) 6394–6400.

13. **Drexler A., Bergmann C., Manke G., et al.,** On the local evaluation of the hydrogen susceptibility of cold-formed and heat treated advanced high strength steel (AHSS) sheets, Mater. Sci. Eng. A. 800 (7 January) (2021) 140276.

14. **Larcht'e F. C., Cahn J. L.,** The effect of self-stress on diffusion in solids, Acta Metallurg. 30 (10) (1982) 1835–1845.

15. **Wu Ch. H.,** The role of Eshelby stress in composition-generated and stress-assisted diffusion, J. Mech. Phys. Solids. 49 (8) (2001) 1771–1794.

16. **Knyazeva A. G.,** Cross effects in solid media with diffusion, J. Appl. Mech. Techn. Phys. 44 (3) (2003) 373–384.

17. **Toribio J., Kharin V., Lorenzo M., Vergara D.,** Role of drawing-induced residual stresses and strains in the hydrogen embrittlement susceptibility of prestressing steels, Corr. Sci. 53 (10) (2011) 3346–3355.

18. **Hadam U., Zakroczymski T.,** Absorption of hydrogen in tensile strained iron and high-carbon steel studied by electrochemical permeation and desorption techniques, Int. J. Hydrog. Energy. 34 (5) (2009) 2449–2459.

19. **Turnbull A.** Perspectives on hydrogen uptake, diffusion and trapping, Int. J. Hydrog. Energy. 40 (47) (2015) 16961–16970.

20. **Liu Q., Venezuela J., Zhang M., et al.,** Hydrogen trapping in some advanced high strength steels, Corr. Sci. 111 (October) (2016) 770–785.

21. **McNabb A., Foster P. K.,** A new analysis of diffusion of hydrogen in iron and ferritic steels, Trans. Metallurg. Soc. AIME. 227 (3) (1963) 618–627.

22. **Oriani R. A.,** The diffusion and trapping of hydrogen in steel, Acta Metallurg. 18 (1) (1970) 147–157.

23. **Oudriss A., Creus J., Bouhattate J., et al.,** Grain size and grain-boundary effects on diffusion and trapping of hydrogen in pure nickel, Acta Mater. 60 (19) (2012) 6814–6828.

24. **Takahashi J., Kawakami K., Kobayashi Y.,** Origin of hydrogen trapping site in vanadium carbide precipitation strengthening steel, Acta Mater. 153 (July) (2018) 193–204.

25. **Depover T., Van den Eeckhout E., Verbeken K.,** Hydrogen induced mechanical degradation in tungsten alloyed steels, Mater. Charact. 136 (February) (2018) 84–93.

26. **Zhang Zh., Moore K. L., McMahon G., et al.,** On the role of precipitates in hydrogen trapping and hydrogen embrittlement of a nickel-based superalloy, Corr. Sci. 146 (January) (2019) 58–69.

27. Handbook of physical quantities, 1st edition, Ed. by Grigoriev I. S., Meilikhov E. Z., CRC Press, Florida, USA, 1997.

28. **Grigoreva P. M., Vilchevskaya E. N., Polyanskiy V. A.,** Influence of linear elastic stresses on hydrogen diffusion into metals, In book: Advances in Hydrogen Embrittlement Study., Ed. by V. A. Polyanskiy and A. K. Belyaev. Springer, Cham, Switzerland (2021) 143–157.

29. **Hu J., Liu J., Lozano-Perez S., et al.,** Hydrogen pickup during oxidation in aqueous environments: The role of nano-pores and nano-pipes in zirconium oxide films, Acta Mater. 180 (November) (2019) 105–115.

30. **Pressouyre G. M., Bernstein I. M.,** An example of the effect of hydrogen trapping on hydrogen embrittlement, Metallurg. Trans. A. 12 (5) (1981) 835–844.

31. **Chen L., Xiong X., Tao X., et al.,** Effect of dislocation cell walls on hydrogen adsorption, hydrogen trapping and hydrogen embrittlement resistance, Corr. Sci. 166 (15 April) (2020) 108428.

32. **Semenov A. S., Polyanskiy V. A., Shtukin L. V., Tretyakov D. A.,** Effect of surface layer damage on acoustic anisotropy, J. Appl. Mech. Tech. Phys. 59 (6) (2018) 1136–1134.

33. **Belyayev A. K., Polyanskiy V. A., Tretyakov D. A.,** Estimating of mechanical stresses, plastic

deformations and damage by means of acoustic anisotropy, PNRPU Mechanics Bulletin. (4) (2020) 130–151 (in Russian).

34. **Rhode M., Mente T., Steppan E., et al.,** Hydrogen trapping in T24 Cr-Mo-V steel weld joints – microstructure effect vs. experimental influence on activation energy for diffusion, Weld. World. 62 (2) (2018) 277–287.

35. **Taha A., Sofronis P.,** A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement, Eng. Fract. Mech. 68 (6) (2001) 803–837.

36. **Sofronis P., Lufrano J.,** Interaction of local elastoplasticity with hydrogen: embrittlement effects, Mater. Sci. Eng. A. 260 (1–2) (1999) 41–47.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ГРИГОРЬЕВА Полина Михайловна – *стажер-исследователь Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*

199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В.О., 61.

gpm@ipme.ru

ORCID: 0000-0001-9846-7888

THE AUTHOR

GRIGOREVA Polina M.

Institute for Problems of Mechanical Engineering RAS

61 Bolshoi Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia

gpm@ipme.ru

ORCID: 0000-0001-9846-7888

Статья поступила в редакцию 01.04.2022. Одобрена после рецензирования 24.05.2022. Принята 24.05.2022.

Received 01.04.2022. Approved after reviewing 24.05.2022. Accepted 24.05.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Научная статья
УДК 519.6
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15307

ВОССТАНОВЛЕНИЕ МОДЕЛИ ТЕПЛОВОГО ПРОЦЕССА ПО ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЯМ ТЕМПЕРАТУРЫ

Н. Ю. Быков [1, 2] ✉

[1] Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

[2] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

✉ nbykov2006@yandex.ru

Аннотация. Метод генеративного дизайна модели (ГДМ) применен для восстановления структуры и коэффициентов дифференциального уравнения в частных производных, описывающего процесс нагрева и испарения мишени лазерным излучением. Исходные синтетические данные включают сценарии нагрева, соответствующие поверхностному или объемному поглощению энергии. Показано, что в случае объемного поглощения для корректного восстановления модели требуется применение процедуры препроцессинга, предусматривающей исключение части исходных данных. Предложена модификация метода, позволяющая учитывать зависимость коэффициентов восстанавливаемого уравнения от температуры. Обсуждается влияние различных статистических критериев, применяемых при селекции оптимального подмножества элементов, на точность восстановления структуры уравнения. Эффективность применения метода ГДМ продемонстрирована для широкого диапазона параметров нагрева мишени и разных вариантов задания энергоподвода. Показана возможность генерации модели по зашумленным данным.

Ключевые слова: метод генеративного дизайна, управляемая данными модель, уравнение теплопроводности, лазерный нагрев

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 21-11-00296, https://rscf.ru/project/21-11-00296/).

Для цитирования: Быков Н. Ю. Восстановление модели теплового процесса по пространственно-временным распределениям температуры // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 83–99. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15307

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

© Быков Н. Ю., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15307

RECONSTRUCTING THE THERMAL PROCESS MODEL USING THE TIME-SPACE DISTRIBUTIONS OF TEMPERATURE

N. Yu. Bykov [1, 2] ✉

[1] ITMO University, St. Petersburg, Russia

[2] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ nbykov2006@yandex.ru

Abstract. The method of generative model design (GMD) has been applied to reconstruct the structure and coefficients of a partial differential equation describing the target's heating and its evaporation by laser radiation. The initial synthetic data includes heating scenarios corresponding to surface energy absorption or to volume one. It was shown that reconstructing the model correctly required the use of a preprocessing technique providing the exclusion of a part of the initial data if the volume absorption took place. A modification of the method that made it possible to take into account the temperature dependence of the coefficients of the reconstructed equation was put forward. The influence of various statistical criteria used in selecting the optimal subset of elements on the accuracy of reconstructing the equation structure was discussed. The efficiency of the GMD was demonstrated for a wide range of target heating parameters and different options for setting the energy input. The possibility of model generating by noisy data was shown.

Keywords: method of generative model design, data-driven model, heat transfer equation, laser heating and evaporation

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 21-11-00296).

For citation: Bykov N. Yu., Reconstructing the thermal process model using the time-space distributions of temperature, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 83–99. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15307

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 модели, управляемые данными, широко используются для предсказания параметров процессов, протекающих в обществе, экономике и природе, с целью осуществления последующего контроля над ними [1, 2]. К таким моделям предъявляется ряд требований, среди которых основными являются точность прогнозов и интерпретируемость самой модели. В случае, если объект характеризуется количественными предикторами, то модель представляет собой, как правило, линейную или нелинейную регрессионную зависимость [3]. Альтернативными выступают модели в виде обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) или дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП), восстановленные по имеющимся данным. Предполагается, что модели в виде ДУ, сгенерированные по данным, будут характеризоваться как хорошей интерпретируемостью, так и точностью соответствующих прогнозов [2].

Применение методов восстановления модели процесса в виде ДУЧП по имеющимся данным актуально для исследования процессов тепломассопереноса. Для существенной части тепловых процессов вид соответствующего ДУ хорошо известен и в простейшем случае представляет собой «классическое» уравнение теплопроводности. Однако, в общем случае, уравнение может включать вторую производную от температуры по времени [4, 5], а для движущейся среды – соответствующее конвективное слагаемое. При наличии энерговыделения внутри объекта, в уравнении появляется также дополнительное слагаемое (слагаемые), определяющее мощность внутренних источников теплоты [5].

© Bykov N. Yu., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Разработка инструмента отбора значимых членов уравнения из большого массива «строительных блоков» сделает возможной индикацию процессов, протекающих во внутреннем объеме объекта и тем самым недоступных для визуализации в ходе эксперимента. Примерами таких процессов могут служить фазовые переходы и химические реакции. Возможность восстановления конвективного слагаемого с соответствующим весом в уравнении энергии позволит сделать выводы о наличии конвективных процессов в исследуемом объекте. При этом можно получить данные о качественном изменении теплового процесса (например, о переходе от режима преобладающей теплопроводности к режиму развитой конвекции при нестационарном нагреве жидкости [6]).

Решение задачи о восстановлении структуры ДУЧП и определения коэффициентов уравнения применительно к тепловым процессам может быть выполнено с использованием предложенного в статье [7] метода генеративного дизайна модели (ГДМ). Метод предполагает реализацию нескольких этапов.

I. Определение наиболее полной возможной структуры восстанавливаемого уравнения.

II. Дискретизация элементов ДУЧП.

III. Вычисление значений элементов векторов дискретизированных шаблонов по имеющимся данным о пространственно-временных распределениях температуры.

IV. Применение статистических методов для определения оптимальной структуры и коэффициентов ДУЧП.

Несмотря на наличие непосредственно «идеи» метода, без ответа остается ряд вопросов.

Во-первых, результативность метода, очевидно, зависит от качества исходных данных. Помимо указанных выше этапов реализации алгоритма ГДМ, необходимо рассмотреть этап препроцессинга имеющихся синтетических или экспериментальных данных. На указанном этапе следует проанализировать качество таких данных и принять решение об их полном или частичном использовании.

Во-вторых, в литературе подробно не рассматривался алгоритм построения дискретизированных шаблонов для случая температурозависимых параметров модели.

В-третьих, на этапе выбора оптимальной структуры уравнения возможно использование различных статистических критериев (критерий Мэллоу, информационные критерии и пр.). Необходим анализ адекватности выбора статистического критерия при определении оптимальной структуры модели.

В-четвертых, одним из самых важных можно считать открытый вопрос о возможности применения алгоритма ГДМ к зашумленным данным.

Конечно, в целом необходимо лучшее понимание возможностей метода ГДМ и наработка практических навыков его использования.

Настоящая работа посвящена развитию метода ГДМ, предложенного в статье [7]. Результаты работы направлены на дальнейшее расширение сферы применения метода, в том числе на получение ответов на поставленные выше вопросы.

Генерация исходных синтетических данных

Для более полной демонстрации возможностей метода ГДМ, в исходные данные для восстановления модели теплового процесса, представленные в данной статье, включена информация о пространственно-временной эволюции температуры в материале, учитывающая как наличие либо отсутствие физических процессов, сопровождающих нагрев, так и температурную зависимость теплофизических параметров среды.

Одним из удобных объектов исследования служит процесс нагрева металлической мишени лазерным излучением. Во-первых, данный процесс зависит от параметров излучения и может сопровождаться фазовыми переходами (плавление материала и испарение его поверхности), во-вторых, диапазон изменения температуры материала очень широк и требует учета температурной зависимости параметров среды. В-третьих, данные могут быть получены синтетически, путем численного моделирования [8 – 10].

В настоящей работе в качестве примера рассматривается нагрев ниобиевой мишени импульсами лазерного излучения умеренной интенсивности. Данный нестационарный процесс может считаться одномерным для случая, когда глубина прогрева мишени существенно меньше диаметра лазерного пятна.

Данные о пространственно-временном распределении температуры $T(x,t)$ в мишени для последующего применения метода ГДМ генерируются путем численного решения уравнения теплопроводности [5, 9, 10] вида

$$c\rho\left(\frac{\partial T}{\partial t}-\omega\frac{\partial T}{\partial x}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\lambda\frac{\partial T}{\partial x}+q_V, \tag{1}$$

где x, м, – пространственная координата; t, с, – время; ρ, кг/м^3, c, Дж/(кг·К), $\lambda(T)$, Вт/(м·К), – плотность, теплоемкость и коэффициент теплопроводности материала соответственно; q_v, Вт/м^3, – объемный источник тепла; ω, м/с, – скорость движения испаряющейся поверхности.

Скорость ω зависит от температуры поверхности T_S ($T_S \equiv T$ ($x = 0$)) и есть функция только времени: $\omega = \omega(t)$. Уравнение (1) записано в движущейся системе координат x, с началом координат, соответствующим поверхности мишени. Для температур поверхности, существенно меньших T_b (T_b = 5033 К – температура кипения ниобия при нормальном давлении p_b [11]), испарения поверхности не происходит и скорость движения поверхности $\omega = 0$. При температурах, превышающих T_b или около нее, наблюдается испарение поверхности. Скорость ω становится отличной от нуля. Коэффициент $\omega \neq 0$ может служить индикатором наличия процесса испарения. Плавление ниобия в рассматриваемой постановке не учитывается (температура плавления ниобия T_L = 2750 К [11]).

Граничное условие на поверхности задается в виде

$$-\lambda\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0}=q_S-L\rho\omega, \tag{2}$$

где q_s, Вт/м^2, – поток энергии лазерного излучения через поверхность мишени; L, Дж/кг, – скрытая теплота испарения.

На удаленной границе $T(\infty, t) = T_0$, начальная температура соответствует $T(x, 0) = T_0$ (T_0 = 300 К).

В данной работе рассматриваются два варианта поглощения лазерной энергии:

(*i*) задание потока энергии лазерного излучения через поверхность мишени в единицу времени (поверхностный поток) согласно выражению

$$q_S=(1-R_f)W_0, \tag{3}$$

где W_0, Вт/м^2, – плотность потока излучения, падающего на поверхность мишени; R_f – коэффициент отражения поверхности материала; при этом объемное поглощение отсутствует ($q_v = 0$);

(*ii*) считается, что объемное поглощение $q_V \neq 0$, $q_s = 0$.

В последнем случае подвод тепла на расстоянии x от поверхности определяется выражением

$$q_V(x,t)=\alpha_a I(x,t), \tag{4}$$

$$I(x,t)=I_0(t)\exp(-\alpha_a x), \tag{5}$$

где $I(x,t)$, Вт/м^2, – интенсивность излучения в материале на расстоянии x от поверхности; $I_0(t)$, Вт/м^2, – плотность потока излучения, проникающего в материал, $I_0(t) = (1 - R_f)W_0$; α_a, м$^{-1}$, – коэффициент поглощения.

Уравнение (5) выражает закон поглощения Бугера – Ламберта – Бэра.

Предполагается, что во время импульса мощность излучения не меняется, т. е.

$$W_0=\text{const},\ t\le t_0;\ W_0=0,\ t>t_0. \tag{6}$$

Необходимые значения оптических параметров взяты из книг [12, 13]: $\alpha_a = 5\cdot10^7$ м$^{-1}$ (для длины волны лазерного излучения порядка 1 мкм), R_f = 0,77. Длительность лазерного импульса t_0 = 0,1 мкс.

Генерируемые данные соответствуют двум температурным диапазонам:

I. температура мишени существенно ниже температуры кипения T_b (и температуры плавления T_L);

II. температура поверхности выше T_b.

Для I температурного диапазона экспериментальные данные [14] по теплопроводности ниобия в интервале $300 < T < 2200$ K аппроксимируются полиномом третьей степени:

$$\lambda = \lambda_0 + 6{,}687 \cdot 10^{-3} T + 6{,}652 \cdot 10^{-6} T^2 - 2{,}256 \cdot 10^{-9} T^3, \qquad (7)$$

где $\lambda_0 = 51{,}49$ Вт/(м·K).

В представленной постановке плотность и теплоемкость ниобия считаются постоянными и составляют $\rho = 8570$ кг/м^3, $c_0 = 263$ Дж/(кг·K).

Для II диапазона температурные зависимости параметров жидкого ниобия вблизи его точки плавления в литературе существенно разнятся [14]. В этом случае мы считаем коэффициент теплопроводности и теплоемкость постоянными во всем интервале температур. При этом теплофизические параметры соответствуют параметрам жидкого ниобия [11, 14]:

$$\rho_L = 7580 \text{ кг/м}^3,\ c_{0L} = 449{,}9 \text{ Дж/(кг·K)},\ \lambda_{0L} = 65 \text{ Вт/(м·K)}.$$

Скорость движения поверхности соответствует закону Герца и предположению о том, что 18 % испаренных атомов рассеиваются в результате столкновений в газовой фазе обратно на поверхность [15]. Плотность насыщенного пара следует закону Клапейрона – Клаузиуса [15, 8]:

$$\omega(t) = 0{,}82 \frac{p_b}{\rho} \left(\frac{m}{2\pi k_\text{B} T_S} \right)^{1/2} \exp\left[\frac{Lm}{k_\text{B}} \left(\frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_S} \right) \right], \qquad (8)$$

где k_B, Дж/K, – постоянная Больцмана; m, кг, – масса атома.

Для численного решения уравнения (1) использована схема Кранка – Николсона метода конечных разностей, обеспечивающая второй порядок аппроксимации как по пространственной координате, так и по времени [5].

Теплопроводность в точке между узлами сетки j и j+1 определяли по средней температуре в узлах:

$$\lambda_{j+1/2} = \lambda\left((T_{j+1} + T_j)/2 \right).$$

Для каждого последующего временного шага (n + 1) значения коэффициента теплопроводности, в случае учета ее температурной зависимости, подбирались в ходе итерационного процесса.

Схема расчета задачи с объемным поглощением предполагает наличие объема, в котором происходит поглощение, вокруг каждого узла сетки. Для рассматриваемого одномерного случая границы объема для узла j с координатой x_j определяются как

$$x_j - \Delta x/2 \le x < x_j + \Delta x/2.$$

С учетом закона Бугера – Ламберта – Бэра (см. равенство (5)), плотность мощности теплового источника в объеме выражается как

$$q_V(x_j, t) = \frac{I_0(t)}{\Delta x} \left\{ \exp[-\alpha_a (x_j - \Delta x/2)] - \exp[-\alpha_a (x_j + \Delta x/2)] \right\}. \qquad (9)$$

При $\Delta x \to 0$ выражение (9) соответствует выражениям (4), (5). С учетом конечного значения шага Δx, в основном численном алгоритме реализовано выражение (9). Первый узел внутри тела для постановки задачи с объемным поглощением имеет координату $x_0 = \Delta x/2$ (поверхность мишени соответствует значению координаты $x = 0$). Помимо объемного поглощения, необходим учет граничного условия в виде (2) при $q_s = 0$. Для реализации данного граничного условия в схему включен фиктивный граничный узел с координатой $x_{-1} = -\Delta x/2$.

Поглощение энергии лазерного излучения в данном узле отсутствует,

$$T(x_{-1}, t) = T(x_0, t) = T_S(t).$$

Полное время наблюдения за процессом прогрева мишени – 2 мкс.

С целью верификации численного алгоритма, предназначенного для получения данных методом ГДМ, в данной работе выполнено сравнение с имеющимися в монографии [16] аналитическими решениями, полученными при отсутствии процесса испарения поверхности ($\omega = 0$) как для случая объемного поглощения (см. выражение (4)), так и для задания потока энергии через поверхность в виде формулы (3).

Данные, полученные путем численного решения уравнения теплопроводности (1), хорошо согласуются с аналитическими решениями (рис. 1 и 2). Для варианта объемного поглощения энергии излучения, использование уравнения (9) и описанного алгоритма существенно повышает точность расчетов, по сравнению с результатами при использовании выражений (4) и (5) для большого пространственного шага (см. рис. 1). Если же задавать наличие поверхностного потока (рис. 2), то решение аналогично случаю объемного поглощения. Решения различаются только в непосредственной приповерхностной области мишени.

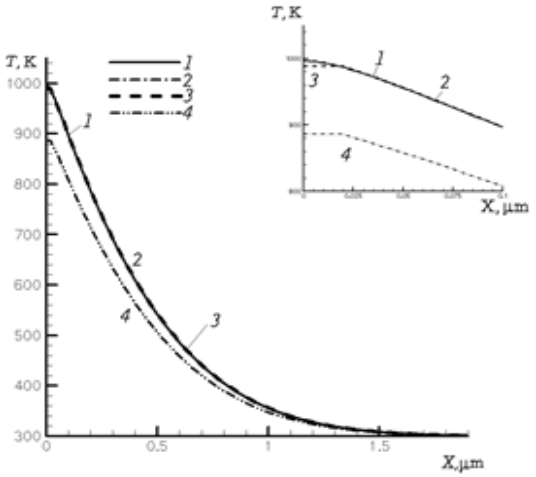


Рис. 1. Распределения температуры T по глубине мишени X в момент времени $t = 10$ нс, при задании объемного поглощения лазерного излучения (вариант расчета 6). На вставке – начальная область X.

Аналитическое решение [16] (кривая *1*) сопоставлено с результатами разных расчетных вариантов: с учетом выражения (9), с шагами 2 нм (кривая *2*) и 40 нм (кривая *3*); с учетом выражений (4), (5) и с шагом 40 нм (кривая *4*)

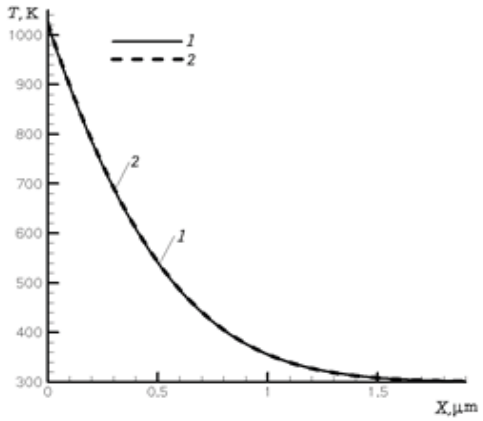


Рис. 2. Распределения температуры T по глубине мишени X в момент времени $t = 10$ нс, при задании потока лазерного излучения через поверхность (вариант расчета 1).

Аналитическое решение [16] (кривая *1*) сопоставлено с расчетным результатом (кривая *2*)

Варианты, соответствующие сгенерированным данным, приведены в табл. 1, а примеры данных о распределениях температуры – на рис. 3.

Для второго температурного диапазона результаты расчетов соответствуют варианту 11 (см. табл. 1 и рис. 3,*b*). Для интенсивности излучения лазера 1,2 ТВт/м^2 и длительности импульса 100 нс температура поверхности к моменту завершения лазерного импульса превышает температуру кипения и наблюдается процесс поверхностного испарения. К концу временного интервала излучения скорость движения фронта испарения составляет примерно 0,3 м/с.

Таблица 1

Расчетные варианты для генерации исходных данных

Вариант	Подвод энергии	Временной срез, мкс	λ	Δx,нм	N_d
1	$q_V = 0$	0,01	λ_0	2,0	973
2		1,00	λ_0		11333
3		0,01	(7)		998
4		1,00	(7)		11704
5		2,00	(7)		15962
6	$q_s = 0$	0,01	λ_0		775
7		1,00	λ_0		11333
8		0,01	(7)		801
9		1,00	(7)		11704
10		1,00	(7)	100	228
Вариант 11: $q_V = 0$, временной срез составляет 0,0975 мкс, $I_0(t)$ = 1,2 ТВт/м^2, $c = c_{0L}$, $\lambda = \lambda_{0L}$, Δx = 2 нм, N_d = 3355					

Примечание. Для вариантов 1 – 10 $I_0(t)$ = 0,3 ТВт/м^2, $c = c_0$.

Обозначения: q_V – объемное поглощение лазерного излучения; q_s – поток энергии через поверхность мишени; $I_0(t)$ – плотность потока излучения, проникающего в материал; c – теплоемкость, c_0 = 263 Дж/(кг·К), c_{0L} = 449,9 Дж/(кг·К); λ – коэффициент теплопроводности, λ_0 = 51,49 Вт/(м·К), λ_{0L} = 65 Вт/(м·К), (7) – номер формулы полинома; N_d – число степеней свободы.

a) *b*)

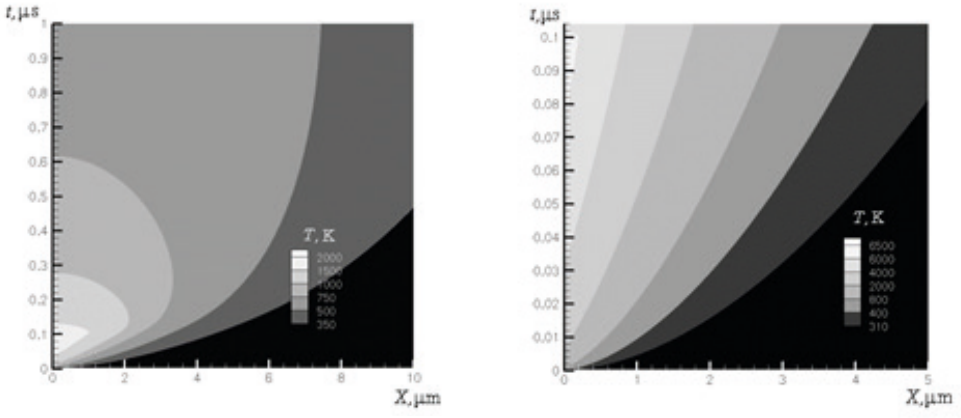


Рис. 3. Пространственно-временные распределения температуры для вариантов 4 (*a*) и 11 (*b*) (см. табл. 1)

Метод генеративного дизайна

Первый этап алгоритма метода генеративного дизайна предполагает определение полного числа возможных элементов восстанавливаемого уравнения (в зависимости от типа задачи). Полный шаблон ДУЧП для рассматриваемой задачи включает конвективное слагаемое и записывается в следующем виде:

$$-\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{1}{c\rho}\frac{\partial}{\partial x}\lambda\frac{\partial T}{\partial x}+\omega\frac{\partial T}{\partial x}+\frac{q_v}{c\rho}=0, \tag{10}$$

где коэффициенты λ и ω полагаются неизвестными, тогда как коэффициенты ρ, c и мощность тепловых источников q_v – известными.

Температурная зависимость коэффициента теплопроводности λ полагается известной:

$$\lambda=\beta_0+\beta_1T+\beta_2T^2+\beta_3T^3, \tag{11}$$

где β_p – неизвестные коэффициенты.

Второй этап алгоритма ГДМ предполагает дискретизацию элементов уравнения методами конечных разностей (КР) [7] или конечных элементов (КЭ) [17] и вычисление значений дискретизированных шаблонов по имеющимся данным. В настоящей работе использован метод КР.

Разностный шаблон второй производной по пространству для регулярной сетки имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)\approx\frac{1}{\Delta x^2}\left[\lambda_{j+1/2}T_{j+1}-(\lambda_{j+1/2}+\lambda_{j-1/2})T_j+\lambda_{j-1/2}T_j\right]. \tag{12}$$

С учетом зависимости (11) выражение (12) принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)\approx\sum_{s=0}^{3}K_s^{i,l}\beta_s, \tag{13}$$

$$K_s^{i,l}=0,5K_s^{i,n}+0,5K_s^{i,n+1}, \tag{14}$$

$$K_s^{i,n}=\frac{1}{\Delta x^2}\left[\left(\frac{T_{j+1}^n+T_j^n}{2}\right)^s(T_{j+1}^n-T_j^n)+\left(\frac{T_{j-1}^n+T_j^n}{2}\right)^s(T_{j-1}^n-T_j^n)\right]. \tag{15}$$

В выражениях (13) – (15) и далее индекс i соответствует пространственному срезу, включающему три узла: $j-1$, j и $j+1$; индекс l – временному срезу, включающему два временных слоя: n и $n+1$. Коэффициенты $K_s^{i,n+1}$ определяются формулами (15) с заменой индекса n индексом $n+1$.

Дискретизированное уравнение (10) для пространственного среза i и временного среза l имеет вид

$$\sum_{p=1}^{P_t}a_p^{il}\alpha_p=0, \tag{16}$$

где $P_t=7$ для приповерхностных узлов во время действия импульса, при объемном поглощении и $P_t=6$ в остальных случаях; $\alpha_1=-1$, $\alpha_p=\beta_{p-2}/(c\rho)$ для $2\le p\le 5$; $\alpha_6=\omega$, $\alpha_7=q_v/(c\rho)$. Параметры $\alpha_2-\alpha_6$ неизвестны и подлежат определению.

Коэффициенты a_p^{il} можно найти по имеющимся синтетическим (или экспериментальным) данным:

$$a_1^{il}=\frac{T_j^{n+1}-T_j^n}{\Delta t}, \tag{17}$$

$$a_s^{il} = K_{s-2}^{i,l} \text{ для } 2 \le s \le 5, \tag{18}$$

$$a_6^{il} = 0,5\frac{T_{j+1}^{n+1} - T_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} + 0,5\frac{T_{j+1}^{n} - T_{j-1}^{n}}{2\Delta x}, \tag{19}$$

$$a_7^{il} = 1. \tag{20}$$

В векторном виде выражение (16) можно представить как

$$\sum_{p=1}^{P_t} \mathbf{V}_p \alpha_p = \mathbf{Z}_0, \tag{21}$$

где $\mathbf{Z}_0$ – нулевой вектор; вектор $\mathbf{V}_p$ состоит из элементов a_p^{il}, при этом индекс i изменяется от 2 до $N - 1$ (пространственный индекс j изменяется от 1 до N (N – число пространственных узлов)); индекс l изменяется от 1 до L (L – число временных срезов), $L < n$ (n – число шагов по времени):

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_p^T &= (v^{p1} v^{p2} v^{p3} ... v^{p(N-2)\times L}) = \\ &= (a_p^{21} a_p^{31} a_p^{41} ... a_p^{(N-1)1} a_p^{22} a_p^{32} a_p^{42} ... a_p^{(N-1)2} ... a_p^{2L} a_p^{3L} a_p^{4L} ... a_p^{(N-1)L}). \end{aligned} \tag{22}$$

Выражение (21) можно представить как

$$\mathbf{Y} = \alpha_0 + \sum_{p=2}^{P_t} \mathbf{V}_p \alpha_p, \tag{23}$$

где $\mathbf{Y} = -\alpha_1 \mathbf{V}_1$, $\alpha_1 = -1$, $\alpha_0 = 0$.

Оценки коэффициентов α_p можно сделать с использованием метода наименьших квадратов (МНК).

Наличие исходных данных позволяет вычислить значения компонент векторов $\mathbf{V}_p$.

Третий этап алгоритма ГДМ предполагает применение к выражению (23) методов статистического обучения. Последние используют алгоритмы выбора оптимального подмножества элементов и статистические критерии для выбора единственной «правильной» комбинации элементов [3, 18]. В качестве таких критериев можно использовать информационный критерий BIC или C_p (критерий Мэллоу) [3, 19, 20]. Соответствующие критерии вычисляются как

$$\mathrm{BIC} = n \ln \frac{\mathrm{RSS}}{n} + k \ln n, \tag{24}$$

где $n = (N - 2)\, L$ – число наблюдений; RSS – сумма квадратов остатков; $k = p_e + 2$, p_e – число элементов, входящих в сумму в правой части выражения (23) (максимально возможное число элементов: $P = P_t - 1$),

$$C_p = \frac{\mathrm{RSS}}{S^2} - n + 2(p_e + 1), \tag{25}$$

где S^2 – средний квадрат остатков после регрессии всего множества предикторов.

Результаты применения метода ГДМ

В общем случае точность восстановления модели в виде ДУЧП с коэффициентами при производных, зависящими от решения, определяется количественным параметром – числом степеней свободы, а также качеством данных. В рассматриваемой задаче под числом степеней свободы подразумевается число узлов (точек) с известным значением температуры. Это число зависит от шага сетки и момента времени, которому соответствуют данные. С течением времени тепло распространяется в глубь материала, увеличивая нагретую область и (соответственно) число узлов для случая равномерной сетки. Под качеством

данных подразумевается несколько факторов: температурный диапазон, который охватывается данными; возможная корреляция данных, а также наличие и вид энергоподвода.

Для случая задания потока тепла через поверхность в виде условия (2) и выражения (3), тепловой баланс элементарного объема, связанного с сеточным узлом j, определяется только процессом теплопроводности. Ожидается, что для генерации модели можно будет использовать данные во всех узлах рассматриваемой области.

В случае объемного поглощения такой процесс происходит в приповерхностном слое мишени с характерным масштабом порядка $\delta \approx 1/\alpha_a = 0{,}2 \cdot 10^{-7}$ м (20 нм). Для приповерхностных узлов вклад слагаемого q_V в уравнении (1) является существенным в отношении теплового процесса. Величину Os_L, которая есть отношение энергии, подводимой к элементарному объему, соответствующему узлу j с границами

$$x_j - \Delta x / 2 \le x < x_j + \Delta x / 2$$

при поглощении излучения, к энергии, подводимой/отводимой от элементарного объема за счет теплопроводности, можно определить как

$$\mathrm{Os}_L = \left| \frac{q_V(x_j, t)\Delta x}{q_{-\Delta x/2} - q_{\Delta x/2}} \right|,$$
$$q_{-\Delta x/2} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x_j - \Delta x/2}, \quad q_{\Delta x/2} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}\bigg|_{x_j + \Delta x/2}. \tag{26}$$

Граница «влияния» объемного поглощения энергии на тепловой баланс зависит от распределения модуля локального числа Остроградского $|\mathrm{Os}_L|$. На рис. 4 в качестве примера приведены данные об изменении $|\mathrm{Os}_L|$ для случая объемного поглощения и момента времени t = 0,1 мкс. Для точек в приповерхностном слое вблизи координаты $x = 7 \cdot 10^{-8}$ $|\mathrm{Os}_L| >> 1$ и процесс теплопроводности играет второстепенную роль. Последнее обстоятельство влияет на точность восстановления теплофизических параметров и качество генерации модели уравнения.

В настоящей работе для стадии облучения и случая объемного поглощения приповерхностные узлы (200 узлов) исключались из данных, предназначенных для генеративного дизайна, и сумма в выражении (23) включала полное число предикторов $P = P_t - 1 = 5$ ($P_t = 6$). При учете приповерхностных узлов в исходных данных или при рассмотрении только приповерхностных узлов, для которых выражение (23) включало также слагаемое, связанное с объемным энерговыделением ($P = 6$, $P_t = 7$), погрешность восстановления коэффициентов превышала 50 % и восстановленная модель включала «лишнее» конвек-

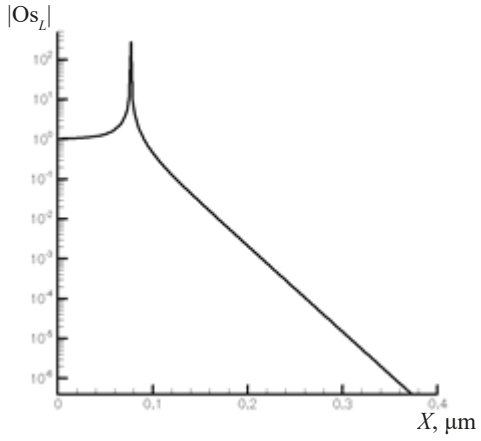


Рис. 4. Распределение модуля локального числа Остроградского по координате X

тивное слагаемое для первого диапазона температур, меньших температуры плавления T_L. Для стадии диффузии тепла после завершения импульса, из данных исключался один приграничный узел для учета специфики задания разностных шаблонов.

Варианты с заданием потока энергии через поверхность оказались не чувствительны к наличию в рассматриваемых данных информации о приповерхностных узлах. Для случая задания поверхностного потока энергии вне зависимости от стадии процесса, из данных исключался один узел, непосредственно прилегающий к поверхности мишени.

В процессе нагрева температура мишени изменяется в широких пределах: $T_0 = 300 \le T < 2200$ K для первого температурного диапазона и $T_0 = 300 \le T < 7000$ K для второго. Внутренние тесты показали неэффективность использования данных по точкам в глубине мишени с температурой менее $1{,}003T_0 = 301$ K. Эти узлы также были исключены из рассмотрения.

Данные, сгенерированные для различных временных срезов, коррелируют друг с другом [3]. В настоящей работе модель уравнения восстанавливается по данным, соответствующим одному временному срезу, состоящему из двух временных слоев. Рассмотрены данные, соответствующие временным срезам как на стадии облучения (t = 10 и 100 нс), так и после завершения лазерного импульса (1 и 2 мкс).

Число степеней свободы, используемых для генерации модели, составляло от 220 до 16 тыс. и зависело от варианта (см. табл. 1).

На первом этапе исследования метод ГДМ применялся к данным, соответствующим вариантам 1, 2, 6 и 7, предполагающим постоянство коэффициента теплопроводности λ_0 и температурный диапазон, не превышающий температуру плавления (см. табл. 1). Для варианта 1 результаты применения алгоритма выбора оптимального подмножества элементов приведены в табл. 2. Число в первом столбце означает количество элементов p_e, входящих под знак суммы в уравнении (23). Согласно полученным результатам, минимальные значения критериев BIC и C_p соответствуют уравнению с одним слагаемым с коэффициентом α_2 (помимо слагаемого с коэффициентом $\alpha_1 = -1$) для варианта 1. Для всех вариантов статистическая процедура пакета R [18] определяет значение коэффициента α_2 равным $2{,}2845 \cdot 10^{-5}$ (табл. 3), что соответствует значению коэффициента температуропроводности

$$\alpha_2 = \lambda_0/(\rho c_0) = 2{,}2845 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$$

(см. выражение (7)), которое используется при генерации данных.

Следует обратить внимание, что, помимо точного восстановления коэффициента, так же правильно восстановлена и структура уравнения, которая не должна включать конвективного слагаемого с коэффициентом α_6. Таким образом, результаты генерации уравнения с постоянными коэффициентами можно признать хорошими.

Аналогично метод ГДМ применяли к восстановлению уравнения по данным, предполагающим температурную зависимость коэффициента теплопроводности параметров в виде (7). В табл. 2 в качестве примера применения процедуры оптимального подмножества элементов представлены результаты для варианта 3 (случай задания поверхностного потока энергии и момента времени t = 10 нс), соответствующего режиму облучения. Для данного варианта процедура правильно воспроизводит шаблон уравнения без конвективного слагаемого, соответствующего коэффициенту α_6. Варианты 4 и 5 (см. табл. 1) соответствуют бóльшим временам процесса: t = 1 и 2 мкс соответственно. Температура мишени снижается, и к моменту времени 2 мкс диапазон ее изменения составляет 300 – 550 K. Число степеней свободы возрастает до 16 тыс. Для бóльших моментов времени качество восстановления структуры модели практически не меняется и конвективное слагаемое не воспроизводится. Для вариантов с заданием объемного поглощения (варианты 8 и 9) структура искомого уравнения также восстанавливается правильно. Изменение вычислительных параметров – увеличение пространственного шага в 50 раз и пропорционального уменьшения числа степеней свободы в варианте 10 (по отношению к варианту 9) не оказывает влияния на качество восстановления структуры.

Результаты применения алгоритма ГДМ для вариантов 1 – 10 представлены в табл. 3. Здесь приведены нормированные коэффициенты, соответствующие выражению (7) (вы-

Таблица 2

Результаты процедуры оптимального отбора подмножества элементов для вариантов 1 и 3

Число элементов p_e	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6	BIC	C_p
Вариант 1							
1	*	–	–	–	–	**– 29196,57**	**2,59**
2	*	–	–	–	*	– 29190,57	3,71
3	*	*	–	–	*	– 29183,85	5,54
4	*	*	*	*	–	– 29178,95	5,56
5	*	*	*	*	*	– 29173,63	6,00
Вариант 3							
1	*	–	–	–	–	– 3628,85	$2{,}44\cdot10^{14}$
2	*	–	–	–	*	– 1098,50	$1{,}60\cdot10^{11}$
3	*	*	–	–	*	– 12940,78	$2{,}26\cdot10^{10}$
4	*	*	*	*	–	**– 29934,64**	**4,53**
5	*	*	*	*	*	– 29928,26	6,00

Обозначения: $\alpha_2 - \alpha_6$ – коэффициенты уравнения (23); BIC, C_p – статистические критерии.

Примечания. 1. В левом столбце приведено число элементов p_e, входящих под знак суммы в уравнении (23). 2. Жирным шрифтом выделены выбранные результаты.

делены жирным шрифтом), и коэффициент α_6, связанный со скоростью испарения поверхности. В остальных строках приведены значения восстановленных коэффициентов для указанных вариантов. Значения нормированных коэффициентов в зависимости $\lambda(T)$ воспроизводятся с хорошей точностью. Погрешность восстановления коэффициентов слабо зависит от временнуго среза, которому соответствуют данные, и вида энергоподвода, при условии исключения части данных о приповерхностном слое для случая объемного поглощения энергии.

Максимальная погрешность в определении коэффициентов полиномиальной зависимости теплопроводности составляет 0,01 %. Погрешность определяется как

$$\varepsilon = \left|\alpha_m / \alpha_t - 1\right| \cdot 100\%,$$

где α_m – коэффициент, для которого наблюдается максимальное расхождение с теоретическим значением α_t.

Для полного коэффициента теплопроводности погрешность оказывается еще меньше и не превышает 0,002 %. Погрешность оказывается одинаковой для вариантов 9 и 10, несмотря на различие в числе степеней свободы в 50 раз.

Исходные данные для варианта 11 предполагают наличие процесса испарения поверхности мишени, поскольку температура поверхности при соответствующем большом значении интенсивности излучения (см. табл. 1) и времени импульса превышает температуру кипения ниобия. Применение метода ГДМ позволяет правильно восстановить структуру модели, которая для данного случая включает конвективное слагаемое (см. табл. 3). Восстановленное значение коэффициента α_6 для варианта 11 отлично от 0.

В табл. 2 приведены значения критериев C_p и BIC для двух вариантов: 1 и 3. Для этих вариантов минимумы критериев соответствуют одному и тому же набору элементов. Однако для нескольких вариантов критерий C_p, в отличие от BIC, предсказывает непра-

Таблица 3

Результаты применения метода ГДМ

Вариант	α_0	α_2 ($\times 10^5$)	α_3 ($\times 10^9$)	α_4 ($\times 10^{12}$)	α_5 ($\times 10^{15}$)	α_6
Сравнение теоретических значений с восстановленными						
1, 2, 6, 7	**0**	**2,2845**	**0**			**0**
1	$-7{,}1669\cdot10^{-5}$	2,2845	0			0
2	$1{,}0482\cdot10^{-7}$					
6	$-3{,}6375\cdot10^{-5}$					
7	$-8{,}8505\cdot10^{-8}$					
Сравнение теоретических значений с восстановленными						
3–5, 8–10	**0**	**2,2845**	**2,9668**	**2,9513**	**−1,0009**	**0**
3	$2{,}2415\cdot10^{-5}$	2,2845	2,9669	2,9513	−1,0009	0
4	$1{,}2132\cdot10^{-7}$		2,9668			
5	$-3{,}1960\cdot10^{-8}$			2,9514		
8	$8{,}7904\cdot10^{-6}$		2,9669	2,9511	−1,0008	
9	$4{,}1593\cdot10^{-8}$		2,9668	2,9513	−1,0010	
10	$-3{,}8343\cdot10^{-7}$			2,9515		
Сравнение теоретических значений с восстановленными						
11	**0**	**1,9060**	**0**			**–**
11	$1{,}4656\cdot10^{-5}$	1,9060	0			0,3

Примечания. 1. Значения нормированных коэффициентов, соответствующих выражению (7) (теоретические), выделены жирным шрифтом. 2. Для всех вариантов $\alpha_1 = -1$.

вильную структуру модели. Кроме того, использование BIC приводит к более разреженной модели с меньшим количеством элементов.

Таким образом, можно сделать вывод о предпочтительности критерия BIC для рассматриваемого класса задач.

Возможность метода ГДМ работать с зашумленными данными является крайне важной для реальных приложений. Для демонстрации этой возможности ниже рассмотрен дополнительный вариант расчета, аналогичный по исходным параметрам вариантам 1 и 2 из табл. 1 и соответствующий временному срезу t = 0,0975мкс. Как и ранее (варианты 1 и 2), синтетические данные сгенерированы на сетке с шагом Δx = 2 нм. Эффект шума достигался за счет моделирования значений температуры, согласно закону

$$T_\delta(x,t) = T(x,t)\left(1 + \theta\delta_r\right), \tag{27}$$

где $T(x,t)$ – значение температуры, найденное из численного решения (1); θ – случайная величина с равномерным законом распределения из диапазона [−1, 1], δ_r – относительная погрешность.

При генерации зашумленных данных величина δ_r варьировалась от 10^{-5} до 10^{-2} (см. табл. 4).

Для заданного уровня шума метод ГДМ не позволяет корректно восстановить как структуру ДУЧП, так и коэффициенты при производных. Поэтому в случае зашумленных данных потребовалось применение дополнительной процедуры регуляризации, в основе которой лежит учет погрешности задания функции при выборе шага сетки [21].

Таблица 4

Результаты применения метода ГДМ к зашумленным данным

Вариант	δ_r	α_2	ε, %
1ш	10^{-5}	$2{,}2854\cdot10^{-5}$	0,04
2ш	10^{-4}	$2{,}2912\cdot10^{-5}$	0,29
3ш	10^{-3}	$2{,}5112\cdot10^{-5}$	9,92
4ш	10^{-2}	$3{,}3634\cdot10^{-5}$	47,22

Примечание. Для вариантов 1ш – 4ш $\alpha_6 = 0$.
Обозначения: δ_r – варьируемая относительная погрешность; α_2, α_6 – коэффициенты уравнения (23); ε – погрешность, $\varepsilon = |\alpha_2 / \alpha_t - 1|\cdot 100\%$ (α_t – теоретическое значение).

Синтетические данные, как отмечалось выше, сгенерированы с малым шагом по пространственной координате, что дает возможность подобрать необходимый больший шаг, кратный Δx. Используя процедуру определения шага (в соответствии с работой [21]) для указанных в табл. 4 значений относительной погрешности входных данных, мы получили значение $\Delta x_{reg} = 0{,}1$ мкм. Для заданного значения шага метод генеративного дизайна правильно воспроизводит структуру уравнения без конвективного слагаемого ($\alpha_6 = 0$) для всех рассматриваемых значений δ_r, а погрешность восстановления коэффициента температуропроводности

$$\varepsilon = |\alpha_2 / \alpha_t - 1|\cdot 100\%$$

($\alpha_t = 2{,}2845\cdot10^{-5}$ м^2/с – теоретическое значение коэффициента) меняется от 0,04 % для относительной погрешности исходных данных 10^{-5} до 47 % для $\delta_r = 10^{-2}$ (см. табл. 4). Значение относительной погрешности $\delta_r = 10^{-2}$ соответствует таковому для абсолютной погрешности определения температуры – около 25 K у поверхности мишени и 3 K у удаленной границы.

В случае невозможности варьирования шага по пространственной координате, для синтетических или экспериментальных данных может быть использована альтернативная процедура регуляризации, основанная на интерполяции температуры с использованием сплайн-функций [21].

Выводы

Использование метода ГДМ для восстановления ДУЧП, описывающих тепловые процессы, открывает широкие возможности. ГДМ можно применять как для непосредственного построения математической модели сложного явления по имеющимся данным, так и для индикации сопутствующих процессов, таких, например, как химические реакции или фазовые превращения, а также для уточнения теплофизических параметров материалов. Однако практика применения ГДМ пока довольно небольшая и предполагает необходимость развития самого метода.

В настоящей статье продолжена работа по развитию алгоритма генеративного дизайна модели применительно к восстановлению модели теплового процесса, которая в общем случае может включать конвективное слагаемое и предполагает зависимость параметров материала от температуры.

Представлены результаты восстановления уравнения в частных производных, описывающего процесс прогрева и испарения металлической мишени импульсом лазерного излучения.

Для генерации исходных данных с целью последующего применения метода ГДМ численно решается уравнение теплопроводности, описывающее нестационарный процесс,

для различных способов учета поглощения энергии лазерного излучения. Предложен способ повышения точности расчета для случая объемного поглощения и ограниченных вычислительных ресурсов, подразумевающих большое значение шага по пространственной координате. Правильность работы вычислительного алгоритма верифицирована путем сравнения с имеющимися аналитическими решениями.

Проведенное исследование показало чувствительность метода ГДМ к типу используемых данных. Для случая, когда исходные данные для восстановления модели соответствуют объемному поглощению энергии материалом и стадии облучения мишени, необходима дополнительная оценка доли данных, которые могут использоваться для генерации модели. Исключение данных о температуре в приповерхностных узлах ведет к более качественному восстановлению структуры модели и минимальной погрешности в определении температурозависимых коэффициентов генерируемого ДУЧП. В случае, если данные соответствуют стадии диффузии тепла после завершения лазерного импульса при объемном поглощении или для любой стадии процесса при задании потока тепла через поверхность мишени, отсутствует проблема с исключением приповерхностных узлов и предварительным препроцессингом данных.

Генерация модели в виде ДУЧП с переменными коэффициентами ведет к необходимости учета существенно большего числа предикторов для применения методов статистического обучения при поиске оптимальной структуры и коэффициентов уравнения. Несмотря на данное обстоятельство, результаты исследования показывают, что метод генеративного дизайна модели, примененный к имеющимся данным, приводит к хорошим результатам в отношении восстановления структуры модели. При температурах, существенно меньших температуры кипения материала, структура уравнения не включает конвективного слагаемого. При превышении температурой поверхности мишени температуры кипения, восстанавливается конвективное слагаемое, связанное с процессом испарения поверхности. Для рассмотренного числа степеней свободы (более 200) погрешность восстановления температурозависимого коэффициента теплопроводности оказывается менее 0,002 %.

Показана возможность применения метода ГДМ для восстановления модели по зашумленным данным. В этом случае для получения корректной структуры уравнения и значений коэффициентов при производных необходимо использование дополнительных процедур регуляризации.

Дальнейшая практика применения метода генеративного дизайна будет связана с апробацией метода на реальных экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Hutter F., Kotthoff L., Vanschoren J.** (Eds.) Automated machine learning. Methods, systems, challenges. (The Springer Series on Challenges in Machine Learning). Cham, Switzerland: Springer Nature, 2019. 220 p.

2. **Maslyaev M., Hvatov A., Kalyuzhnaya A. V.** Partial differential equations discovery with EPDE framework: Application for real and synthetic data // Journal of Computer Science. 2021. Vol. 53. July. P. 101345.

3. **Гарет Д., Уиттон Д., Хасти Т., Тибширани Р.** Введение в статистическое обучение с примерами на языке R. Пер. с англ. С. Э. Мастицкого. Изд. 2-е, испр. М.: ДМК Пресс, 2017. 456 с.

4. **Лыков А. В.** Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967. 600 с.

5. **Самарский А. А., Вабищевич П. Н.** Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС, 2003. 784 с.

6. **Манухин Б. Г., Гусев М. Е., Кучер Д. А., Чивилихин С. А., Андреева О. В.** Оптическая диагностика процесса свободной конвекции жидкости // Оптика и спектроскопия. 2015. Т. 119. № 3. С. 418–423.

7. **Быков Н. Ю., Хватов А. А., Калюжная А. В., Бухановский А. В.** Метод восстановления моделей тепломассопереноса по пространственно-временным распределениям параметров // Письма в Журнал технической физики. 2021. Т. 47. № 24. С. 9–12.

8. **Булгаков А. В., Булгакова Н. М., Бураков И. М., Быков Н. Ю. и др.** Синтез наноразмерных материалов при воздействии мощных потоков энергии на вещество. Новосибирск: Институт теплофизики СО РАН, 2009. 462 с.

9. **Bykov N. Y., Bulgakova N. M., Bulgakov A. V., Loukianov G. A.** Pulsed laser ablation of metals in vacuum: DSMC study versus experiment // Applied Physics A. 2004. Vol. 79. No. 4–6. Pp. 1097–1100.

10. **Bykov N. Y., Lukyanov G. A.** The direct simulation Monte Carlo of cluster formation processes in laser plume // Proceedings of the 25-th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. Novosibirsk: Publishing House of SB RAS, 2007. Pp. 645–650.

11. Ниобий // Химическая энциклопедия. В 5 тт. (1988–1998). Т. 3. Мед–Пол. Под ред. Н. С. Зефирова, И. Л. Кнунянца, Н. Н. Кулова. М.: Советская энциклопедия, 1992. С. 249.

12. **Золотарев В. М., Морозов В. Н., Смирнова Е. В.** Оптические постоянные природных и технических сред. Ленинград: Химия, 1984. 216 с.

13. Физические величины. Справочник. Под ред. И. С. Григорьева и Е. З. Мелихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1230 с.

14. **Зиновьев В. Е.** Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. М.: Металлургия, 1989. 384 с.

15. **Анисимов С. И., Имас Я. И., Романов Г. С., Ходыко Ю. В.** Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970. 272 с.

16. **Карслоу Г., Егер Д.** Теплопроводность твердых тел. Пер. с англ. М.: Наука, 1964. 488 с.

17. **Bykov N., Hvatov A., Kalyuzhnaya A., Boukhanovsky A.** A method of generative model design based on irregular data in application to heat transfer problems // Journal of Physics: Conference Series. 2021. Vol. 1959. P. 012012.

18. R Core Team. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2020. Available online at https://www.R-project.org/.

19. **Priestley M. B.** Spectral analysis and time series (Probability and Mathematical Statistics). Cambridge, UK: Academic Press, 1981. 706 p.

20. **Mallows C. L.** Some comments on C_p // Technometrics. 1973. Vol. 15. No. 4. Pp. 661–675.

21. **Ватульян А. О.** Коэффициентные обратные задачи механики. М.: Физматлит, 2019. 272 с.

REFERENCES

1. **Hutter F., Kotthoff L., Vanschoren J.** (Eds.), Automated machine learning. Methods, systems, challenges, (The Springer Series on Challenges in Machine Learning), Springer Nature, Cham, Switzerland, 2019.

2. **Maslyaev M., Hvatov A., Kalyuzhnaya A. V.,** Partial differential equations discovery with EPDE framework: Application for real and synthetic data, J. Comp. Sci. 53 (July) (2021) 101345.

3. **James G., Witten D., Hastie T., Tibshirani R.,** An introduction to statistical learning: with applications in R, Springer, New York, 2013.

4. **Lykov A. V., Mikhailov Y. A.,** Theory of heat and mass transfer, Institute for the Promotion of Teaching Science and Technology (IPST), Thailand, 1963.

5. **Samarskii A. A., Vabishchevich P. N.,** Computational heat transfer, in 2 Vols., Willey, Chichester, 1995.

6. **Manukhin B. G., Kucher D. A., Chivilikhin S. A., et al.,** Optical diagnostics of the process of free liquid convection, Optics and Spectroscopy. 119 (3) (2015) 392–397.

7. **Bykov N. Yu., Khvatov A. A., Kalyuzhnaya A. V., Bukhanovskiy A. V.,** A method for reconstructing models of heat and mass transfer from the spatio-temporal distribution of parameters, Technical Physics Letters. 47 (24) (2021) 9–12 (in Russian).

8. **Bulgakov A. V., Bulgakova N. M., Burakov I. M., Bykov N. Y., et al.,** Nanosized material synthesis by action of high-power energy fluxes on matter, Institute of Thermophysics SB RAS, Novosibirsk, 2009 (in Russian).

9. **Bykov N. Y., Bulgakova N. M., Bulgakov A. V., Loukianov G. A.,** Pulsed laser ablation of metals in vacuum: DSMC study versus experiment, Appl. Phys. A. 79 (4–6) (2004) 1097–1100.

10. **Bykov N. Y., Lukyanov G. A.,** The direct simulation Monte Carlo of cluster formation processes in laser plume, Proc. 25-th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, Publishing House of SB RAS, Novosibirsk (2007) 645–650.

11. Niobiy [Niobium], In Book: Khimicheskaya entsiklopediya, T. 3. Pod red. N. S. Zefirova i dr. [Encyclopedia of chemistry, Vol. 3, Edited by N. S. Zefirov et al.], Soviet Encyclopedia Publishing, Moscow, 1992. P. 249 (in Russian).

12. **Zolotarev V. M., Morozov V. N., Smirnova E. V.,** Opticheskiye postoyannyye prirodnykh i tekhnicheskikh sred [Handbook of optical constants of natural and technical media], Khimiya Publishing, Leningrad, 1984 (in Russian).

13. **Grigoriev I.S., Melikhov E. Z.** (Eds.), Handbook of physical quantities, CRC Press, Boca Raton, Florida, USA, 1997.

14. **Zinoviev V. E.,** Teplofizicheskiye svoystva metallov pri vysokikh temperaturakh [Thermal properties of metals at high temperatures], Handbook, Metallurgia, Moscow, 1989 (in Russian).

15. **Anisimov S. I., Imas Ya. I., Romanov G. S., Khodyko Yu. V.,** Deystviye izlucheniya bolshoy moshchnosti na metally [Effect of high-power radiation on metals], Nauka Publishing, Moscow, 1970 (in Russian).

16. **Carslaw H. S., Jaeger J. C.,** Conduction of heat in solids, 2-nd ed., Oxford University Press, Oxford, UK, 1959.

17. **Bykov N., Hvatov A., Kalyuzhnaya A., Boukhanovsky A.,** A method of generative model design based on irregular data in application to heat transfer problems, J. Phys. Conf. Ser. 1959 (2021) 012012.

18. R Core Team. R: A language and environment for statistical computing, R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, 2020. Available online at https://www.R-project.org/.

19. **Priestley M. B.,** Spectral analysis and time series (Probability and Mathematical Statistics), Academic Press, Cambridge, UK (1981).

20. **Mallows C. L.,** Some comments on C_p, Technometrics. 15 (4) (1973) 661–675.

21. **Vatulyan A. O.,** Koeffitsiyentnyye obratnyye zadachi mekhaniki [Inverse coefficient problems in mechanics], Fizmatlit, Moscow, 2019 (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

БЫКОВ Николай Юрьевич – *доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник факультета цифровых трансформаций Научно-исследовательского университета ИТМО; ведущий научный сотрудник, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49А
nbykov2006@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0041-9971

THE AUTHOR

BYKOV Nikolay Yu.
ITMO University, St. Petersburg,
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
49A, Kronverksky Ave., St. Petersburg, 197101, Russia
nbykov2006@yandex.ru
ORCID: 0000-0003-0041-9971

Статья поступила в редакцию 08.04.2022. Одобрена после рецензирования 06.06.2022. Принята 06.06.2022.

Received 08.04.2022. Approved after reviewing 06.06.2022. Accepted 06.06.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15308

THE THERMOELASTIC STRESSES DURING LASER ANNEALING OF TITANIUM DIOXIDE ON A SAPPHIRE SUBSTRATE

Yu. V. Klunnikova [1] ✉, M. V. Anikeev [2], A. V. Filimonov [3]

[1] Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia;

[2] Fraunhofer SIT | ATHENE, Darmstadt, Germany;

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

✉ yvklunnikova@sfedu.ru

Abstract. In order to analyze the technique of laser annealing of titanium dioxide films on sapphire substrates and to optimize the film properties, a thermomechanical model of this technique has been considered. The model allowed us to monitor and vary the values of thermoelastic stresses in the film-substrate structures caused by changes of film annealing technological parameters such as the laser power, the film thickness, the pulse duration, the speed of laser emission, etc. The temperature field under the laser beam was simulated and then the stresses were analyzed using the thermomechanical finite element model. The simulation results showed an important role of the TiO_2 film-to-substrate thickness ratio. The optimal combination of technological parameters was selected to prevent formation of cracks and other defects in the films.

Keywords: film, thermoelastic property, laser annealing, substrate, numerical method, sapphire substrate

Funding: The research was funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation and the German Academic Exchange Service (DAAD) within the framework of the joint program "Mikhail Lomonosov" (project No. 2293-21), the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project no. 0784-2020-0025).

For citation: Klunnikova Yu. V., Anikeev M. V., Filimonov A. V., The thermoelastic stresses during laser annealing of titanium dioxide on a sapphire substrate, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 100–110. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15308

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

Научная статья
УДК 621.382
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15308

ТЕРМОУПРУГИЕ НАПРЯЖЕНИЯ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ОТЖИГЕ ДИОКСИДА ТИТАНА НА САПФИРОВОЙ ПОДЛОЖКЕ

Ю. В. Клунникова [1] ✉, М. В. Аникеев [2], А. В. Филимонов [3]

[1] Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия;

[2] Институт информационной безопасности общества Фраунгофера, г. Дармштадт, Германия;

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

✉ yvklunnikova@sfedu.ru

© Klunnikova Yu. V., Anikeev M. V., Filimonov A. V., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

Аннотация. С целью анализа технологии лазерного отжига пленок оксида титана на сапфировых подложках и оптимизации свойств пленок рассмотрена термомеханическая модель этого отжига. Она позволяет контролировать и варьировать значения термоупругих напряжений в структурах пленка-подложка, вызванных изменением технологических параметров отжига пленок, таких как мощность лазера, толщина пленки, длительность импульса, скорость лазерного излучения и др. Температурное поле под лазерным лучом моделировали с последующим анализом напряжений с помощью термомеханической модели конечных элементов. Результаты моделирования показали важную роль соотношения между значениями толщины пленки и подложки. Подобрано оптимальное сочетание технологических параметров, позволяющее предотвратить образование в пленках трещин и других дефектов.

Ключевые слова: пленка, термоупругие свойства, лазерный отжиг, подложка, численный метод

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и Германской службы академических обменов (DAAD) в рамках совместной программы «Михаил Ломоносов» (проект № 2293-21), а также проекта № 0784-2020-0025 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Ссылка при цитировании: Клунникова Ю. В., Аникеев М. В., Филимонов А. В. Термоупругие напряжения при лазерном отжиге диоксида титана на сапфировой подложке // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С100–110. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15308

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

Introduction

The possibility of obtaining thin films on substrates is important for the design of functional devices such as photoelectric converters or sensitive elements of gas sensors. Modern semiconductor gas sensors use thin films of metal oxides (TiO_2, Fe_2O_3, V_2O_5, SnO_2, WO_3, ZnO) as sensing elements. These materials are popular because of their workability, low cost, high chemical stability, mechanical strength, and high adhesion to sapphire. As the result, semiconductor gas sensors are characterized by small sizes, high sensitivity, and reliability [1, 2].

Traditional technologies of microelectronics, such as vacuum deposition and photolithography, can be used for creating thin films. Application of more sophisticated technologies increases the performance of gas sensor and decreases its cost and power consumption [3].

Laser radiation (LR) for obtaining thin films on sapphire substrates increases the performance of gas element production, provides stability of film parameters and higher oxide quality. Decreased duration of film laser annealing (LA) on sapphire surface excludes the necessity to provide vacuum conditions or special inert atmosphere to prevent uncontrolled surface impurities [4 – 8]. The main benefits of gas sensor development on a sapphire substrate with titanium oxide (TiO_2) film are high selectivity to detectable gases, reduced operating temperature, and increased stability over time.

The mismatch of the lattice parameters and the thermal expansion properties between thin film layers and substrate materials is the main cause of the cross-layer defect development and stress generation. Thermoelastic stresses in a thin film often hamper its performance. Therefore, it is important to be able to control the stress formation in thin film.

The Stoney formula [9] is commonly used for estimation of stresses in the thin film systems. This formula has been extended to calculate stresses in multi-layered thin films deposited on a substrate exposed to non-uniform misfit strains, which provides a way to experimentally determine stresses in such systems [10]. Analytical and experimental methods, including the substrate curvature and X-ray methods, are also useful but they cannot provide the stress distribution in thin film systems when manufacturing and across individual film layers.

The numerical simulation is an efficient technique for studying complex systems, including

© Клунникова Ю. В., Аникеев М. В., Филимонов А. В., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

studies in thermoelastic stress analysis of the thin film-substrate system. Multiphysics package as ANSYS is very suitable for such investigations. It allows to perform the thermomechanical analysis for both temperature and stress estimation. The simulation gives the opportunity to analyze the generation and evolution of stresses in thin film structures and processing conditions on the stress distribution. A more comprehensive investigation was carried out by A. Pramanik and L. Zhang [11]; they used anisotropic material properties and a three-dimensional finite element (FE) model to investigate the residual stresses in the thin film and substrate. E. Citirik et al. [12] used the FE analysis to simulate the residual stresses developed in density modulated silicon (Si) thin films, which incorporate alternating low- and high-density layers. H. A. Tinoko et al. [13] showed a methodology to estimate mechanical parameters of thin films by means of a bulge test and a numerical approach. Although many studies in stress evolution during thin film production have been carried out, some questions related to underlying mechanisms remain unanswered, and it remains unknown how the stresses are stipulated by specific material structures and manufacturing conditions, influence of material nonlinearity properties in temperature range, etc.

The goal of our research was to investigate the thermoelastic stresses in the thin TiO_2 films on substrates obtained by LA and to analyze occurrence and evolution of thermoelastic stresses and defects in the film-substrate structure and to determine the conditions that prevent cracks formation.

It is necessary to find optimal conditions for manufacturing TiO_2 films on sapphire substrates for microelectronics application and to improve not only substrate quality but also films characteristics (i. e., reduce defects, improve oxide quality as well as reproducibility and stability of film parameters over time). The influence of the technological process on thermoelastic stresses in TiO_2 films has been studied experimentally and with simulation. We have investigated the effects of material properties, thin film structure and processing conditions on the distribution of stresses.

Computational approach

The localization of the thermal effect during TiO_2 films LA on a sapphire substrate leads to a large temperature gradient in the zone of the laser beam influence, which results in thermomechanical stresses and possible defects. The scheme of LR of a TiO_2 film 10 μm thick on the sapphire surface 430 μm thick is presented in Fig. 1.

Numerical methods allow to carry out simulations and determine the optimal parameters of the films' LA. Two sequential steps have to be performed for the thermomechanical stress analysis: (1) a pure thermal analysis which provides temperature and heat flux distributions in space and time, (2) a thermoelastic analysis to compute the mechanical stresses due to the temperature gradients.

To calculate the temperature fields, we used a three-dimensional heat equation:

$$C\rho\frac{\partial T}{\partial t}-\left(\frac{\partial}{\partial x}k\frac{\partial}{\partial x}T+\frac{\partial}{\partial y}k\frac{\partial}{\partial y}T+\frac{\partial}{\partial z}k\frac{\partial}{\partial z}T\right)=q, \quad (1)$$

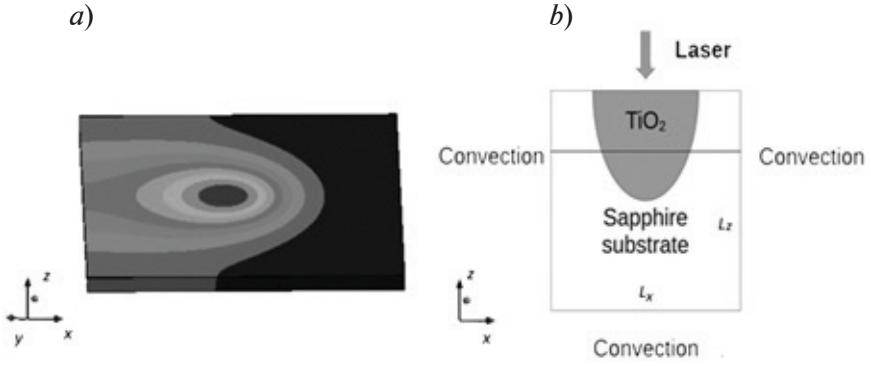


Fig. 1. Scheme of laser annealing of the titanium oxide – sapphire system (*b*) and the temperature distribution in the system's cross-section at time instant t (*a*);
L_x, L_z are the width and height of the sample, the laser moved from left to right

where C is the heat capacity; ρ is the mass density; T is the temperature; t is the time; k is the thermal conductivity coefficient and q is the power density of the heat source.

Laser energy absorbed by the structure is described by the Bouguer – Lambert – Beer expression

$$q = a(1-R)I_0(t)e^{-az}, \tag{2}$$

where R, a are the reflection coefficient and the absorption one, respectively, and $I_0(t)$ is the laser power (LP) density.

The spatial distribution of the laser power density while pulse duration follows a Gaussian distribution, which was approximated using the equation:

$$I_0(t) = I_0 e^{\frac{-(x^2+y^2)}{r}}, \tag{3}$$

where r is the radius of laser beam; x, y are the spatial coordinates.

The initial condition for the heat Eq. (1) is $T(x, y, z, t = 0) = T_0$.

The boundary conditions are set to simulate convection on all boundaries:

$$-k\frac{\partial T}{\partial n} = \beta(T - T_0),$$

where β is the convection heat transfer coefficient.

The Neumann boundary conditions (flux-type) were used on the top surface for the calculation of heat transfer from the film to the substrate. The boundary condition on the top layer can be described as

$$-k\frac{\partial T}{\partial z}\Big|L_z = q_{i,j,k},$$

where $q_{i,j,k}$ is the part of flux in the nodal point i, j, k.

The boundary condition between the layers (with the film thickness L_1 and substrate thickness L_2) defines the equivalent temperatures in both layers:

$$T_1(z = L_1 - 0, t) = T_2(z = L_1 + 0, t).$$

After laser annealing, the cooling takes place in the air. The laser scan speed was varied for the simulation. Due to large temperature gradients, thermal stresses appear during the heating-up and the cooling-down processes. The material strains can be described as [14]:

$$\varepsilon_{tot} = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{th}, \tag{4}$$

where ε_{tot} is the total strain, ε_{el} is the elastic strain, ε_{th} is the thermal strain.

The thermal strain is described by linear temperature dependence:

$$\varepsilon_{th} = \alpha(\Delta T). \tag{5}$$

The elastic stress is determined by the Hooke's law [14]:

$$\sigma = [D]\{\varepsilon_{th}\}. \tag{6}$$

As consequence of Eqs. (4) – (6), the strain-stress relationship for isotropic material can be described as

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} &= \frac{1}{E}\left(\sigma_{xx} + \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})\right) + \alpha(\Delta T),\\ \varepsilon_{yy} &= \frac{1}{E}\left(\sigma_{yy} + \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})\right) + \alpha(\Delta T),\end{aligned} \tag{7}$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{1}{E}\left(\sigma_{zz} + \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})\right) + \alpha(\Delta T),$$
$$\varepsilon_{yz} = \frac{2(1+\nu)\sigma_{yz}}{E}, \quad (7)$$
$$\varepsilon_{zx} = \frac{2(1+\nu)\sigma_{zx}}{E},$$

where E is the Young's modulus, ν is the Poisson's ratio, α is the coefficient of linear thermal expansion, ΔT is the local rise of temperature.

The support on the three adjacent faces is assumed frictionless.

The thermophysical properties adopted for both substrate and film are displayed in Table [2].

Table

Thermophysical properties of the titanium dioxide and sapphire substrate

Parameter	Parameter value	
	Titanium dioxide	Sapphire
Mass density, $kg \cdot m^{-3}$	4260	4000
Heat capacity, $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	690	1430
Thermal conductivity, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	85	5
Coefficient of thermal expansion, K^{-1}	$9.19 \cdot 10^{-6}$	$8.8 \cdot 10^{-6}$
Young's modulus, GPa	282	350
Poisson's ratio	0.27	0.27

Three different thicknesses of the substrates whose sizes are assumed to be 10 × 10 × 0.43 mm, 10 × 10 × 1 mm, 10 × 10 × 1.5 mm have been investigated. The film thickness is varied from 1 to 30 μm.

The simulation parameters are the following: the laser power is 30 – 90 W; the scan speed is 1 – 25 mm/s; the laser scan length is 8 mm; the laser beam radius is 1.25 mm.

The FE package ANSYS was used to perform the thermophysical analysis. The temperature history calculation was used as an input for structural analysis. The transient thermal analysis was performed for the temperature distribution in the TiO_2 film on the sapphire substrate.

A challenge arises from meshing the thin layers in order of good element quality. The number of elements used in our ANSYS simulation for the case with substrate thickness 1 mm is 5720 in which 44.5 % are the 10-node SOLID291 elements, 3.93 % is the 20-node SOLID279 element, 18.69 % 8-node contact elements CONTA174 and 32.88 % are thermal surface elements SURF152. The minimum orthogonal quality is 0.04 (more than 0.01), which is the evidence of adequate meshing. The average element surface area is $3.6683 \cdot 10^{-5}$ m^2. The mesh density is finer in the laser path trajectory which gives us the opportunity to concentrate the elements in regions with large temperature gradients, obtaining increased computational efficiency.

Materials and methods

For the experiments a thin film of tetraethoxytitanium $Ti(OC_2H_5)_4$ was brought up onto a sapphire substrate with a thickness of 430 μm by centrifugation (centrifuge SPIN NXG-P1, rotor rotation speed of 2000 – 3000 rpm, application time of 30 s). Sapphire supports to promote high adhesion strength to the gas sensitive material and has a high melting point, high chemical and radiation resistance, high hardness and transparency, which leads to the quality and stability improvement of the gas sensitive material [15, 16].

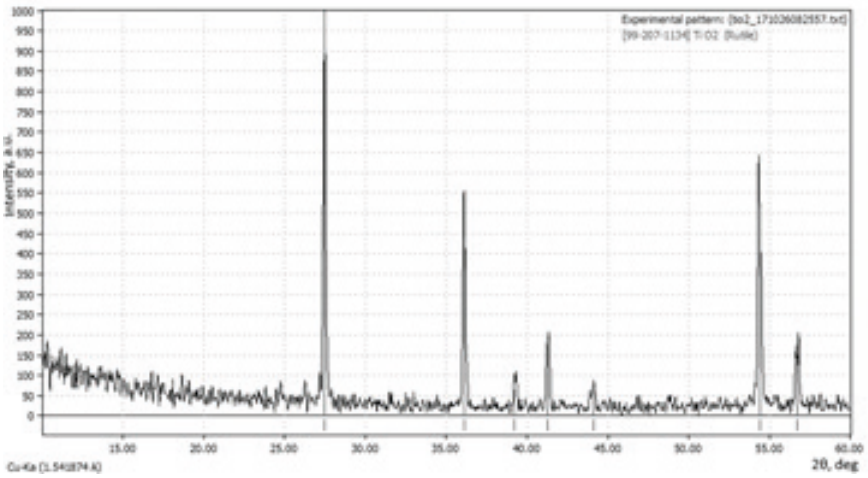
After pre-drying in the oven at 100 – 120 °C for 15 – 20 min (the solvent and hydrolysis

products have been removed from the film before) LA is carried out using the radiation of a pulsed solid-state Nd:YAG laser with a wavelength of 1064 nm (film temperature of 500 – 600 °C, laser beam scanning rate of 1 – 20 mm/s, laser power of 30 – 90 W). With that treatment the crystalline structure is modified and defects are reduced in order to improve the quality and stability of the gas sensitive material. The use of LA makes it possible to shorten the processing time to obtain the gas sensitive material in comparison with traditional methods (annealing in a muffle furnace) [4 – 8].

The phase composition of the thin film structure was investigated by powder X-ray diffractometry [17]. The diffractometer ARLX'TRA, Thermo ARL was used to perform X-ray phase analysis of obtained thin films. A qualitative analysis of the phase composition was performed using an open database (card index) COD (Crystallographhy Open Database) and the Match program. The X-ray roentgenogram of the obtained film, reflexes of the standardized roentgenogram and Miller indices are shown in Fig. 2, *a*. We have chosen the X-ray roentgenogram for titanium oxide with the structure of rutile (card No. 99-207-1134) for reference. It can be seen from the obtained data that the reflexes of the standard sample coincide with the reflexes of the resulting film. Therefore, the material has a phase composition like the rutile modification of titanium oxide. Fig. 2, *b* shows SEM image of the surface morphology of the titanium dioxide film.

We carried out experimental studies to measure thermal stresses in thin TiO_2 films on the Tencor FLX-2320 (Japan) in the laboratories of "Piezopribor" Research Center (Rostov-on-Don, Russia).

a)



b)

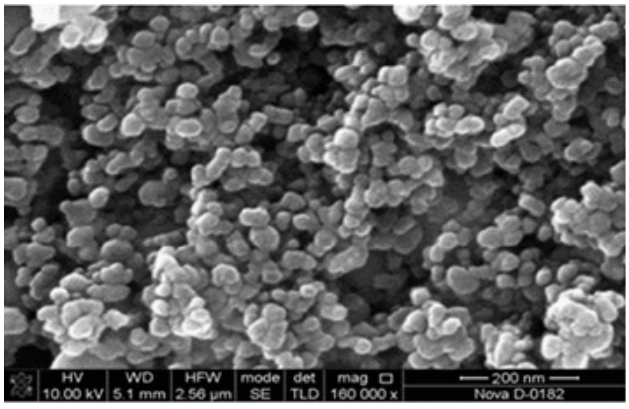


Fig. 2. The X-ray roentgenogram of the TiO_2 film obtained by laser annealing (*a*) and the SEM image of the surface morphology of the film on sapphire substrate (*b*); laser wavelength is 1.064 μm

Results and discussion

Different calculation scenarios for TiO_2 film laser annealing on sapphire substrate were considered. The experimental results showed that the temperature for TiO_2 film structure formation was about 500 °C [18]. Thermal analyses showed a temperature peak on the film surface.

We calculated the stress distribution in the TiO_2 film – sapphire structure caused by LR. The general purpose FE code ANSYS was used to simulate TiO_2 film – sapphire LA with variation of laser parameters such as the its speed and power. We investigated the scenarios with different substrate thicknesses (0.43, 1.00, and 1.50 mm). The influence of laser power, substrate thickness and laser beam speed on maximum temperature for TiO_2 laser annealing on sapphire substrate is presented in Fig. 3. Increasing the speed of the laser leads to a decrease in maximum temperature on the sample surface. This decrease can be explained by the fact that the heating and cooling require less time and the material gets less energy. The cooling rate significantly influenced the formation of TiO_2 film on sapphire substrate.

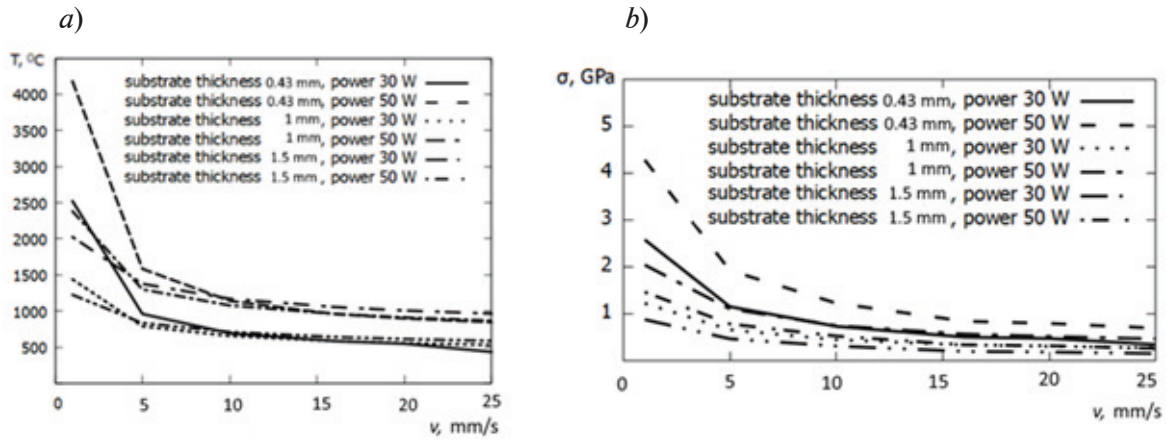


Fig. 3. The dependences of the sapphire substrates' temperature T (*a*) and its stress σ (*b*) on the laser beam speed at different laser power values and the thicknesses of sapphire substrates; the thickness of a TiO_2 film is 5 μm

It can be seen from Fig. 3 and 4 that the large temperature gradients are the source of thermal stresses on the film surface. The heated part of material expands but the rest material restrains the movement of heated one. So, we have the compressive region in the under irradiated zone. During the cooling, compressive stresses appeared in irradiated zone, but the rest is in tensile state.

Fig. 4 illustrates the equivalent (von-Mises) stresses during TiO_2 film LA on sapphire substrate. The maximum temperature for that case was about 530 °C at a laser scan speed of 25 mm/s, substrate thickness was 1 mm and laser power was 30 W. When the laser beam begins to scan a path (Fig. 4, *a* – *c*), the stresses increase, but the low temperature of the surrounding material restricts the heated zone expansion causing the formation of compressive stresses (equivalent (von-Mises) stress is 1.3 GPa at 0.08 s of LA). When cooling, the temperature decreases and the material is exposed to lower stresses (equivalent (von-Mises) stress is 8.42 MPa at 8 s, the laser treatment time is 0.32 s).

The behavior of stresses in the processed material strongly depends on the temperature gradients. The maximum principal stress (see Figs. 3, 4) indicates the overall stress state of material. When the largest principal stress exceeds the uniaxial tensile strength 30, a crack might be initiated. The tensile strength limit of TiO_2 film on sapphire substrate is 333 MPa. If the maximum principal stress is less than the tensile strength limit for titanium dioxide, no cracks formation is expected.

The simulation results indicate that the thickness ratio between the TiO_2 film and the sapphire substrate plays an important role in the LA. The capability of the substrate to diffuse the heating from the film enables a proper temperature distribution inside the film, avoiding the overheating of the surface. It has significant influence on defects like cracks formation.

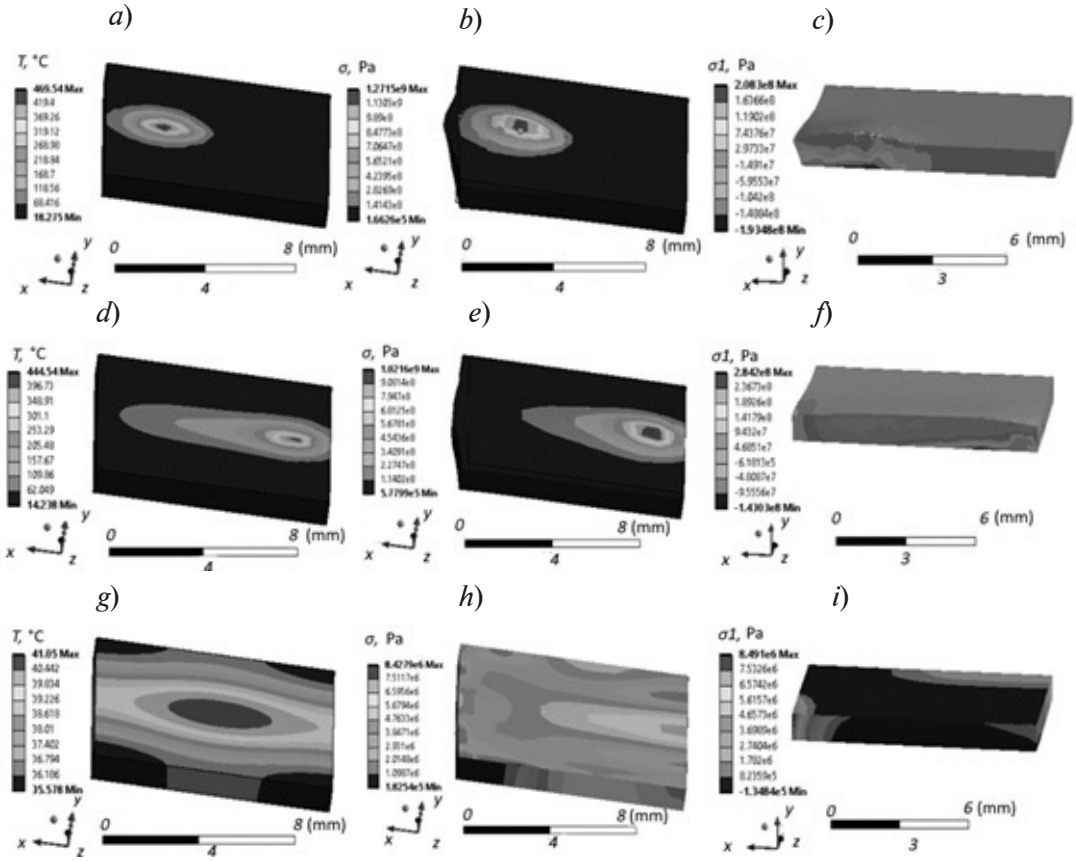


Fig. 4. The calculated distributions of maximum temperature (*a*, *d*, *g*), of equivalent von-Mises stresses (*b*, *e*, *h*), and of maximum principle stresses (*c*, *f*, *i*) over a vertical cross-section of the body at different time points in the laser processing, s: 0.08 (*a*, *b*, *c*), 0.32 (*d*, *e*, *f*) and 8.0 (*g*, *h*, *i*). These are criteria for crack initiation during TiO_2 film LA, under the following conditions: a laser scan speed is 25 mm/s; LP is 30 W; the film thickness is 5 μm, the substrate one is 1 mm; the duration of laser treatment is 0.32 s

An increase in the film thickness from 5 to 30 μm decreases the maximum principal stresses. The stress variation induced by an annealing is as much higher as the film thickness is low. We can see in Fig. 3 that the thicker substrate (1 mm) and the higher laser speed (more than 2 cm/s at laser power of 30 W) allow to obtain a film without cracking risk. It is possible to control and vary the value of thermoelastic stresses in the film-substrate structures due to changes of film annealing processing parameters: the substrate temperature, laser radiation power, film and substrate thicknesses, pulse duration, sample movement velocity, etc. Thereby one can optimize film properties for the task and device design.

Conclusion

We have simulated TiO_2 thin films processing on sapphire substrates and conducted related experiments. We developed a three-dimensional model for an analysis of the stress distribution in the film-substrate structure. The films properties were investigated with atomic force microscopy method, scanning electron microscopy, and X-ray phase analysis.

The thermomechanical model for TiO_2 LA on sapphire substrate was implemented in ANSYS software. We investigated that the temperature on TiO_2 film (thickness of 5 μm) surface is about 500 – 600 °C at an average LR power of 30 W, which is a prerequisite for the growth of films on the substrate surface. It corresponds to the level of thermoelastic stresses (much less than the material elastic limit) such that the cracks formation is not expected. The morphology of the film structure can be varied by changing the laser power and temperature, which allows to reallocate defects in the structure and to improve the films quality for their usage in microelectronics and thin film optics.

Higher scan speed leads to lower temperatures and larger temperature gradient during the material heating and cooling. The film and substrate thickness play a key role in the formation of cracks and defects in film. The studies showed that cracks on the surface can be formed in thicker films. The thicker substrate (1 mm), the bigger laser scan speed (more than 20 mm/s), and the smaller laser power (30 W) allow to obtain the film without cracking risk. Thus, the TiO_2 film-to-substrate thickness ratio, LP, laser scan speed are the most important parameters to process a uniform film for their application in microelectronics.

REFERENCES

1. **Krylov O. V.,** Geterogennyi karaliz [Heterogeneous catalysis], Academkniga, Moscow, 2004 (in Russian).

2. **Gas'kov A. M., Rumyantseva M. N.,** Materials for solid-state gas sensors, Inorg. Mater. 36 (3) (2000) 293–301.

3. **Ugai Ya. A.,** Introduction to semiconductor chemistry, 2nd edition, Vysshaya Shkola, Moscow, 1975 (in Russian).

4. **Malyukov S. P., Kulikova I. V., Sayenko A. V., Klunnikova Yu. V.,** Optimization of the structure nanoporous TiO_2 film in a dye-sensitized solar cell, J. Phys. Conf. Ser. 541 (2014) 012060.

5. **Malyukov S. P., Sayenko A. V., Klunnikova Yu. V.,** Research of influence of laser annealing parameters on structural and morphological properties of TiO_2 thin films, IOP Conf. Series: Mater. Sci. & Eng. Vol. 475 (VII and VIII Int. Conf. Phys. & Technol. Nanoheterostruct. Microwave Electr., Russian Federation, Moscow (2019) 012008.

6. **Klunnikova Yu. V., Malyukov S. P., Sayenko A. V., Tolstunov M. I.,** Investigation of titanium oxide film on sapphire substrate for gas sensor, J. Phys. Conf. Ser. 1124 (2) (2018) 022003.

7. **Klunnikova Yu. V., Malyukov S. P., Sayenko A. V., Biyatenko Yu. N.,** Investigation of internal thermoelastic stresses in TiO_2 film on sapphire substrate, Int. J. Civil Eng. & Technol. 10 (1) (2019) 227–232.

8. **Malyukov S. P., Klunnikova Yu. V., Sayenko A. V.,** Laser annealing of oxide films on the sapphire surface, J. Russ. Laser Res. 36 (3) (2015) 276–280.

9. **Stoney G. G.,** The tension of metallic films deposited by electrolysis, Proc. Royal Soc. London A. 82 (553) (1909) 172–175.

10. **Brown M. A., Rosakis A. J., Feng X., et al.,** Thin film/substrate systems featuring arbitrary film thickness and misfit strain distributions, P. II: Experimental validation of the non-local stress/curvature relations, Int. J. Solids & Struct. 44 (6) (2007) 1755–1767.

11. **Pramanik A., Zhang L. C.,** Residual stresses in silicon-on-sapphire thin film systems, Int. J. Solids & Struct. 48 (9) (2011) 1290–1300.

12. **Citirik E., Demirkan M. T., Karabacak T.,** Stress modeling of density modulated silicon thin films using finite element, J. Vacuum Sci. & Technol. A. 33 (2) (2015) 021503.

13. **Tinoco H. A., Holzer J., Pikálek T., et al.,** Estimation of mechanical parameters of thin films using finite element analysis, Proc. 20-th Int. Conf. Appl. Mech. 20 (April) (2018) 157–162.

14. **Rubino F., Astarita A., Carlone P.,** Thermo-mechanical finite element modeling of the laser treatment of titanium cold-sprayed coatings, Coatings. 8 (6) (2018) 219.

15. **Dobrovinskaya E. R., Lytvynov L. A., Pishchik V.,** Sapphire: material, manufacturing, applications, Springer, New York, 2009.

16. **Akselrod M. S., Bruni F. J.,** Modern trends in crystal growth and new applications of sapphire, J. Cryst. Growth. 360 (1 December) (2012) 134–145.

17. **Kovba L. M., Trunov V. K.,** Rentgenofazovyi analiz [X-ray phase analysis], Moscow State University Publishing, Moscow, 1976 (in Russian).

18. **Welsch G., Boyer R., Collings E.** (Eds.), Materials properties handbook: Titanium alloys, ASM International, Materials Park OH, USA,1994.

19. **Wang Y., Wang Q., Chen H., et al.,** Comparative study on crack initiation and propagation of glass under thermal loading, Mater. 9 (10) (2016) 794.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Крылов О. В.** Гетерогенный катализ. М.: Академкнига, 2004. 679 с.

2. **Гаськов А. М., Румянцева А. М.** Выбор материалов для твердотельных газовых сенсоров // Неорганические материалы. 2000. Т. 36. № 3. С. 369–378.

3. **Угай Я. А.** Введение в химию полупроводников. 2-е изд. М.: Высшая школа, 1975. 302 с.

4. **Malyukov S. P., Kulikova I. V., Sayenko A. V., Klunnikova Yu. V.,** Optimization of the structure nanoporous TiO_2 film in a dye-sensitized solar cell // Journal of Physics: Conference Series. 2014. Vol. 541. P. 012060.

5. **Malyukov S. P., Sayenko A. V., Klunnikova Yu. V.** Research of influence of laser annealing parameters on structural and morphological properties of TiO_2 thin films // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2019. Vol. 475. VII and VIII International Conf. on Physics and Technologies of Nanoheterostructure Microwave Electronics. Moscow, Russian Federation. P. 012008.

6. **Klunnikova Yu. V., Malyukov S. P., Sayenko A. V., Tolstunov M. I.** Investigation of titanium oxide film on sapphire substrate for gas sensor // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 1124. No. 2. P. 022003.

7. **Klunnikova Yu. V., Malyukov S. P., Sayenko A. V., Biyatenko Yu. N.** Investigation of internal thermoelastic stresses in TiO_2 film on sapphire substrate // International Journal of Civil Engineering and Technology. 2019. Vol. 10. No. 1. Pp. 227–232.

8. **Malyukov S. P., Klunnikova Yu. V., Sayenko A. V.** Laser annealing of oxide films on the sapphire surface // Journal of Russian Laser Research. 2015. Vol. 36. No. 3. Pp. 276–280.

9. **Stoney G. G.** The tension of metallic films deposited by electrolysis // Proceedings of the Royal Society of London A. 1909. Vol. 82. No. 553. Pp. 172–175.

10. **Brown M. A., Rosakis A. J., Feng X., Huang Y., Üstündag E.** Thin film/substrate systems featuring arbitrary film thickness and misfit strain distributions. Part II: Experimental validation of the non-local stress/curvature relations // International Journal of Solids and Structures. 2007. Vol. 44. No. 6. Pp. 1755–1767.

11. **Pramanik A., Zhang L. C.** Residual stresses in silicon-on-sapphire thin film systems // International Journal of Solids and Structures. 2011. Vol. 48. No. 9. 1290–1300.

12. **Citirik E., Demirkan M. T., Karabacak T.** Stress modeling of density modulated silicon thin films using finite element // Journal of Vacuum Science and Technology A. 2015. Vol. 33. No. 2. P. 021503.

13. **Tinoco H. A., Holzer J., Pikálek T., Buchta Z., Lazar J., Chlupová A., Kruml T., Hutař P.** Estimation of mechanical parameters of thin films using finite element analysis // 20-th International Conference of Applied Mechanics. 2018. Vol. 20. April. Pp. 157–162.

14. **Rubino F., Astarita A., Carlone P.** Thermo-mechanical finite element modeling of the laser treatment of titanium cold-sprayed coatings // Coatings. 2018. Vol. 8. No. 6. P. 219.

15. **Добровинская Е., Литвинов Л., Пищик В.** Энциклопедия сапфира. Харьков: НТК «Институт материалов», 2004. 503 с.

16. **Akselrod M. S., Bruni F. J.** Modern trends in crystal growth and new applications of sapphire // Journal of Crystal Growth. 2012. Vol. 360. 1 December. Pp. 134–145.

17. **Ковба Л. М., Трунов В. К.** Рентгенофазовый анализ. 2-е изд. М.: Изд-во МГУ, 1976. 232 с.

18. **Welsch G., Boyer R., Collings E.** (Eds.). Materials properties handbook: Titanium Alloys. USA: ASM International, Materials Park OH, 1994. 517 p.

19. **Wang Y., Wang Q., Chen H., Sun J., He L.** Comparative study on crack initiation and propagation of glass under thermal loading // Materials. 2016. Vol. 9. No. 10. P. 794.

THE AUTHORS

KLUNNIKOVA Yulia V.
Southern Federal University
105 Bolshaya Sadovaya St., Rostov-on-Don, 344006, Russia
yvklunnikova@sfedu.ru
ORCID: 0000-0002-2015-3739

ANIKEEV Maxim V.
Fraunhofer SIT | ATHENE
75 Rheinstr., Darmstadt, 64295, Germany
maxim.anikeev@sit.fraunhofer.de
ORCID: 0000-0002-4959-2663

FILIMONOV Alexey V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
filimonov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-2793-5717

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КЛУННИКОВА Юлия Владимировна – *кандидат технических наук, доцент кафедры конструирования электронных средств Института нанотехнологий, электроники и приборостроения Южного Федерального университета, г. Ростов-на-Дону, Россия.*
344006, Россия, г. Ростов-на-Дону, Большая Садовая ул., 105.
vklunnikova@sfedu.ru
ORCID: 0000-0002-2015-3739

АНИКЕЕВ Максим Владимирович – *кандидат технических наук, доцент Института безопасных информационных технологий Общества Фраунгофера (члена научно-исследовательского центра «Афина») г. Дармштадт, Германия.*
Рейнштрассе, 75, г. Дармштадт, 64295, Германия
maxim.anikeev@sit.fraunhofer.de
ORCID: 0000-0002-4959-2663

ФИЛИМОНОВ Алексей Владимирович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы, соруководитель Научно-образовательного центра «Физика нанокомпозитных материалов электронной техники» Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
filimonov@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-2793-5717

Received 14.04.2022. Approved after reviewing 27.05.2022. Accepted 27.05.2022.
Статья поступила в редакцию 14.04.2022. Одобрена после рецензирования 27.05.2022. Принята 27.05.2022.

© Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University, 2022

Научная статья
УДК 532.517
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15309

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДУШНЫХ ПОТОКОВ ПРИ ОБТЕКАНИИ СИДЯЩЕГО ТЕПЛОВОГО МАНЕКЕНА В ПОМЕЩЕНИИ С ПЕРЕМЕШИВАЮЩЕЙ ВЕНТИЛЯЦИЕЙ

М. А. Засимова, А. А. Маринова, Н. Г. Иванов ✉, А. Д. Подмаркова

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ ivanov_ng@spbstu.ru

Аннотация. Выполнено численное моделирование турбулентного течения и теплообмена при обтекании воздушным потоком сидящего теплового манекена, размещенного в модельном помещении с перемешивающей вентиляцией. Расчеты проведены на основе RANS-подхода с использованием стандартной k-ε модели турбулентности. Эффекты плавучести описаны в приближении Буссинеска. Полученные расчетные данные близки к экспериментальным, хотя имеются локальные отличия по распределению температуры вблизи поверхности стенок помещения. Установлено, что без учета лучистого теплообмена невозможно правильно определить интегральный теплосъем с поверхности тела. Наряду с исследованиями режима вентиляции с преобладанием вынужденной конвекции, соответствующим эксперименту, были изучены характеристики течения и теплообмена в свободноконвективном режиме, где структура течения определяется интенсивным тепловым факелом, формирующимся над манекеном, а поле температуры стратифицировано по высоте.

Ключевые слова: вентиляция, тепловой манекен, турбулентное течение, теплообмен, естественная и вынужденная конвекция

Финансирование: Работа выполнена при финансовой поддержке гранта президента Российской Федерации МК-1762.2022.1.1.

Для цитирования: Засимова М. А., Маринова А. А., Иванов Н. Г., Подмаркова А. Д. Численное моделирование воздушных потоков при обтекании сидящего теплового манекена в помещении с перемешивающей вентиляцией // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 111–131. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15309

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15309

NUMERICAL SIMULATION OF TURBULENT AIRFLOW AND HEAT TRANSFER AROUND A SEATED THERMAL MANIKIN IN THE ROOM WITH MIXING VENTILATION

M. A. Zasimova, A. A. Marinova, N. G. Ivanov ✉, A. D. Podmarkova

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ ivanov_ng@spbstu.ru

© Засимова М. А., Маринова А. А., Иванов Н. Г., Подмаркова А. Д., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Abstract. The numerical simulation of turbulent flow and heat transfer, when air moves around a thermal manikin sitting in a model room with mixing ventilation, has been carried out. The calculations were performed on the basis of the RANS approach using the standard k-ε turbulence model. The buoyancy effects were described in the Boussinesq approximation. The obtained calculated data were close to the experimental ones, although there were local differences in the temperature distribution near the surface of the room walls. The impossibility of correct determination of the integral heat removal from the surface of the body without taking into account the radiation heat transfer was established. Along with studies in the ventilation regime with predominant forced convection, corresponding to the experiment, the characteristics of the flow and heat transfer in the free convection regime were analyzed, where the flow structure being caused by an intensive thermal plume forming above the manikin, and the temperature field being stratified in height.

Keywords: ventilation, thermal manikin, turbulent airflow, heat transfer, natural and forced convection

Funding: The research work was supported by a grant from the President of the Russian Federation (No. MK-1762.2022.1.1).

For citation: Zasimova M. A., Marinova A. A., Ivanov N. G., Podmarkova A. D., Numerical simulation of turbulent airflow and heat transfer around a seated thermal manikin in the room with mixing ventilation, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 111–131. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15309

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

Введение

Системы отопления, вентиляции и кондиционирования воздуха (*англ.* Heat, Ventilation, Air Conditioning (HVAC)) позволяют создать комфортные для человека условия в помещениях, обеспечивая заданные параметры микроклимата [1, 2]. В реальных условиях помещение практически всегда занято людьми, а также загромождено предметами мебели и прочими деталями интерьера. Расчеты систем вентиляции часто выполняются для пустых помещений, свободных от загромождений [3, 4], с целью минимизации геометрических неопределенностей. При оценке теплового комфорта и качества воздуха в помещении важную роль играет температурное поле человека или группы людей, присутствующих в этом помещении. Тепловые характеристики, как и структура течения в целом, в этом случае могут существенно изменяться. В экспериментальных исследованиях вместо живых людей (с практически невоспроизводимыми индивидуальными характеристиками) обычно используют модели, в большей или меньшей степени воспроизводящие параметры тела человека.

Модель человеческого тела может быть очень сильно упрощена; так, например, в работе [5], где экспериментально исследовалось воздухораспределение в помещении при использовании различных сценариев вентиляции, применялись лампы с тепловыделением, соответствующим телу. Однако чаще всего в исследованиях используют человекоподобные тепловые манекены (один или несколько) с контролируемыми параметрами, в том числе тепловыми условиями на поверхности тела [6]. Соответственно, при проведении численного моделирования используют виртуальные тепловые манекены, полностью или частично воспроизводящие эти параметры. Один или несколько реалистичных тепловых манекенов при расчетах воздухораспределения и оценке параметров теплового комфорта использовались, например, в работах [7 – 9].

Даже с использованием контролируемых тепловых манекенов при постановке и решении прикладных задач вентиляции возникают неопределенности, связанные с заданием большого числа заведомо неизвестных параметров, таких как количество людей в помещении, их всевозможные передвижения, точное местоположение человека в пространстве в рабочем состоянии, геометрическая конституция (точная форма) тела, теплоизоляционные свойства одежды и др. При задании всех этих параметров на осно-

© Zasimova M. A., Marinova A. A., Ivanov N. G., Podmarkova A. D., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

вании каких-либо приближенных оценок решить задачу, совместно учитывающую все перечисленные условия, практически невозможно, и обычно влияние осложняющих задачу параметров исследуют по отдельности.

Один из параметров, исследовавшийся в ряде работ, – влияние формы теплового манекена на характеристики течения и теплообмена. Ясно, что при использовании физического или виртуального теплового манекена его форму можно существенно упростить. Например, с использованием упрощенных геометрических форм манекена можно учесть загромождение помещения [10, 11]. Однако, как показано в работах [12 – 14], форма манекена может существенно повлиять на локальные характеристики течения вблизи манекена. В экспериментальной работе [12] были рассмотрены четыре формы манекена (приближенная к форме человека и три упрощенные формы: цилиндр, параллелепипед и комбинация этих фигур). В работе [13] проведены расчеты воздухообмена вблизи шести форм манекена, детализированных различным образом. В статье [14] численное моделирование проведено для задачи с тремя формами манекена (приближенная к форме человека, а также частично и полностью упрощенные формы, состоящие из параллелепипедов). В результате исследований было установлено, что для предсказания локальных характеристик необходимо использовать форму манекена, близкую к телу человека.

Расчеты воздухообмена в нестационарных условиях, когда положение тела манекена в пространстве изменяется с течением времени, проведены, в частности, в работах [15, 16]. С помощью натурного эксперимента и численного моделирования по методу крупных вихрей в работе [15] изучалось течение, формирующееся при перемещении манекена между помещениями с разной концентрацией загрязненного воздуха. В ходе эксперимента открывали дверь между помещениями и продвигали манекен через дверной проем, но при этом не учитывали изменение положения отдельных частей манекена. В работе [16] экспериментально исследовали влияние движения теплового манекена на стратификацию температурного поля, при этом изменяли скорость передвижения манекена, продолжительность его передвижения, теплосъем с поверхности манекена и кратность воздухообмена (расход воздуха в единицу времени).

Использование одетого манекена и конкретные характеристики его одежды могут существенно повлиять на теплоотдачу от его поверхности в целом (см., например, публикации [12, 17, 18]). Так, в работе [12] варьировали теплоизоляционные характеристики одежды, наличие волосяного покрова на поверхности головы и конструкцию стула, на который был посажен манекен. В статье [17] изучали влияние наличия одежды на теплоотдачу. В экспериментальной работе [18] основным параметром был тип одежды; рассмотрены варианты, когда манекена одевали в легкую летнюю одежду, в теплую зимнюю и в официальный костюм.

В работах [19, 20] учитывали процесс дыхания теплового манекена: периодическое распространение воздушной струи, создаваемой при выдохе, может изменять структуру течения вблизи манекена, а также влиять на характеристики тепло- и массообмена. В статье [19] моделировали нестационарные периодические процессы вдоха и выдоха воздуха через ноздри и рот сидящего и стоящего манекенов. Течение воздуха моделировали также внутри манекена. В статье [20] на основе RANS-подхода в стационарной постановке проведено моделирование трех фаз дыхания (вдох, выдох и пауза между ними) манекена, находящегося в стоящем положении. В обзорной статье [21] перечислены исследования, в которых было проведено численное моделирование дыхания манекена и указаны граничные условия (периодические циклы дыхания), задаваемые в соответствующих расчетах на поверхности рта манекена. Отметим, что в последнее время появился ряд публикаций, направленных на решение чрезвычайно актуальной задачи – предсказания картины распространения капель слюны, выделяющихся при дыхании или кашле (чихании) [22 – 24].

К настоящему времени накоплено большое количество экспериментальных и расчетных работ, связанных с определением структуры течения и характеристик тепло- и массообмена в вентилируемых помещениях, занятых людьми. Ведутся исследования, направленные на валидацию вычислительных методик, в которых преимущественно рассматриваются помещения без людей (см., например, работы [25 – 27]). Для постановки валидационных расчетов необходимы данные детально документированных экспериментальных тестов; для помещений с тепловым манекеном в них, таких тестов немного. В Датском

техническом университете (коммуна Люнгбю-Торбек, к северу от г. Копенгагена) в 2003 и 2007 гг. были проведены экспериментальные исследования для условий вытесняющей [28] и перемешивающей [28 – 31] вентиляции (результаты собраны в базе данных на сайте http://www.cfdbenchmarks.com/). Данные теста с вытесняющей вентиляцией использовались ранее при валидации методик численного моделирования в статьях [14, 32, 33]. Данные теста с перемешивающей вентиляцией использовались ранее в работах [34 – 36]. Условия этого теста воспроизводятся и в настоящей работе.

Цель настоящей работы состоит в численном исследовании структуры турбулентного течения и характеристик теплообмена при обтекании воздушным потоком сидящего теплового манекена в модельном помещении.

Расчеты выполнены для условий, приближенных к экспериментальным [30, 31], и результаты численного моделирования сопоставлены с данными эксперимента. Помимо валидации расчетной методики, работа направлена на анализ влияния тепловых условий на поверхности манекена (постоянная температура или постоянный удельный тепловой поток). Кроме того, в ходе параметрического исследования изучена роль различных механизмов теплопередачи.

Постановка задачи

Геометрическая модель. Модель вентилируемого помещения, в соответствии с данными экспериментальных работ [30, 31], представляет собой параллелепипед длиной $L = 2{,}44$ м (вдоль оси x), высотой $H = 2{,}46$ м (вдоль оси y) и шириной $W = 1{,}20$ м (вдоль оси z). Одна из торцевых стенок помещения открыта (отмечена на рис. 1, *a* как Inlet); через эту границу воздух поступает в помещение, и для расчетной области это считается входным отверстием. На противоположной торцевой стенке находятся два вытяжных отверстия круглой формы, с одинаковым диаметром, равным $d_{out} = 0{,}25$ м (отмечены на рис. 1,*a* как Outlet). Выходные отверстия центрированы относительно оси z, центры нижнего и верхнего отверстий расположены на расстоянии 0,6 м от пола и потолка помещения, соответственно.

В помещении размещен тепловой манекен в сидячем положении (см. рис. 1), находящийся на расстоянии 0,5 м от открытой границы (0,7 м до коленей манекена). Расстояния от поверхности манекена до боковых стенок помещения в поперечном направлении (ось z) одинаковы и составляют 0,325 м; между полом помещения и ступнями манекена имеется зазор высотой 0,002 м. Геометрия манекена взята из базы данных www.cfd-benchmarks.com/, с описанием условий и результатов эксперимента. Характерный (максимальный) размер манекена в продольном направлении (по оси x) составляет $l_m = 0{,}76$ м, в вертикальном направлении (по оси y) $h_m = 1{,}36$ м и в поперечном (по оси z) – $w_m = 0{,}55$ м. Площадь поверхности манекена $S_m^m = 1{,}60$ м^2.

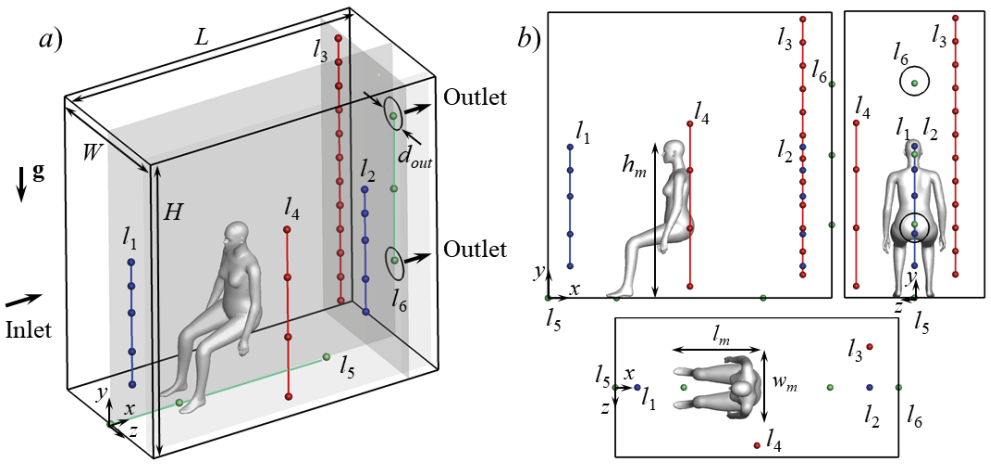


Рис. 1. Изображения расчетной модели помещения с сидящим манекеном в аксонометрии (*a*) и в плоскостях (*b*).

На линиях $l_1 - l_6$ показаны точки, в которых измеряли скорость (синий цвет) и температуру (красный и зеленый цвета) (см. работы [30, 31])

В настоящей работе геометрическая модель манекена, размещенная в указанной базе данных, никак не модифицировалась. Но как в описаниях результатов экспериментов [30, 31], так и в последующих работах, содержащих данные численного моделирования [34, 35], на приведенных там иллюстрациях заметно, что манекен отклонен относительно вертикальной оси на некоторый угол. В связи с этим можно предположить, что при постановке эксперимента положение отдельных частей манекена изменяли относительно зафиксированного в базе данных, хотя никакой информации об этом в статьях и документации не приведено. Таким образом, следует отметить некоторую неопределенность заданного расположения манекена в помещении, которая не контролируется при постановке расчетной задачи.

Положения линий $l_1 - l_6$, вдоль которых проводились измерения [30, 31], показаны на рис. 1. Отмечены точки, для которых в базе данных приведены экспериментальные значения. Вдоль линий l_1 и l_2 были измерены с помощью сферического термоанемометра значения модуля скорости; линии расположены в центральном сечении помещения $z = 0$ на удалении 0,19 м и 2,19 м от его открытой границы. С помощью термопар температуру измеряли вдоль линий l_3 и l_4, расположенных вблизи стенок помещения (соответственно $x = 2{,}19$ м, $z = -0{,}35$ м и $x = 1{,}22$ м, $z = 0{,}50$ м), а также линий l_5 и l_6 на поверхности помещения ($y = 0$, $z = 0$ и $x = L$, $z = 0$).

Физические параметры среды и граничные условия. Рассматривалось движение воздушной среды; свойства воздуха принимали при температуре 20°C и считали постоянными. Число Прандтля составляло $\mathrm{Pr} = \mu C_p/\lambda = 0{,}7$, где μ – коэффициент динамической вязкости, равный $1{,}81\cdot10^{-5}$ кг/(м·с); C_p – удельная теплоемкость воздуха при постоянном давлении, равная 1,005 кДж/(кг·К); λ – коэффициент теплопроводности, равный 25,9 мВт/(м·К).

Варианты расчетов с различными входными граничными условиями, тепловыми условиями на поверхности манекена, а также опциями физической модели приведены в табл. 1 и 2.

Рассматривали два значения расхода воздуха: 0,7970 м^3/с (значение соответствует экспериментальному [30, 31]), а также 0,0295 м^3/с. В эксперименте воздух отсасывался через выходные отверстия, а условия поступления воздуха через открытую торцевую стенку помещения обеспечивали однородность профиля. В расчетах задавалось однородное распределение входной скорости также с двумя значениями: $V_{in} = 0{,}27$ и 0,01 м/с (соответственно). Согласно условиям эксперимента [30, 31], температура воздуха на входной границе поддерживалась постоянной и равной $T_{in} = 20{,}4$ °C. Число Рейнольдса, построенное по входной скорости воздуха и ширине манекена, т. е.

$$\mathrm{Re} = \rho w_m V_{in}/\mu,$$

где ρ – плотность воздуха, равная 1,205 кг/м^3, составляло $\mathrm{Re} = 366$ и 9886 при $V_{in} = 0{,}01$ и 0,27 м/с, соответственно.

При использовании в качестве линейного масштаба высоты помещения, число Рейнольдса $\mathrm{Re}_H = \rho H V_{in}/\mu$, составляло $\mathrm{Re}_H = 1638$ и 44218 соответственно.

На твердых границах помещения задавали условие прилипания, стенки считали адиабатическими (задавали нулевой тепловой поток q_w, включающий кондуктивную и конвективную составляющие). На выходных границах задавалось постоянное давление.

На поверхности манекена, в зависимости от варианта расчета, были заданы либо постоянное значение температуры T_w, либо постоянное значение полного удельного теплового потока q_w, включающего все три составляющие (кондуктивная, конвективная и лучистая). В соответствии с условиями эксперимента, приведенными в работах [30, 31], температура на поверхности манекена поддерживалась постоянной и равной $T_w = 34$°C. Вариант расчета, максимально воспроизводящий условия эксперимента, представлен в табл. 1 как вариант 1. Число Грасгофа, построенное по высоте манекена,

$$\mathrm{Gr} = \rho^2 g\beta(T_w - T_{in}) h_m^{\,3}/\mu^2,$$

составило $\mathrm{Gr} = 5{,}06\cdot10^9$ (g – ускорение свободного падения, β – коэффициент объемного расширения, равный 0,0034 К$^{-1}$).

Таблица 1

Граничные условия для различных расчетных вариантов

Параметр	Значение для варианта						
	1-го	2-го	3-го	4-го	5-го	6-го	7-го
V_{in}, м/с	0,27				0,01		
T_w, °C	34,0		–				
q_w, Вт/м^2	–		139,3	80,5	139,3	66, 1	139,3

Обозначения: V_{in} – скорость воздушного потока на входе в помещение, T_w – температура на поверхности теплового манекена, q_w – полный удельный тепловой поток, включающий три составляющие (кондуктивная, конвективная и лучистая).

Таблица 2

Опции физической модели для расчетных вариантов

Вариант	1	2	3	4	5	6	7
Модель излучения	+	–	+	–	+	–	+
Сила тяжести	+						–

Отметим, что в работах [30, 31] часть поверхности манекена в области колен была теплоизолирована; в наших расчетах это не учитывалось ввиду отсутствия точной информации о расположении этой области.

Программа расчетов предусматривала систематическое изучение вклада различных механизмов теплопередачи в общий теплосъем с поверхности манекена. Так, в вариантах 1 – 4 преобладает вынужденная конвекция, а в 5 – 7 – свободная; при этом в вариантах 1, 3, 5, 7 учитывали вклад в теплосъем лучистого теплообмена, а в 2, 4, 6 теплообмен излучением не моделировали. Для малого значения расхода воздуха дополнительно выполнен расчет для условий нулевой гравитации (см. табл. 1 и 2, вариант 7): преобладает лучистый теплообмен, вклад естественной конвекции отсутствует. Эти условия соответствуют, например, таковым на Международной космической станции при отключении вентиляции [37, 38].

При моделировании теплового излучения воздух в помещении считали прозрачным, относительную излучательную способность (степень черноты) задавали равной 0,93 для теплового манекена и 0,83 для твердых поверхностей модели помещения.

Математическая и вычислительная модели. При описании турбулентного течения воздуха использовали RANS-подход, основанный на решении осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье – Стокса (см., например, монографию [39]). Тензор напряжений Рейнольдса рассчитывали на основе гипотезы Буссинеска, при этом турбулентную вязкость определяли стандартной k-ε моделью турбулентности. Использовалась опция “Enhanced Wall Treatment” вблизи твердых стенок. В соответствии с выбранной моделью, задавали следующие характеристики турбулентности на входной границе: интенсивность турбулентности $I = 6$ % и отношение турбулентной вязкости к молекулярной $\mu_t/\mu = 10$.

В систему уравнений, определяющих движение, входит уравнение баланса тепла, при этом сила плавучести описывается в приближении Буссинеска. Направление вектора ускорения свободного падения показано стрелкой на рис. 1,*а*.

Перенос энергии излучением учитывали с помощью доступной в ANSYS Fluent модели “Surface-to-surface” (S2S, «излучение от поверхности к поверхности»). Модель позволяет определять передачу энергии между разнонагретыми твердыми поверхностями, при этом пропускательная способность среды принимается равной нулю.

Построение расчетной сетки осуществляли в пакете ICEM CFD, построенная сетка состояла из тетраэдральных элементов, вдали от твердых поверхностей и призматических слоев вблизи них. Сетка имела сгущение вблизи поверхности манекена. Вблизи стенок помещения задавалось по 5 призматических слоев без сгущения, высота первого пристенного слоя y_p = 5 мм; вблизи поверхности манекена задавали 11 призматических слоев с коэффициентом сгущения 1,1, при этом y_p = 1 мм. С помощью средств ANSYS Fluent тетраэдральные элементы сетки были преобразованы в полиэдральные, общая размерность преобразованной сетки составила 590 тыс. ячеек. Такую сетку использовали во всех расчетах (рис. 2,*a*).

Распределение безразмерного расстояния y^+ от центра первой пристенной ячейки до стенки приведено на рис. 2, *b*, *c*. Значение величины y^+ в среднем по поверхности манекена составило 1,37, ее максимальное значение – 3,81, оно расположено на поверхности рук манекена. Среднее значение y^+ на стенках помещения, перпендикулярных осям y и z, составило 3,34, максимальные значения y^+ находились вблизи выходных отверстий и локально достигали 80.

Расчеты были выполнены с помощью гидродинамического пакета ANSYS Fluent. Дискретизация уравнений производилась со вторым порядком точности. Для связи полей давления и компонент скорости была использована схема Coupled. Представленные расчеты являются сошедшимися по невязкам в стационарной постановке.

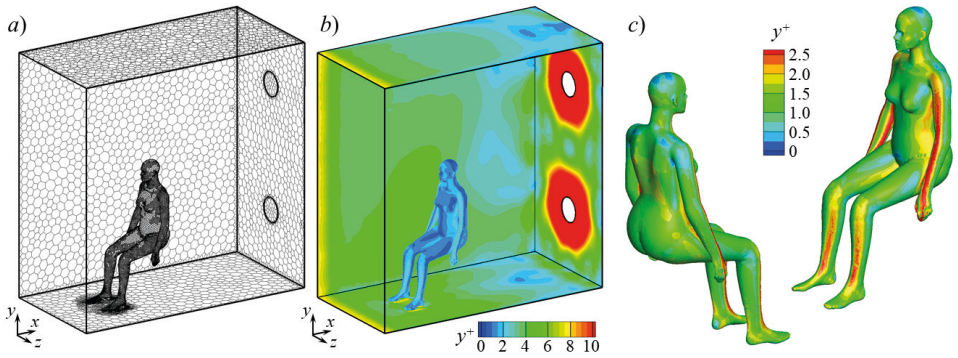


Рис. 2. Иллюстрация вычислительных аспектов: общий вид расчетной сетки (*a*), а также распределения величины y^+ по поверхностям стенок помещения (*b*) и манекена (*c*)

Результаты расчетов

Описание структуры течения и параметров теплоотдачи от поверхности манекена. Общая структура течения иллюстрируется на основе данных, полученных для варианта 1, приближенного к условиям эксперимента [30, 31]. На рис. 3 приведены линии тока, окрашенные в соответствии с модулем скорости, а также поля скорости и температуры в нескольких сечениях помещения. При набегании на препятствие (в данном случае это манекен) поток воздуха в области торса манекена подтормаживается слева и справа от него; при этом в окрестности пола образуются области ускоренного течения, в которых значения скорости достигают 0,4 м/с (см. рис. 3, *a*, *b*). За манекеном формируется обширная отрывная область – зона разрежения. Циркуляционные области медленного течения можно отметить также вблизи пола и потолка помещения, у торцевой стенки, противоположной от входа. По мере приближения к выходным отверстиям поток ускоряется, уровень скоростей достигает 10 м/с. Отметим равномерность разделения выходящего потока: расход воздуха через верхнее и нижнее выходные отверстия практически одинаков.

Температурные поля (см. рис. 3, *c*) демонстрируют прогрев воздуха в отрывной области за манекеном, где значения температуры изменяются в диапазоне от 34 °С у поверхности до 21 °С на удалении от манекена. Теплового факела над манекеном не наблюдается: он сносится интенсивным набегающим потоком воздуха. Вследствие предположения об адиабатичности стенок, налицо прогрев стенок ввиду действия теплового излучения. Это видно на рис. 3,*c*, где в качестве примера показано поле температуры на нижней стенке.

Средние по поверхности значения температуры таковы:
для верхней стенки – 21,2 °C,
для боковых стенок – 21,6 °C,
для нижней стенки – 22,0 °C,
для торцевой стенки – 21,2 °C.

Как видно на рис. 3,*c*, прогрев стенок приводит к небольшому повышению температуры воздуха в их окрестности.

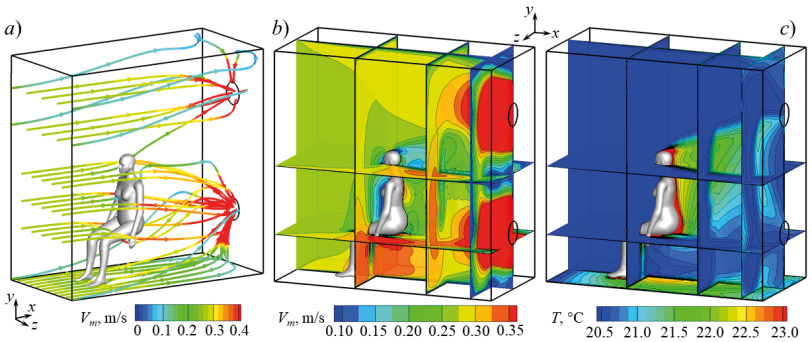


Рис. 3. Расчетная структура воздушного течения в помещении, показанная для варианта 1 (см. табл. 1) линиями тока, окрашенными в соответствии с модулем скорости (*a*), а также полями модуля скорости (*b*) и температуры (*c*) в нескольких сечениях помещения

На рис. 4,*a* показано распределение полного удельного теплового потока q_w по поверхности манекена; поток включает все три составляющие передачи теплоты: теплопроводность, конвекцию и тепловое излучение. Распределение величины q_{w_rad}, отражающей лучистую часть теплового потока, иллюстрирует рис. 4,*b*, а распределение величины q_{w_conv}, включающей кондуктивную и конвективную части – рис. 4,*c*. Наблюдается сильная пространственная неоднородность этих распределений, связанная с особенностями геометрии манекена и с характеристиками воздушного потока. Так, при обтекании набегающим холодным потоком воздуха, конвективный тепловой поток на передней поверхности манекена значительно выше, чем на задней.

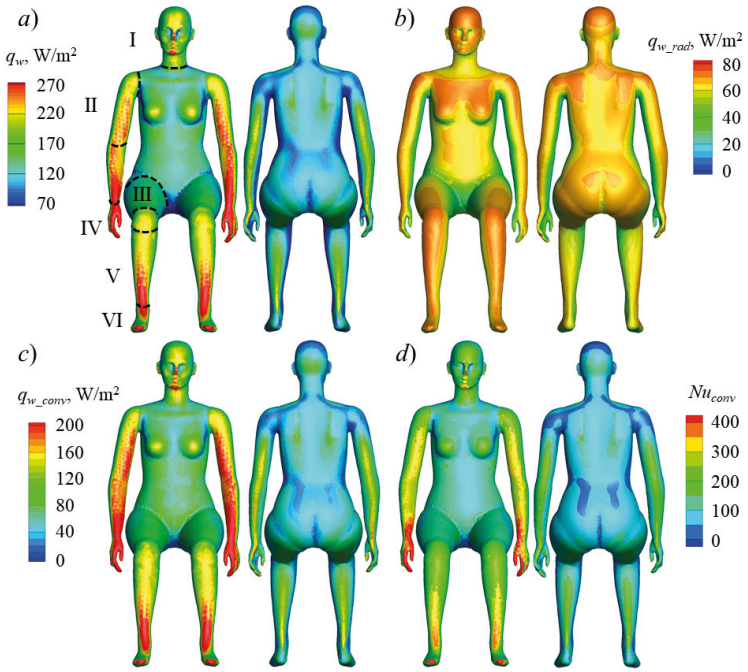


Рис. 4. Распределения тепловых потоков по поверхности манекена (вариант 1): полного (*a*), лучистого (*b*), конвективного (*c*), а также соответствующие распределения числа Нуссельта (*d*); I – VI – номера позиций элементов (см. табл. 3)

В табл. 3 приведены значения тепловых потоков, осредненных по элементам поверхности манекена (расположение элементов, пронумерованных от I до VI, показано на рис. 4, *a*; разделение на элементы при обработке расчетных данных примерно соответствует экспериментальному). Осреднение проведено по отдельности для элементов, расположенных симметрично с левой и правой сторон манекена; таким образом, общее число элементов составляет одиннадцать. Можно отметить некоторую асимметрию теплового потока, как в расчете, так и (в большей степени) в эксперименте. Асимметрию расчетных результатов можно отнести на счет некоторой несимметричности в геометрии и расчетной сетке.

Таблица 3

Значения тепловых потоков по поверхности манекена (см. рис. 4)

Поз.	Расчетное значение						Эксперимент	
	q_w, Вт/м^2		q_{w_conv}, Вт/м^2		q_{w_rad}, Вт/м^2		q_w, Вт/м^2	
	левая	правая	левая	правая	левая	правая	левая	правая
I	134,7		68,7		66,0		–	
II	156,0	156,2	98,7	98,9	57,3	57,3	129,6	122,0
III	124,4	123,9	68,2	68,5	56,2	55,4	104,5	100,0
IV	195,8	198,4	145,6	149,5	50,2	48,9	185,2	163,0
V	160,1	160,3	98,3	98,4	61,8	61,9	144,6	142,7
VI	146,0	143,8	88,1	86,7	57,9	58,1	159,7	153,4
∑	139,3		80,5		58,8		122,3	

Обозначения: q_w, q_{w_conv}, q_{w_rad} – полный, конвективный и лучистый тепловые потоки, соответственно; I – VI – номера позиций на манекене, ∑ – сумма потоков I – VI.

На рис. 4, *d* приведено распределение безразмерной теплоотдачи (число Нусельта)

$$\mathrm{Nu}_{conv} = q_{w_conv} w_m / \lambda (T_w - T_{in}).$$

По этому распределению можно отметить, что вклад кондуктивной части теплового потока в общую теплоотдачу для рассматриваемой задачи незначителен: осредненное по поверхности манекена число Нуссельта $\langle \mathrm{Nu}_{conv} \rangle = 125$. Локальный максимум конвективной теплоотдачи расположен в передней части манекена на кистях рук: в среднем теплоотдача на этом участке составляет около 150 Вт/м^2 (см. табл. 3), что соответствует $\langle \mathrm{Nu}_{conv} \rangle = 234$.

Лучистый тепловой поток слабо меняется как по высоте манекена, так и локально по его разным элементам (см. рис. 4, *b* и табл. 3), осредненное значение лучистой части теплового потока в среднем по поверхности манекена составило 58,8 Вт/м^2. Общая интегральная теплоотдача от поверхности манекена равна 139,3 Вт/м^2, а интегральный теплосъем с поверхности манекена – 223 Вт. Для рассматриваемого варианта расчета оказалось, что вклад лучистой части теплового потока в общий теплосъем составил 42 %, вклад конвективной части теплового потока – 58 % (вклад же кондуктивной части теплового потока – менее 1 %).

Сопоставление расчетных результатов с данными эксперимента. Для варианта 1, рассчитанного для условий, приближенных к экспериментальным, можно провести непосредственное сопоставление результатов расчета и данных эксперимента [30, 31]. На рис. 5, *a*, *b* приведены графики модуля скорости в центральном сечении помещения, построенные вдоль вертикальных линий l_1 и l_2 (расположение линий см. на рис. 1).

График на рис. 5, *a* демонстрирует распределение скорости вблизи входной границы, на расстоянии 0,19 м от нее. В эксперименте зафиксирована некоторая неоднородность скорости в этом сечении (измерения проводились только в нижней половине помещения). Полученное в расчете распределение скорости, в соответствии с заданным граничным условием, практически однородное, лишь вблизи твердых стенок фиксируется небольшое локальное увеличение скорости. В целом можно считать, что расчетные и экспериментальные данные хорошо согласуются. Распределение скорости, показанное вдоль линии l_2, расположенной на расстоянии 0,25 м от выходной границы, имеет два локальных максимума (скорость – примерно 1 м/с), появление которых вызвано близостью выходных отверстий; расчетные и экспериментальные данные здесь практически совпадают.

Профили температуры показаны вдоль двух вертикальных линий: l_3, расположенной в одном из углов помещения вблизи выходов (рис. 5, *c*), и l_4, находящейся вблизи манекена (рис. 5, *d*). Расчетные профили температуры практически однородны, имеет место повышение температуры у стенок примерно на один градус из-за их прогрева лучистым тепловым потоком. По данным эксперимента, профили температуры существенно неоднородны, с выраженным минимумом вблизи пола, при этом значения в точках ниже 0,5 м оказались ниже, чем входная температура T_{in} = 20,4 °C, рекомендованная в документации к экспериментальным данным и заданная при постановке расчетов. Характер экспериментальных профилей температуры в окрестности пола может свидетельствовать о некоторых недокументированных условиях эксперимента, которые невозможно воспроизвести при постановке расчетных задач. На высоте, большей 0,5 м, расчетные и экспериментальные значения температуры находятся в хорошем согласии.

На рис. 5, *e*, *f* приведено сопоставление расчетных и экспериментальных данных по температуре поверхности на линии l_5, проходящей вдоль пола, и линии l_6, проходящей вдоль торцевой стенки (она пересекает выходные отверстия). По данным, представленным на рис. 5, *e*, можно отметить локальное повышение температуры стенки вблизи ног

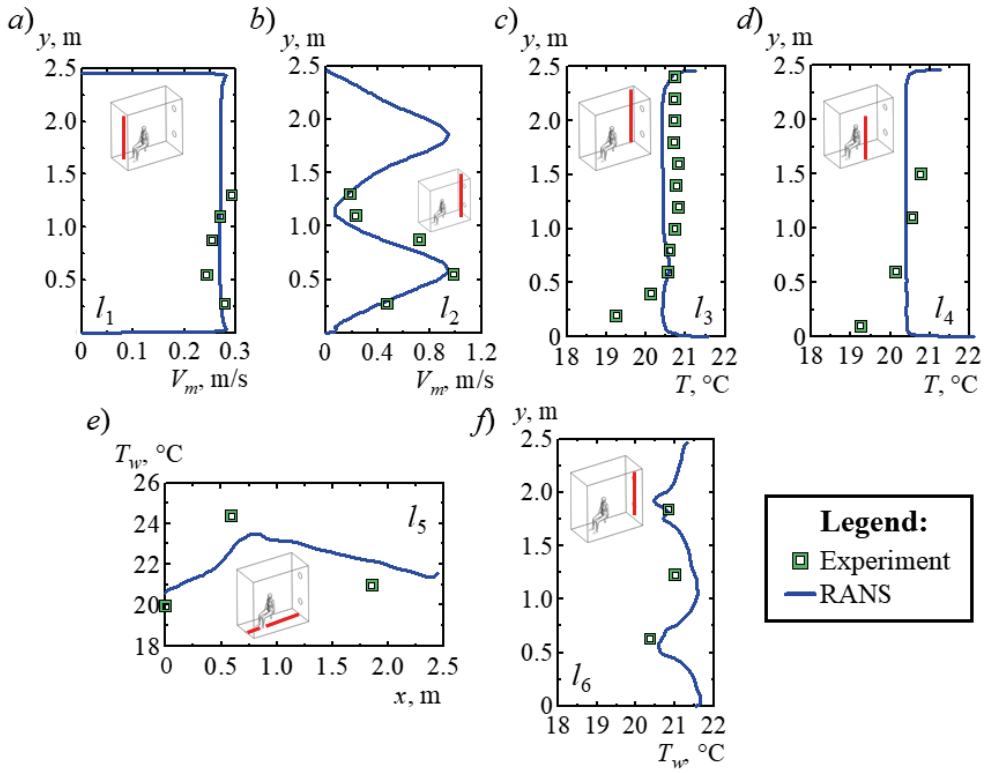


Рис. 5. Расчетные и экспериментальные профили скорости в сечениях l_1 (*a*) и l_2 (*b*); профили температуры в сечениях l_3 (*c*) и l_4 (*d*); распределения температуры по поверхности стенок помещения в сечениях l_5 (*e*) и l_6 (*f*) (см. рис. 1)

манекена. Локальные минимумы температуры на рис. 5, *f* связаны с наличием выходных отверстий. Несмотря на скудность экспериментальных данных, в результате сопоставления можно сделать вывод о хорошей согласованности расчетных и экспериментальных значений, в том числе в части прогрева стенок в условиях их внешней теплоизоляции.

База экспериментальных данных содержит сведения о средней теплоотдаче от различных элементов поверхности теплового манекена (см. табл. 3, два правых столбца). Точные положения границ этих поверхностей в документации не описаны, поэтому представленные в табл. 3 экспериментальные данные для одиннадцати элементов лишь приблизительно соответствуют результатам обработки соответствующих расчетных данных. Кроме того, при представлении экспериментальных данных, в работах [30, 31] никак не обсуждается существенная асимметрия среднего теплового потока, а различия значений, полученных для левых и правых элементов манекена, достигают 12 %. Тем не менее, можно отметить качественное согласие зафиксированных в расчете и эксперименте пространственных неоднородностей теплового потока: максимальная теплоотдача в обоих случаях на кистях рук, минимальная – в области бедер. Осредненное по всей поверхности манекена значение удельного теплосъема, по данным расчета, составило 139,3 Вт/м^2, что превышает на 14 % значение 122,3 Вт/м^2, полученное в эксперименте.

Влияние тепловых условий на поверхности манекена. Одна из причин неопределенности, возникающей при моделировании тела человека с помощью теплового манекена, – это тип тепловых граничных условий, задаваемых на поверхности. В настоящей работе для оценки чувствительности поля течения и характеристик теплообмена к этому параметру были выполнены расчеты как с заданием постоянной температуры на поверхности манекена (такие условия обеспечивались в эксперименте), так и с заданием постоянного теплового потока. Кроме того, для обоих типов граничных условий были проведены параметрические расчеты, направленные на исследование вклада излучения в теплопередачу.

Вариант 2 (см. табл. 1 и 2) полностью соответствует по постановке варианту 1, но без учета лучистого теплообмена. В вариантах 3 и 4 поставлены граничные условия второго рода, в варианте 3 модель излучения активирована, в варианте 4 излучение не учитывалось. При постановке граничных условий в варианте 3 задавалось q_w = 139,3 Вт/м^2, что соответствует значению полного теплового потока, полученному в варианте 1, а в варианте 4 – q_w = 80,5 Вт/м^2, что соответствует конвективной составляющей теплового потока, полученного в варианте 1. С учетом данных табл. 1 и 2, параметры теплоотдачи для четырех вариантов следующие:

Вариант	Параметр	Среднее значение по поверхности манекена
1	q_w, Вт/м^2	139,3
2	q_w, Вт/м^2	80,6
3	T_w, °C	34,2
4	T_w, °C	34,8

Анализ расчетных данных свидетельствует о том, что изменение тепловых граничных условий практически не влияет на общую структуру течения: поля скорости во всех четырех вариантах практически совпадают (и в целом соответствуют иллюстрациям для варианта 1 на рис. 3, *a*, *b* и 5, *a*, *b*). Можно отметить, что при отключении модели излучения происходит небольшая перестройка течения в окрестности твердых границ: в отсутствие излучения отключается механизм нагрева стенок и пристенных слоев воздуха. Соответственно, в этих слоях меняется вклад свободной конвекции и значения скорости оказываются немного меньше.

На рис. 6, *a* показано распределение удельного конвективного теплового потока по поверхности манекена для варианта 2. Сопоставление этих данных с таковыми на рис. 4,*c* позволяет отметить практически полное совпадение, что согласуется с отмеченной выше идентичностью структуры течения. Ясно, что без учета лучистого теплообмена невозможно правильно определить интегральный теплосъем с поверхности тела,

поскольку средние значения удельного полного теплового потока, полученные в вариантах 1 и 2, значительно различаются.

Распределения температуры, полученные в вариантах с заданием на поверхности постоянного теплового потока (полного или конвективного) показаны на рис. 6, *b*, *c*. Поля температуры согласуются с распределениями удельного теплового потока, полученными в вариантах с постоянной температурой поверхности (сравните рис. 4,*a* с 6,*b* и рис. 6,*a* с 6,*c*). Локальным минимумам удельного теплового потока соответствуют локальные максимумы температуры и наоборот. Следует отметить, что при задании на поверхности манекена теплового потока учет лучистого теплообмена значительно влияет на распределение температуры (сравните рис. 6, *b* и 6, *c*). Наблюдается аналогичная пространственная структура температурного поля в обоих вариантах, но расширяется диапазон изменения значений температуры в варианте без учета лучистого теплообмена и средний уровень температуры оказывается на 0,6°C выше.

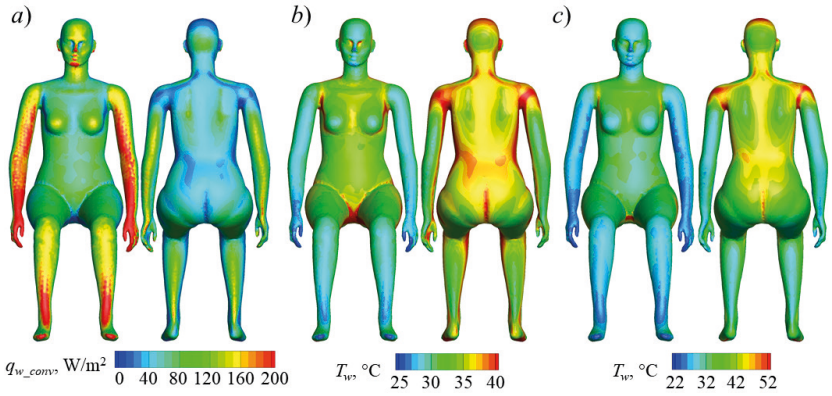


Рис. 6. Распределения полного теплового потока по поверхности манекена для варианта 2 (*a*), а также температуры по его поверхности для вариантов 3 (*b*) и 4 (*c*)

Характеристики течения и теплообмена в свободноконвективном режиме. Расход воздуха, задававшийся в эксперименте, обеспечивал существенный вклад вынужденной конвекции в формирование структуры течения и характеристик теплоотдачи. В задачах вентиляции при обтекании нагретого тела человека важную роль играют естественно-конвективные механизмы теплообмена. Для исследования вклада естественной конвекции в развивающиеся процессы, была дополнительно поставлена задача, в которой скорость воздушного потока на входе была уменьшена в 27 раз и составила $V_{in} = 0{,}01$ м/с (см. табл. 1, вариант 5). В остальном постановка соответствовала варианту 3, в котором лучистый теплообмен моделировался (см. табл. 2), а на поверхности манекена задавался полный тепловой поток.

Сопоставление структуры течения и полей температуры для режимов с преобладанием вынужденной и естественной конвекции приведено на рис. 7. При уменьшении входной скорости картина течения и, соответственно, характеристики теплоотдачи существенно меняются. В естественно-конвективном режиме воздух медленно поднимается вдоль нагретой поверхности манекена и движется вертикально вверх по направлению к потолку: над манекеном формируется интенсивный тепловой факел. Максимальное значение скорости в этом факеле достигает 0,34 м/с (см. рис. 7, *e*), что составляет примерно 40 % от характерной скорости плавучести, равной 0,79 м/с. Подъемное течение набегает на потолок, разворачивается, в силу чего перед манекеном и за ним формируются области рециркуляционного течения.

Рециркуляционная зона перед манекеном обладает большей интенсивностью, в силу несимметричной постановки задачи (слабая подача воздуха через открытую границу и его выдув через два отверстия на противоположной стенке): в нисходящей струе максимальная скорость достигает 0,19 м/с. Течение вдоль пола характеризуется значениями скорости до 0,15 м/с, при этом поток частично вовлекается в вертикальное подъемное течение, а частично проникает вдоль пола за манекен, где движется по направлению к выходам.

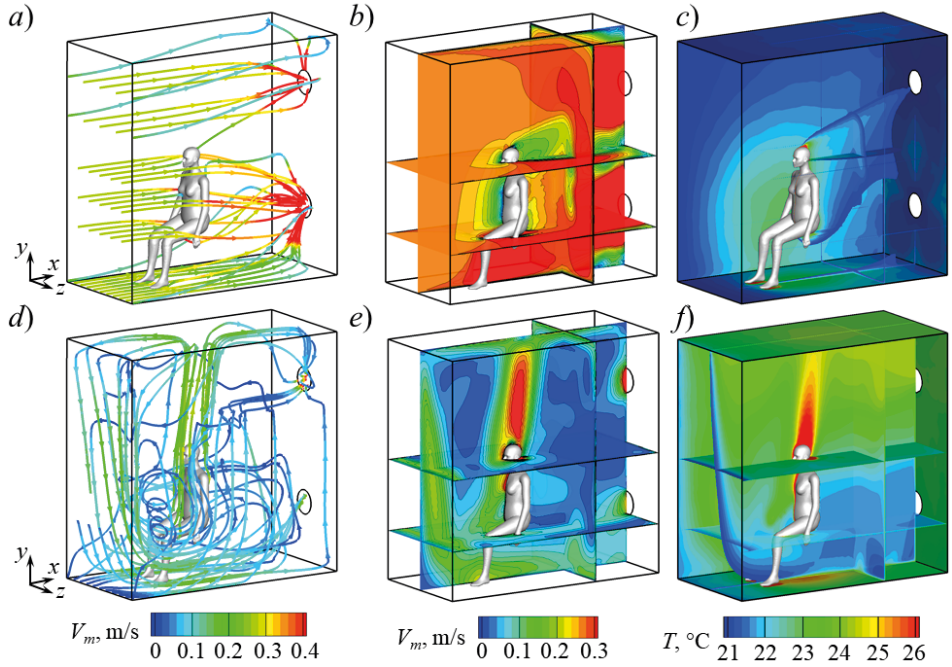


Рис. 7. Структура воздушного течения в помещении для вариантов 3 (*a* – *c*) и 5 (*d* – *f*), показанная с помощью линий тока, окрашенных в соответствии с модулем скорости (*a*, *d*), а также полей модуля скорости (*b*, *e*) и температуры (*c*, *f*) в нескольких сечениях помещения

Естественноконвективный режим характеризуется стратификацией температуры по высоте (см. рис. 7, *f*): в верхней области помещения поток прогревается от манекена, а в нижней области значения температуры близки к входному. Локальные максимумы температуры наблюдаются в температурных пограничных слоях у поверхности манекена, а также в тепловом факеле. В целом температура воздуха выше в варианте 5, чем в варианте 3.

На рис. 8 сопоставлены распределения температуры и теплового потока по поверхности манекена для режимов с преобладанием вынужденной и естественной конвекции. Как и следовало ожидать, слабая интенсивность естественноконвективного течения приводит к снижению теплоотдачи, по сравнению с обтеканием манекена в режиме вынужденной конвекции (см. рис. 8, *c* и *f*). Соответственно, заметно (в среднем на 4,3 °C) повышается температура поверхности манекена (рис. 8, *a* и *d*): осредненные по поверхности значения температуры составляют T_w = 34,2 °C для варианта 3 и T_w = 38,5 °C для варианта 5. Расположение же локальных экстремумов температуры – максимумов в области торса и предплечья, минимумов в области рук и ног – при этом одинаково. Повышение температуры поверхности сопровождается интенсификацией теплообмена излучением, и при задании в обоих вариантах одного и того же значения полного теплового потока происходит перераспределение его составляющих: в варианте 3 доля лучистой части теплового потока составила 42,5 %, конвективной – 57,5 %, а в варианте 5 соотношение между лучистой и конвективной частями составило 52,5 и 47,5 % соответственно (табл. 4).

Наряду с вариантом 5, для условий малого расхода (V_{in} = 0,01 м/с) были рассмотрены еще два случая:

вариант 6 без учета излучения, с заданием на поверхности манекена теплового потока, равного конвективной составляющей теплового потока, полученного в варианте 5 (q_w = 66,1 Вт/м^2);

вариант 7 для условий невесомости (постановка соответствует варианту 5, но ускорение свободного падения принято равным нулю).

Поля скорости и температуры для этих вариантов показаны на рис. 9, а распределения температуры по поверхности манекена – на рис. 10; интегральные параметры теплоотдачи приведены в табл. 4. Видно, что результаты, полученные в варианте 6, несколько отличаются от данных для варианта 5: как и в случае вынужденноконвективного режи-

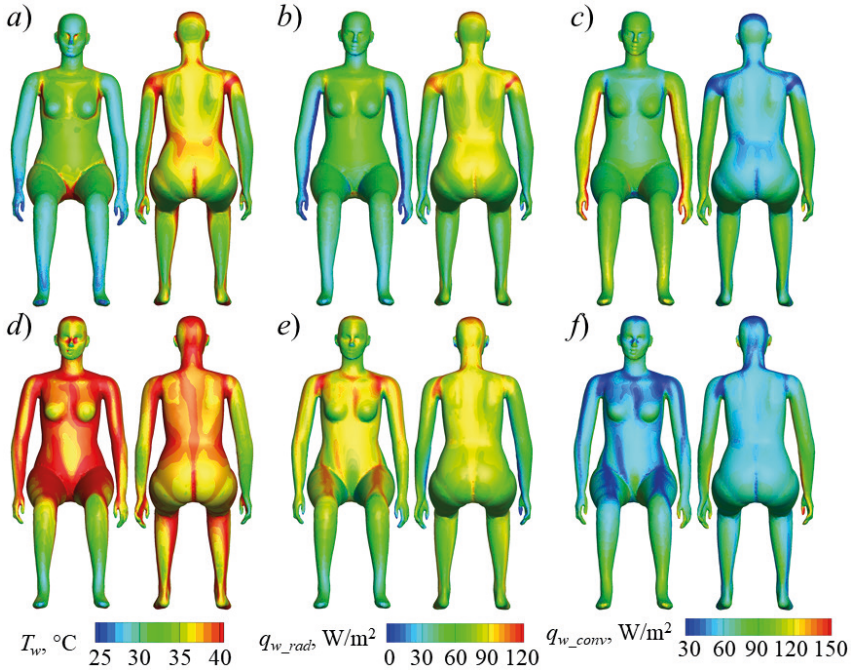


Рис. 8. Поля температуры (*a*, *d*), лучистого (*b*, *e*) и конвективного (*c*, *f*) тепловых потоков по поверхности манекена; представлены результаты расчетов по вариантам 3 (*a* – *c*) и 5 (*d* – *f*)

Таблица 4

Параметры теплоотдачи от поверхности манекена

Вариант	T_w	q_{w_rad}	q_{w_conv}	q_{w_rad}/q_w	q_{w_conv}/q_w
	°C	Вт/м²		%	
3	34,2	59,2	80,1	42,5	57,5
5	38,5	73,2	66,1	52,5	47,5
6	38,6	–	66,1	–	100
7	50,2	114,5	24,8	82,2	17,8

ма (рассмотрен ранее), исключение излучения из анализа не позволяет описать рост температуры стенок и прогрев пристенных областей. В случае естественной конвекции отсутствие прогретых пристенных слоев воздуха в большей степени меняет структуру течения, снижая значения скорости у пола; это сопровождается усилением температурной стратификации (см. рис. 9, *c*). Средняя по поверхности манекена температура при этом практически одинакова: около 38,5°C (см. табл. 4).

В варианте 7 течение практически отсутствует (см. рис. 9, *b*) и суммарная доля кондуктивного и конвективного механизмов теплоотдачи составила 17,8 %. Основной вклад в теплопередачу вносит теплообмен излучением, доля которого равна 82,2 %. Стенки помещения при этом заметно прогреваются: в варианте 7 температура, осредненная по поверхности стенок помещения, составила 27,7 °C, в то время как в базовом варианте 5 она равна 23,8 °C. Температура манекена, осредненная по поверхности, составила 50,2 °C (локальные значения находятся в диапазоне от 35,4 до 151,4 °C). Такое высокое значение температуры соответствуют предельному в аварийной ситуации отключения принудительной вентиляции в кабине космического корабля, совершающего орбитальный полет (например, на Международной космической станции), без учета механизмов терморегуляции человека.

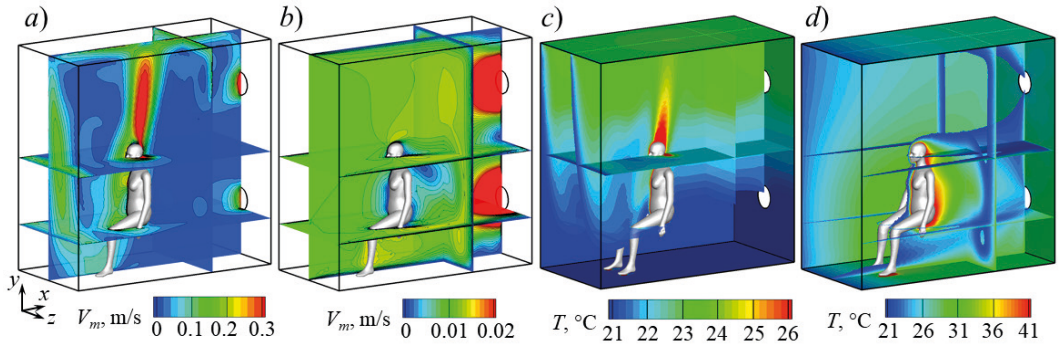


Рис. 9. Поля модуля скорости (*a*, *b*) и температуры (*c*, *d*), полученные в расчетах по вариантам 6 (*a*, *c*) и 7 (*b*, *d*) в нескольких сечениях помещения

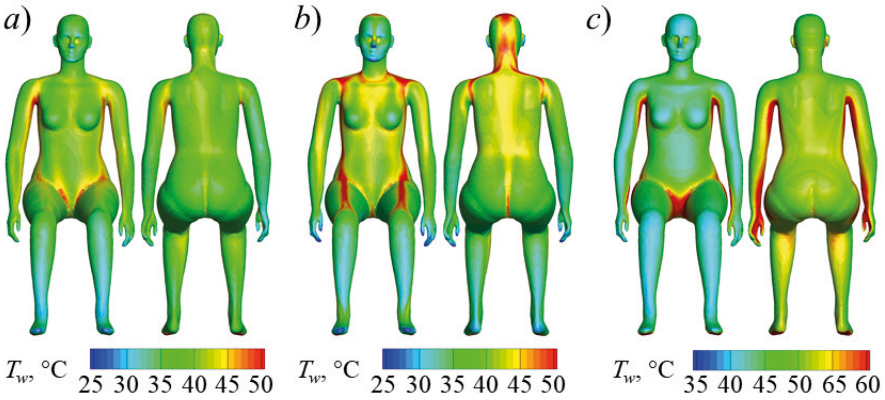


Рис. 10. Распределения температуры по поверхности манекенов, полученные в расчетах по вариантам 5 (*a*), 6 (*b*) и 7 (*c*)

Заключение

В работе представлены результаты численного моделирования трехмерного турбулентного течения и теплообмена при обтекании воздушным потоком сидящего теплового манекена, размещенного в модельном помещении с перемешивающей вентиляцией. Расчеты проведены в стационарной постановке на основе решения уравнений Рейнольдса, замкнутых стандартной k-ε моделью турбулентности; эффекты плавучести описывалась в приближении Буссинеска; учет переноса энергии излучением осуществлялся с помощью модели Surface-to-surface. Распределения скорости и температуры воздуха в помещении, полученные в результате численного моделирования, качественно и количественно соответствуют представленным в литературе экспериментальным данным. Расчетные значения удельного теплосъема с поверхности манекена оказались несколько выше, чем экспериментальные.

В ходе параметрических исследований были выполнены расчеты как с заданием на поверхности манекена постоянной температуры (что соответствует условиям эксперимента), так и с заданием постоянного теплового потока. Было установлено, что изменение тепловых граничных условий при согласованности общего тепловыделения практически не влияет на общую структуру течения. Для обоих типов граничных условий было исследовано влияние вклада излучения в теплопередачу. Показано, что без учета лучистого теплообмена невозможно правильно определить интегральный теплосъем с поверхности тела: доля лучистого теплового потока превышала 40 %. Кроме того, учет излучения влияет на рассчитываемую температуру стенок помещения и движение воздуха в пристенных слоях.

Наряду с исследованиями режима вентиляции с преобладанием вынужденной конвекции (режим соответствовал эксперименту), были изучены характеристики течения и теплообмена в свободноконвективном режиме. Установлено, что в условиях преобладания естественной конвекции структура течения определяется интенсивным тепловым факелом, формирующимся над манекеном, а поле температуры стратифицировано по высоте. Естественно-конвективный режим с течением воздуха слабой интенсивности характеризуется меньшими значениями теплоотдачи, по сравнению с обтеканием манекена в режиме вынужденной конвекции, что сопровождается повышением температуры поверхности и интенсификацией теплообмена излучением.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Гримитлин М. И.** Распределение воздуха в помещениях. СПб.: Изд-во «АВОК Северо-Запад», 2004. 320 с.

2. **Awbi H. S.** Ventilation of buildings. London: Taylor & Francis Group (Spon Press), 2005. 522 p.

3. **Hurnik M., Blaszczok M., Popiolek Z.** Air distribution measurement in a room with a sidewall jet: a 3D benchmark test for CFD validation // Building and Environment. 2015. Vol. 93. Part 2. November. Pp. 319–330.

4. **Markov D., Ivanov N., Pichurov G., Zasimova M., Stankov P., Smirnov E., Simova I., Ris V., Angelova R., Velichkova R.** On the procedure of draught rate assessment in indoor spaces // Applied Sciences. 2020. Vol. 10. No. 15. P. 5036.

5. **Yamasawa H., Kobayashi T., Yamanaka T., Choi N, Matsuzaki M.** Experimental investigation of difference in indoor environment using impinging jet ventilation and displacement ventilation systems // International Journal of Ventilation. Published 27 Jan. 2021 (18 p.) https://doi.org/10.1080/14733315. 2020. 1864572.

6. **Nilsson H. O.** Comfort climate evaluation with thermal manikin methods and computer simulation models. Ph. D thesis. Royal Institute of Technology. Department of Civil and Architectural Engineering. Sweden, 2004. 202 p.

7. **Kilic M., Sevilgen G.** Evaluation of heat transfer characteristics in an automobile cabin with a virtual manikin during heating period // Numerical Heat Transfer. Part A. 2009. Vol. 56. No. 6. Pp. 515–539.

8. **Yang C., Zhang X., Yao Z., He F.** The Large Eddy Simulation and stability analysis of flow field in a generic cabin // Procedia Engineering. 2015. Vol. 121. Pp. 1749–1756.

9. **Croitoru C., Nastase I., Bode F., Cojocaru G.** Assessment of virtual thermal manikins for thermal comfort numerical studies. Verification and validation // E3S Web of Conferences. 2019. Vol. 111. CLIMA 2019 Congress. P. 02018.

10. **Kabanshi A., Wigö H., Sandberg M.** Experimental evaluation of an intermittent air supply system – Part 1: Thermal comfort and ventilation efficiency measurements // Building and Environment. 2016. Vol. 95. January. Pp. 240–250.

11. **Villi G., De Carli M.** Detailing the effects of geometry approximation and grid simplification on the capability of a CFD model to address the benchmark test case for flow around a computer simulated person // Building Simulation. 2014. Vol. 7. No. 1. Pp. 35–55.

12. **Zukowska D., Melikov A., Popiolek Z.** Thermal plume above a simulated sitting person with different complexity of body geometry // Proceedings of Roomvent 2007 (Conference at Helsinki, 13–15 June, 2007). Finland, 2007. Vol. 3. Pp. 191–198.

13. **Yan Y., Li X., Yang L., Tu J.** Evaluation of manikin simplification methods for CFD simulations in occupied indoor environments // Energy and Buildings. 2016. Vol. 127. 1 September. Pp. 611–626.

14. **Степашева Е. Д., Засимова М. А., Иванов Н. Г.** Влияние формы теплового манекена на течение и теплообмен в модельном помещении с вытесняющей вентиляцией // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 3. С. 94–111.

15. **Saarinen P. E., Kalliomäki P., Tang J. W., Koskela H.** Large Eddy Simulation of air escape through a hospital isolation room single hinged doorway – validation by using tracer gases and simulated smoke videos // PLoS ONE. 2015. Vol. 10. No. 7. P. e0130667.

16. **Feng L., Zeng F., Li R., Ju R., Gao N.** Influence of manikin movement on temperature stratification in a displacement ventilated room // Energy and Buildings. 2021. Vol. 234. 1 March. P. 110700.

17. **Oguro M., Arens E., de Dear R. J., Zhang H., Katayama T.** Convective heat transfer coefficients and clothing insulations for parts of the clothed human body under airflow conditions // Journal of Architecture and Planning (Transactions of AIJ). 2002. Vol. 67. No. 561. Pp. 21–29.

18. **Oliveira A. V. M., Branco V. J., Gaspar A. R., Quintela D. A.** Measuring thermal insulation of clothing with different manikin control methods. Comparative analysis of the calculation methods // Proceedings of the 7th International Thermal Manikin and Modelling Meeting (at University of Coimbra, Portugal). September, 2008. 7 p.

19. **Wang C., Yoo S.-J., Tanabe S., Ito K.** Investigation of transient and heterogeneous microclimate around a human body in an enclosed personalized work environment // Energy and Built Environment. 2020. Vol. 1. No. 4. Pp. 423–431.

20. **Ivanov M., Mijorski S.** CFD modelling of flow interaction in the breathing zone of a virtual thermal manikin // Energy Procedia. 2017. Vol. 112. March. Pp. 240–251.

21. **Gao N. P., Niu J. L.** CFD Study of the thermal environment around a human body: A review // Indoor and Built Environment. 2005. Vol. 14. No. 1. Pp. 5–16.

22. **Yan Y., Li X., Tu J.** Thermal effect of human body on cough droplets evaporation and dispersion in an enclosed space // Building and Environment. 2019. Vol. 148. 15 January. Pp. 96–106.

23. **Gao N., Niu J., Morawska L.** Distribution of respiratory droplets in enclosed environments under different air distribution methods // Building Simulation. 2008. Vol. 1. No. 4. Pp. 326–335.

24. **Xu C., Wei X., Liu L., Su L., Liu W., Wang Y., Nielsen P. V.** Effects of personalized ventilation interventions on airborne infection risk and transmission between occupants // Building and Environment. 2020. Vol. 180. August. P. 107008.

25. **Van Hooff T., Blocken B., Tominaga Y.** On the accuracy of CFD simulations of cross-ventilation flows for a generic isolated building: comparison of RANS, LES and experiments // Building and Environment. 2017. Vol. 114. March. Pp. 148–165.

26. **Засимова М. А., Иванов Н. Г., Марков Д.** Численное моделирование циркуляции воздуха в помещении при подаче из плоской щели. Часть 1: отработка применения вихреразрешающего подхода с использованием периодической постановки // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 56–74.

27. **Засимова М. А., Иванов Н. Г., Марков Д.** Численное моделирование циркуляции воздуха в помещении при подаче из плоской щели. Часть 2: LES-расчеты для помещения конечной ширины // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2020. Т. 13. № 3. С. 75–92.

28. **Nielsen P. V., Murakami S., Kato S., Topp C., Yang J.-H.** Benchmark tests for a computer simulated person. Aalborg University, Denmark: Indoor Environmental Engineering, 2003. October. 7 p. ISSN 1395-7953 R0307.

29. **Topp C., Hesselholt P., Trier M. R., Nielsen P. V.** Influence of geometry of thermal manikins on room airflow // Proceedings of ISIAQ 7th International Conference “Healthy Buildings 2003”. Singapore, December 7–22, 2003. 6 p.

30. **Nilsson H., Brohus H., Nielsen P.** Benchmark test for a computer simulated person – manikin heat loss for thermal comfort evaluation. Aalborg University, Denmark: Indoor Environmental Engineering, Aalborg University, 2007. 7 p.

31. **Nilsson H., Brohus H., Nielsen P.** CFD modeling of thermal manikin heat loss in a comfort evaluation benchmark test // Proceedings of Roomvent 2007 (Conference at Helsinki, 13 – 15 June, 2007). Finland, 2007. 7 p.

32. **Taghinia J. H., Rahman M. M., Lu X.** Effects of different CFD modeling approaches and simplification of shape on prediction of flow field around manikin // Energy and Buildings. 2018. Vol. 170. 1 July. Pp. 47–60.

33. **Deevy M., Sinai Y., Everitt P., Voigt L., Gobeau N.** Modelling the effect of an occupant on displacement ventilation with computational fluid dynamics // Energy and Buildings. 2008. Vol. 40. No. 3. Pp. 255–264.

34. **Martinho N., Lopes A., Silva M.** CFD modelling of benchmark tests for flow around a detailed computer simulated person // Proceedings of the 7th International Thermal Manikin and Modelling Meeting (at University of Coimbra, Portugal). September, 2008. 6 p.

35. **Martinho N., Lopes A., da Silva M. G.** Evaluation of errors on the CFD computation of air flow and heat transfer around the human body // Building and Environment. 2012. Vol. 58. December. Pp. 58–69.

36. **Siodlaczek M., Gaedtke M., Simonis S., Schweiker M., Homma N., Krause M. J.** Numerical evaluation of thermal comfort using a large eddy lattice Boltzmann method // Building and Environment. 2021. Vol. 192. April. P. 107618.

37. **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.

38. **Ivanov N. G., Telnov D. S., Smirnov E. M., Son C. H.** Propagation of CO_2 field after fire extinguisher discharge: A numerical study // Proceedings of the 41st International Conference on Environmental Systems. American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA); Portland, Oregon, July 2011. Report No. AIAA 2011-5078 (8 p.).

39. **Wilcox D. C.** Turbulence modeling for CFD. 3-th Ed. La Cacada, California: DCW Industries, Inc., 2006. 515 p.

REFERENCES

1. **Grimitlin M. I.,** Raspredelenie vozdukha v pomeshcheniyakh [Air distribution in the rooms], 3rd Ed., AVOK Severo-Zapad, St. Petersburg, 2004 (in Russian).

2. **Awbi H. S.,** Ventilation of buildings, Taylor & Francis Group (Spon Press), London, 2005.

3. **Hurnik M., Blaszczok M., Popiolek Z.,** Air distribution measurement in a room with a sidewall jet: A 3D benchmark test for CFD validation, Build. Environ. 93-2 (November) (2015) 319–330.

4. **Markov D., Ivanov N., Pichurov G., et al.,** On the procedure of draught rate assessment in indoor spaces, Appl. Sci. 10 (15) (2020) 5036.

5. **Yamasawa H., Kobayashi T., Yamanaka T., et al.,** Experimental investigation of difference in indoor environment using impinging jet ventilation and displacement ventilation systems, Int. J. Vent., Publ, 27 Jan. 2021 (18 p.) https://doi.org/10.1080/ 14733315. 2020. 1864572.

6. **Nilsson H. O.,** Comfort climate evaluation with thermal manikin methods and computer simulation models. Ph. D thesis, Royal Inst. Technol., Depart. of Civil and Architect. Eng., Sweden, 2004.

7. **Kilic M., Sevilgen G.,** Evaluation of heat transfer characteristics in an automobile cabin with a virtual manikin during heating period, Numer. Heat Transf. A. 56 (6) (2009) 515–539.

8. **Yang C., Zhang X., Yao Z., He F.,** The Large Eddy Simulation and stability analysis of flow field in a generic cabin, Proc. Eng. 121 (2015) 1749–1756.

9. **Croitoru C., Nastase I., Bode F., Cojocaru G.,** Assessment of virtual thermal manikins for thermal comfort numerical studies. Verification and validation, E3S Web Conf. 111 (CLIMA 2019 Congress) (2019) 02018.

10. **Kabanshi A., Wigö H., Sandberg M.,** Experimental evaluation of an intermittent air supply system. P. 1: Thermal comfort and ventilation efficiency measurements, Build. Environ. 95 (January) (2016) 240–250.

11. **Villi G., De Carli M.,** Detailing the effects of geometry approximation and grid simplification on the capability of a CFD model to address the benchmark test case for flow around a computer simulated person, Build. Simul. 7 (1) (2014) 35–55.

12. **Zukowska D., Melikov A., Popiolek Z.,** Thermal plume above a simulated sitting person with different complexity of body geometry, Proc. Roomvent 2007 (Conf. at Helsinki, 13–15 June, 2007). 3 (2007) 191–198.

13. **Yan Y., Li X., Yang L., Tu J.,** Evaluation of manikin simplification methods for CFD simulations in occupied indoor environments, Energy Build. 127 (1 September) (2016) 611–626.

14. **Stepasheva E. D., Zasimova M. A., Ivanov N. G.,** Thermal manikin shape influence on airflow and heat transfer in the model room with displacement ventilation, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 14 (3) (2021) 90–106.

15. **Saarinen P. E., Kalliomäki P., Tang J. W., Koskela H.,** Large Eddy Simulation of air escape through a hospital isolation room single hinged doorway – validation by using tracer gases and simulated smoke videos, PLoS ONE. 10 (7) (2015) e0130667.

16. **Feng L., Zeng F., Li R., et al.,** Influence of manikin movement on temperature stratification in a displacement ventilated room, Energy Build. 234 (1 March) (2021) 110700.

17. **Oguro M., Arens E., de Dear R.J., et al.,** Convective heat transfer coefficients and clothing insulations for parts of the clothed human body under airflow conditions, J. Archit. Plan. (Trans. AIJ).

67 (561) (2002) 21–29.

18. **Oliveira A. V. M., Branco V. J., Gaspar A. R., Quintela D. A.,** Measuring thermal insulation of clothing with different manikin control methods. Comparative analysis of the calculation methods, Proc. 7th Int. Thermal Manikin and Model. Meeting (at Univ. of Coimbra, Portugal), September, 2008.

19. **Wang C., Yoo S.-J., Tanabe S., Ito K.,** Investigation of transient and heterogeneous microclimate around a human body in an enclosed personalized work environment, Energy Built Environ. 1 (4) (2020) 423–431.

20. **Ivanov M., Mijorski S.,** CFD modelling of flow interaction in the breathing zone of a virtual thermal manikin, Energy Proc. 112 (March) (2017) 240–251.

21. **Gao N. P., Niu J. L.,** CFD Study of the thermal environment around a human body: A review, Indoor Built Environ. 14 (1) (2005) 5–16.

22. **Yan Y., Li X., Tu J.,** Thermal effect of human body on cough droplets evaporation and dispersion in an enclosed space, Build. Environ. 148 (15 January) (2019) 96–106.

23. **Gao N., Niu J., Morawska L.,** Distribution of respiratory droplets in enclosed environments under different air distribution methods, Build. Simul. 1 (4) (2008) 326–335.

24. **Xu C., Wei X., Liu L., et al.,** Effects of personalized ventilation interventions on airborne infection risk and transmission between occupants, Build. Environ. 180 (August) (2020) 107008.

25. **Van Hooff T., Blocken B., Tominaga Y.,** On the accuracy of CFD simulations of cross-ventilation flows for a generic isolated building: comparison of RANS, LES and experiments, Build. Environ. 114 (March) (2017) 148–165.

26. **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 State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 56–74.

27. **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 State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 13 (3) (2020) 75–92.

28. **Nielsen P. V., Murakami S., Kato S., et al.,** Benchmark tests for a computer simulated person, Indoor Environmental Engineering, Aalborg University, Denmark, 2003.

29. **Topp C., Hesselholt P., Trier M. R., Nielsen P. V.,** Influence of geometry of thermal manikins on room airflow, Proc. ISIAQ 7th Int. Conf. “Healthy Buildings 2003”, Singapore, December 7–22, 2003.

30. **Nilsson H., Brohus H., Nielsen P.,** Benchmark test for a computer simulated person – manikin heat loss for thermal comfort evaluation, Indoor Environmental Engineering, Aalborg University, Denmark, 2007.

31. **Nilsson H., Brohus H., Nielsen P.,** CFD modeling of thermal manikin heat loss in a comfort evaluation benchmark test, Proc. Roomvent 2007 (Conf. at Helsinki, 13–15 June, 2007), 2007.

32. **Taghinia J. H., Rahman M. M., Lu X.,** Effects of different CFD modeling approaches and simplification of shape on prediction of flow field around manikin, Energy Build. 170 (1 July) (2018) 47–60.

33. **Deevy M., Sinai Y., Everitt P., et al.,** Modelling the effect of an occupant on displacement ventilation with computational fluid dynamics, Energy Build. 40 (3) (2008) 255–264.

34. **Martinho N., Lopes A., Silva M.,** CFD modelling of benchmark tests for flow around a detailed computer simulated person, Proc. 7th Int. Thermal Manikin and Model. Meeting (at Univ. of Coimbra, Portugal). September, 2008.

35. **Martinho N., Lopes A., da Silva M. G.,** Evaluation of errors on the CFD computation of air flow and heat transfer around the human body, Build. Environ. 58 (December) (2012) 58–69.

36. **Siodlaczek M., Gaedtke M., Simonis S., et al.,** Numerical evaluation of thermal comfort using a large eddy lattice Boltzmann method, Build. Environ. 192 (April) (2021) 107618.

37. **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. Vent. 5 (2) (2006) 219–228.

38. **Ivanov N. G., Telnov D. S., Smirnov E. M., Son C. H.,** Propagation of CO_2 field after fire extinguisher discharge: A numerical study, Proc. 41st Int. Conf. Environ. Syst. (AIAA); Portland, Oregon, July 2011. Rep. AIAA 2011-5078.

39. **Wilcox D. C.,** Turbulence modeling for CFD, 3-th Ed., DCW Industries, Inc., California, La Cacada, 2006.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗАСИМОВА Марина Александровна – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
zasimova_ma@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-4103-6574

МАРИНОВА Александра Андреевна – *студентка Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sanmarinova@gmail.com
ORCID: 0000-0002-9612-5814

ИВАНОВ Николай Георгиевич – *кандидат физико-математических наук, директор Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики, заведующий научно-исследовательской лабораторией гидроаэродинамики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ivanov_ng@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-9897-5401

ПОДМАРКОВА Анна Дмитриевна – *аспирантка Высшей школы прикладной математики и вычислительной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ann.podmarkova@mail.ru
ORCID: 0000-0002-8329-7094

THE AUTHORS

ZASIMOVA Marina A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
zasimova_ma@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-4103-6574

MARINOVA Alexandra A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
sanmarinova@gmail.com
ORCID: 0000-0002-9612-5814

IVANOV Nikolay G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ivanov_ng@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-9897-5401

PODMARKOVA Anna D.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ann.podmarkova@mail.ru
ORCID: 0000-0002-8329-7094

Статья поступила в редакцию 16.06.2022. Одобрена после рецензирования 28.06.2022. Принята 28.06.2022.
Received 16.06.2022. Approved after reviewing 28.06.2022. Accepted 28.06.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Физическая электроника

Научная статья
УДК 621.385.6
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15310

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ПОТОКА В ГИРОТРОНЕ С УЧЕТОМ ШЕРОХОВАТОСТИ ПОВЕРХНОСТИ КАТОДА И ТЕПЛОВЫХ ЭФФЕКТОВ В ЭЛЕКТРОННОЙ ПУШКЕ

О. И. Лукша ✉, П. А. Трофимов, А. Г. Малкин

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ louksha@rphf.spbstu.ru

Аннотация. Выполнен трехмерный траекторный анализ в электронно-оптической системе гиротрона с частотой 74,2 ГГц и выходной мощностью примерно 100 кВт, с учетом шероховатости поверхности термоэмиссионного катода и тепловых эффектов, вызванных его нагревом. Для учета шероховатостей поверхности катода микронного размера использован новый подход, основанный на использовании стандартных инструментов, доступных в программе трехмерного моделирования при задании параметров термоэлектронной эмиссии. Сопоставление расчетных данных с экспериментальными позволило уточнить закономерности влияния разброса начальных скоростей и изменения геометрии катодного узла при его нагреве на параметры электронного потока, формируемого в электронно-оптической системе гиротрона.

Ключевые слова: СВЧ электроника, гиротрон, винтовой электронный поток, катод, шероховатость поверхности, нагрев

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 22-29-00136). Часть результатов была получена с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютерного центра СПбПУ (http://www.scc.spbstu.ru).

Для цитирования: Лукша О. И., Трофимов П. А., Малкин А. Г. Моделирование электронного потока в гиротроне с учетом шероховатости поверхности катода и тепловых эффектов в электронной пушке // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 132–142. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15310

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15310

SIMULATION OF AN ELECTRON BEAM IN A GYROTRON TAKING INTO ACCOUNT THE CATHODE SURFACE ROUGHNESS AND THERMAL EFFECTS IN THE ELECTRON GUN

O. I. Louksha ✉, P. A. Trofimov, A. G. Malkin

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ louksha@rphf.spbstu.ru

Abstract. In the paper, a 3D trajectory analysis taking into account the surface roughness

© Лукша О. И., Трофимов П. А., Малкин А. Г., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

of the thermionic cathode and thermal effects caused by its heating has been performed in the electron-optical system of a gyrotron with a frequency of 74,2 GHz and an output power of approximately 100 kW. A new approach based on the use of standard settings available in the 3D simulation software when the model parameters of thermionic emission being given, was used for consideration of the micron-sized cathode surface roughness. A comparison between the calculated and experimental data made it possible to clarify the regularities of the influence of the initial velocity spread and the change of geometry of the cathode assembly caused by its heating on the parameters of the electron beam formed in the electron-optical gyrotron system.

Keywords: microwave electronics, gyrotron, helical electron beam, cathode, surface roughness, heating

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-29-00136). The results were obtained using the computing resources of the Supercomputer Center of the Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University (http://www.scc.spbstu.ru).

For citation: Louksha O. I., Trofimov P. A., Malkin A. G., Simulation of an electron beam in a gyrotron taking into account the cathode surface roughness and thermal effects in the electron gun, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 132–142. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15310

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

Введение

Гиротроны сегодня занимают лидирующее положение среди источников мощного СВЧ-излучения в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах длин волн. Они используются, в частности, для нагрева высокотемпературной плазмы и управления током в установках управляемого термоядерного синтеза, где требуются гиротроны мегаваттного уровня выходной мощности, работающие в непрерывном и длинноимпульсном режимах [1 – 3]. Эффективность работы этих приборов и их предельные достижимые параметры зависят от качества винтового электронного потока (ВЭП), поступающего в резонатор. Параметры ВЭП определяются на этапе разработки гиротрона в результате численного траекторного анализа в электронно-оптической системе (ЭОС), наиболее распространенным вариантом которой в настоящее время является адиабатическая система, включающая магнетронно-инжекторную пушку (МИП) с термокатодом и область магнитной компрессии [3, 4].

Высококачественный ВЭП характеризуется большим значением среднего питч-фактора $\alpha = v_\perp/v_\parallel$ ($v_\perp$, $v_\parallel$ – поперечная и продольная скорости электронов), малым скоростным ($\delta v_\perp$) и энергетическим ($\delta\varepsilon$) разбросами, требуемой пространственной структурой, отсутствием паразитных колебаний пространственного заряда (см., например, монографию [4]). Один из важных факторов, приводящих к ухудшению качества ВЭП, связан с шероховатостью поверхности катода, типичный размер неоднородностей на которой составляет единицы-десятки микрон [4 – 11]. Возникают трудности при проведении трехмерного траекторного анализа в системе с катодом, на поверхности которого имеются неоднородности подобного размера. При типичной длине ЭОС гиротрона, составляющей сотни миллиметров, наличие такого катода приводит к огромному числу ячеек сетки, что не приемлемо для современных вычислительных систем. Разработаны алгоритмы, которые позволяют косвенно учесть шероховатость эмитирующей поверхности в модели ЭОС с гладким катодом путем задания начальной скорости каждой частицы, стартующей с катода [10, 11]. Эти алгоритмы основываются на использовании данных предварительных расчетов, отдельно выполняемых для каждого конкретного гиротрона.

Чтобы избежать несоответствия теоретических и экспериментальных значений параметров ВЭП, зачастую наблюдаемого на практике, при проведении траекторного анализа следует учитывать возможное изменение геометрии МИП, вызванное нагревом термокатода. Проблема учета тепловых эффектов в электронной пушке также индивидуальна для каждого конкретного прибора с характерными для него размерами элементов ЭОС.

© Louksha O. I., Trofimov P. A., Malkin A. G., 2022. Published by Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University.

В настоящей работе применяется более простой, по сравнению с представленными в статьях [10, 11], способ учета шероховатости катода при расчете траекторий электронов в ЭОС гиротронов. Он основан на использовании средств программного пакета CST Studio Suite [12], которые доступны в нем при задании параметров термоэлектронной эмиссии. Данный пакет использовался для проведения всех расчетов, описанных в работе. В результате этих расчетов были определены характеристики ВЭП в ЭОС гиротрона Санкт-Петербургского политехнического университета (СПбПУ) с рабочей частотой 74,2 ГГц и выходной мощностью ~ 100 кВт [13 – 16], а также влияние на эти характеристики шероховатости поверхности эмиттера и эффектов, вызванных его нагревом.

Модель катода с шероховатой поверхностью и влияние шероховатости на параметры ВЭП

Электроны, эмитируемые с катода МИП, приобретают начальную поперечную скорость под действием скрещенных электрического и магнитного полей. Если следовать адиабатической теории МИП (см., например, работы [4, 5]), то поперечная скорость электрона вблизи катода выражается как

$$v_{\perp c} = \overline{v_{\perp c}} \pm v_{\theta}, \tag{1}$$

где $\overline{v_{\perp c}} = E_{\perp c}/B_c$ – средняя поперечная скорость на катоде ($E_{\perp c}$ – компонента электрического поля у катода, перпендикулярная магнитному полю, B_c – индукция магнитного поля у катода), v_{θ} – модуль начальной скорости в направлении, перпендикулярном магнитному полю (совпадает с азимутальным направлением для аксиально-симметричной ЭОС гиротрона).

При шероховатой поверхности катода электроны приобретают начальные скорости под действием микрополей вблизи локальных неоднородностей на этой поверхности. Как следствие, возникает разброс начальных поперечных скоростей электронов на катоде:

$$\delta v_{\perp c} = \frac{\Delta v_{\theta}}{\overline{v_{\perp c}}}, \tag{2}$$

где Δv_{θ} – абсолютный разброс начальных скоростей.

Кроме шероховатости, фактором, приводящим к увеличению $\delta v_{\perp c}$, является разброс начальных тепловых скоростей электронов, эмитируемых с поверхности катода. Важно, что величина относительного разброса поперечных скоростей, с учетом всех факторов этого разброса, остается неизменной при движении ВЭП в адиабатически нарастающем магнитном поле, которое используется для накачки поперечной скорости электронов в ЭОС гиротронов.

В работе [17] сравниваются скоростные распределения электронов в модели плоского диода без магнитного поля с двумя типами катодов: первый характеризуется шероховатой поверхностью, на которой регулярно расположены полусферы радиусом r_0, а второй – гладкой поверхностью.

Для катода первого типа распределение электронов $f(v_x)$ (x – координата вдоль его поверхности) практически не меняется при увеличении расстояния z от катода, если оно превышает значение, равное примерно $2r_0$. Показано, что спектры начальных скоростей для катода с шероховатой поверхностью удовлетворительно согласуются с соответствующими спектрами для гладкого катода, если для него задать максвелловское распределение скоростей эмитируемых частиц, а именно

$$f(v)dv = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv, \tag{3}$$

с температурой T^*, заметно превышающей реальную температуру катода T_c, и установить диапазон азимутальных углов $\Delta\theta$ между нормалью к поверхности катода и направлением вектора начальной скорости, равным $\pm$ 90°. На рис. 1 показаны зависимости разброса начальных скоростей Δv_x от эффективной температуры T^* для модели с гладким катодом и от радиуса r_0 для модели с шероховатым катодом. Здесь и далее скоростной разброс электронов определяется как среднее квадратичное (rms) отклонение от средней скорости.

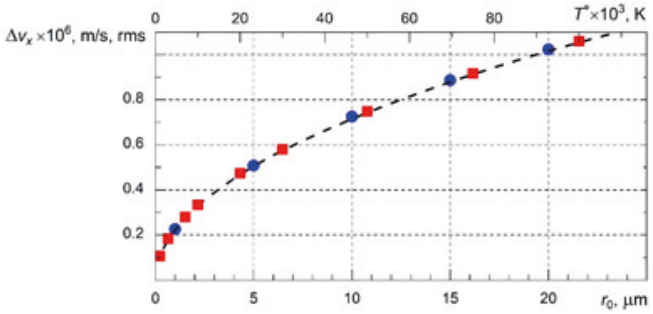


Рис. 1. Зависимости разброса скоростей электронов, эмитируемых с катода, от радиуса r_0 в модели с шероховатым катодом (–●–) и от эффективной температуры T^* в модели с гладким катодом (–■–) при напряженности макроскопического поля в зазоре катод-анод, равной 30 кВ/см

Значения Δv_x для модели с шероховатым катодом были получены после усреднения спектров начальных скоростей, рассчитанных для различных расстояний между полусферами при заданном радиусе r_0. Если положить, что $r_0 = 10$ мкм соответствует $T^* = 46 \cdot 10^3$ K, то зависимости $\Delta v_x(r_0)$ и $\Delta v_x(T^*)$ практически совпадают (см. рис. 1).

Важно отметить, что в аксиально-симметричной ЭОС гиротрона катод имеет форму конуса и вблизи него имеется магнитное поле [4]. Как было отмечено выше, изменение скорости v_x происходит на малом расстоянии от катода, не превышающем нескольких радиусов r_0. На таком расстоянии движение электронов практически не отличается от движения в плоском диоде. Кроме того, влияние магнитного поля на это движение незначительно [4]. Следовательно, рассчитанный разброс скорости Δv_x можно рассматривать как разброс начальной поперечной скорости $\Delta v_{\perp c}$. Поскольку при типичных значениях r_0 температура $T^* >> T_c$, разброс начальных скоростей Δv_x, рассчитанный по температуре T^*, можно считать обусловленным суммарным действием шероховатости поверхности катода и разброса тепловых скоростей.

Предложенный в работе [17] подход к учету шероховатости катода, основанный на использовании модели ЭОС с гладким катодом и задании распределения начальных скоростей (3) с указанными значениями параметров T^* и $\Delta\theta$, был использован и в настоящей работе для выполнения траекторного анализа работы гиротрона СПбПУ [13 – 16]. Основные параметры этого гиротрона представлены в табл. 1. Изображение области пушки этого гиротрона показано ниже на рис. 3 и 4. Если выбрать величину скоростного разброса $\Delta v_{\perp c} = 7{,}25 \cdot 10^5$ м/с, что соответствует $r_0 = 10$ мкм (см. рис. 1), то, согласно выражениям (1) и (2), при указанных в табл. 1 значениях U_0, B_c, D_{ca}, ψ_c, φ_c разброс начальных поперечных скоростей на катоде $\delta v_{\perp c}$, обусловленный его шероховатостью, будет равен 3,63 %.

Таблица 1

Основные геометрические параметры и характеристики расчетного рабочего режима гиротрона СПбПУ

Параметр	Значение
Ускоряющее напряжение U_0, кВ	30
Ток пучка I_b, А	10
Индукция магнитного поля в области резонатора B_0, Тл	2,75
Индукция магнитного поля у катода B_c, Тл	0,152
Рабочая мода	$TE_{12,3}$
Средний радиус эмитирующего пояска катода R_c, мм	35
Расстояние между катодом и анодом D_{ca}, мм	10,4
Угол наклона образующей конусного эмитирующего пояска к оси прибора ψ_c, град	35
Угол наклона магнитной силовой линии к поверхности катода φ_c, град	19,2

В расчетах использовались две версии магнетронно-инжекторной пушки [18]. В стандартной конфигурации пушки угол наклона образующей конусной части катода, равный 35°, был одинаковым вдоль всей образующей. Для такой пушки при рабочих параметрах, указанных в табл. 1, реализуется режим работы гиротрона со средним питч-фактором, равным примерно 1,3. Значения питч-фактора α и скоростного разброса $\delta v_\perp$, обсуждаемые в настоящей работе, были определены в центральной плоскости резонатора в максимуме распределения магнитного поля вдоль продольной координаты. В модифицированной версии пушки был установлен управляющий электрод с увеличенным до 50° углом наклона конусной части. Как показали исследования, представленные в статье [19], регулированием напряжения между катодом и управляющим электродом U_{cont} можно добиться оптимизации распределения электрического поля в прикатодной области МИП и, как следствие, снижения скоростного разброса в пучке. Это позволяет увеличить рабочий питч-фактор и КПД гиротрона [20].

Для проведения траекторного анализа была использована модель ЭОС гиротрона СПбПУ, подробно описанная в статье [18]. Число центров эмиссии было увеличено до значения примерно $3 \cdot 10^4$, что позволило получить более гладкие распределения электронов по скоростям при повышенной температуре катода. Для расчета траекторий использовался вычислитель Tracking Solver. Зависимости среднего питч-фактора α и скоростного разброса $\delta v_\perp$ от эффективной температуры T^* для двух версий МИП показаны на рис. 2. С ростом температуры T^* наблюдается увеличение $\delta v_\perp$. При $T^* \approx 0$ скоростной разброс обусловлен разностью величин внешних электрического и магнитного полей, а также собственного поля пространственного заряда ВЭП для электронов, стартующих с разных точек эмиттера. Этот позиционный разброс меньше для модифицированной МИП при оптимальном значении $U_{cont} = -9$ кВ, по сравнению со стандартной МИП. Тогда вполне объяснимо, что введение дополнительного разброса начальных скоростей приводит к более заметному увеличению суммарного скоростного разброса для гиротрона с модифицированной МИП.

Экспериментальные данные, полученные ранее на гиротроне СПбПУ со стандартной МИП [21], дают основание утверждать, что для катода с однородной эмиссией разброс скоростей $\delta v_\perp$ равен примерно 8,8 %. Такое значение разброса было, в частности, зафиксировано в экспериментах с катодом из гексаборида лантана LaB_6, в активном веществе которого типичный размер частиц равен около 10 мкм. В процессе эксплуатации такого катода активное вещество может уходить с поверхности эмиттера. При этом частично обнажается губка, размер зерен которой может быть заметно больше размера частиц в порошке гексаборида лантана. Следует также учесть довольно большую площадь эмитирующей поверхности, составляющую около 10 см^2. Эта поверхность может быть неоднородной, что связано с неоднородностью нагрева и неоднородностью потоков частиц, бомбардирующих поверхность катода. Если учитывать указанные факторы, то можно предположить, что размер шероховатостей на катоде во время измерений, который определяет величину разброса начальных скоростей $\delta v_{\perp c}$, отличается от размера частиц в активном веществе эмиттера. На рис. 2 видно, что для стандартной МИП разброс $\delta v_\perp = 8{,}8$ % достигается при $T^* \approx 67 \cdot 10^3$ K.

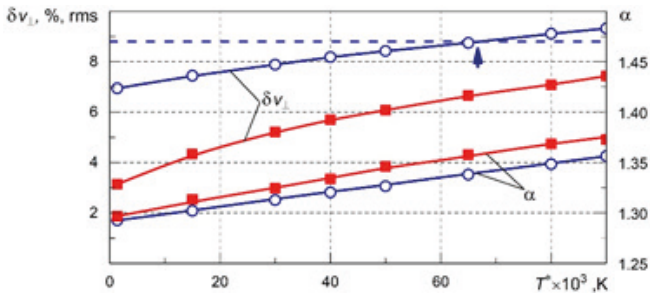


Рис. 2. Зависимости разброса поперечных скоростей $\delta v_\perp$ и среднего питч-фактора α от эффективной температуры T^* для стандартной (–○–) и модифицированной (–■–) магнетронно-инжекторных пушек; $U_{cont} = -9$ кВ

Следовательно, используя приведенные на рис. 1 зависимости, можно сделать вывод, что катод из гексаборида лантана, в экспериментах с которым был зафиксирован скоростной разброс 8,8 %, характеризовался усредненной шероховатостью с радиусом $r_0 \approx 14$ мкм.

Моделирование тепловых эффектов, связанных с нагревом катода

Модель гиротрона СПбПУ, которая использовалась при расчете температурного распределения, показана на рис. 3. Катодный узел *1* прибора имеет разборную конструкцию, что позволяет, в частности, оперативно заменять деталь *2* с эмитирующим пояском. Нагрев катода осуществляется с помощью вольфрамовой спирали-подогревателя *3*. Ток накала I_h подогревателя протекает по центральному катодному стержню *4*. Тепловые экраны и специальные зазоры между деталями обеспечивают термоизоляцию нагревательной спирали и эмитирующего пояска от остальных элементов катодного блока. В гиротроне СПбПУ на разных этапах исследования было использовано более десяти эмиттеров двух типов: металлопористые вольфрам-бариевые (рабочая температура $T_c \approx 1100$ °C) и гексаборид лантановые ($T_c \approx 1600$ °C) [22].

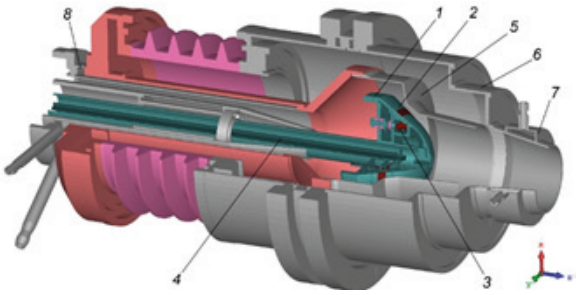


Рис. 3. Трехмерное изображение области пушки гиротрона СПбПУ:
1 – катодный блок; *2* – деталь с эмитирующим пояском; *3* – спираль; *4* – центральный стержень; *5* – анод; *6* – корпус; *7*, *8* – водяные полости

Задача по определению деформации элементов МИП, вызванной нагревом термокатода, решалась в три этапа. На первом рассчитывалась плотность тока в цепи нагревателя с помощью вычислителя Stationary Current Solver с учетом проводящих свойств материалов и геометрии элементов катодного блока. На основании полученных данных было рассчитано количество тепла, выделяемое при омическом нагреве деталей-проводников при протекании через них тока I_h.

На втором этапе было рассчитано стационарное распределение температуры с помощью вычислителя Thermal Static Solver. Кроме омического нагрева, рассмотренного на первом этапе, было принято во внимание излучение нагретых тел, являющихся вторичными источниками тепла в вакуумной системе. Определялись тепловые потери нагретых тел, которые считали дополнительными источниками теплоты (Heat Source) для тел, поглощающих тепловое излучение. Распределение температуры в катодной области гиротрона при токе $I_h = 30$ А, соответствующем нагреву катода из гексаборида лантана, показано на рис. 4. Очевидно, что наиболее нагретыми должны быть элементы катодного узла. Тепловая деформация, связанная с их нагревом, может приводить к изменению геометрии МИП и, как следствие, к изменению параметров формируемого электронного потока.

На третьем этапе для расчета тепловой деформации использовался вычислитель Linear Structural Mechanics Solver, с помощью которого можно определять параметры, характеризующие линейное и объемное расширение твердых тел. Катодная ножка, на которой закреплен катодный блок, в торцевой области гиротрона соединена через изолятор с его корпусом (см. рис. 3). Поэтому линейное расширение элементов катодного блока в продольном направлении приводит к его смещению в сторону резонатора. Объемное расширение сопровождается увеличением среднего радиуса эмитирующего пояска. Значения соответствующих параметров Δz и Δr, которые были рассчитаны при токах накала I_h, необходимых для нагрева катодов LaB_6 и W-Ba, приведены в табл. 2.

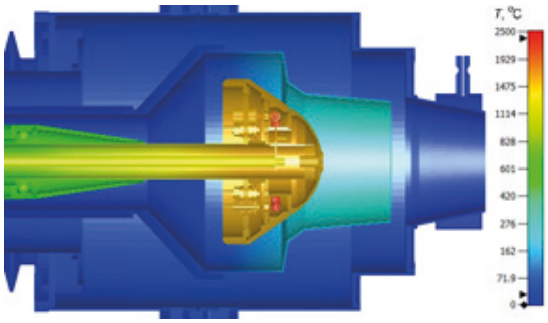


Рис. 4. Смоделированное распределение температуры по элементам гиротрона с катодом из гексаборида лантана

Таблица 2

Деформация элементов МИП для двух типов термокатода

Рабочие характеристики МИП			Изменение геометрии МИП	
Материал катода	I_h	T_c	Δz	Δr
	A	°C	мм	
LaB_6	30	1616	1,41	0,29
W-Ba	25	1100	0,98	0,21

Обозначения: I_h – ток накала, T_c – температура катода, Δz – продольное смещение катодного блока, Δr – радиальное расширение эмитирующего пояска, МИП – магнетронно-инжекторная пушка.

Расчет траекторий электронов в зависимости от значений параметров Δz и Δr был выполнен для модифицированной МИП гиротрона, поскольку ее геометрия была оптимизирована для получения минимального скоростного разброса. Вначале температура катода задавалась равной T_c, принимался во внимание только разброс начальных тепловых скоростей электронов без учета шероховатости катода. Зависимости среднего питч-фактора α и скоростного разброса $\delta v_\perp$ от параметров Δz и Δr показаны на рис. 5. При варьировании Δr учитывалось только изменение размеров детали катодного блока с эмитирующим пояском (см. рис. 3).

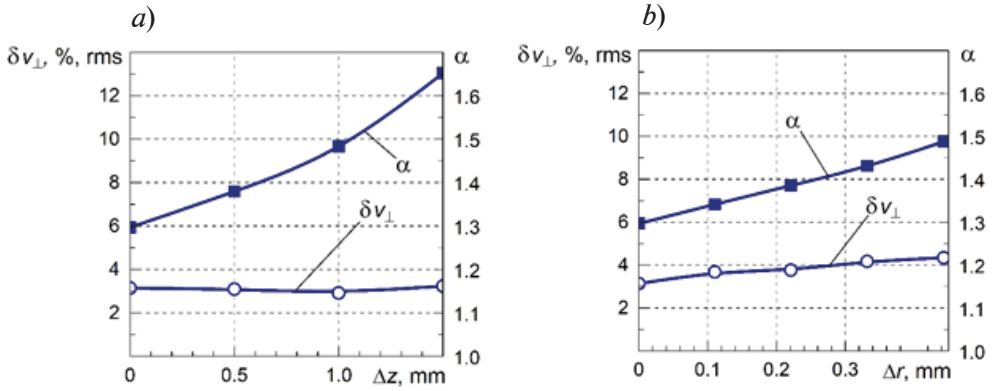


Рис. 5. Зависимости разброса поперечных скоростей $\delta v_\perp$ и среднего питч-фактора α от продольного смещения катода Δz (*a*) и от радиального расширения эмитирующего пояска Δr (*b*) для модифицированной МИП; $U_{cont} = -9$ кВ

Удлинение катодной ножки приводит к сокращению расстояния между катодом и анодом и, следовательно, к увеличению амплитуды электрического поля в этой области. В результате возрастает начальная поперечная скорость на катоде и средний питч-фактор. Распределение электрического поля (форма эквипотенциалей) при варьировании величины Δz остается практически неизменной. Поскольку в основном от этого распределения зависит величина скоростного разброса, то и она меняется незначительно при изменении Δz. Повышение α с ростом Δr также можно объяснить сокращением расстояния катод-анод. Радиальное расширение детали с эмитирующим пояском сопровождается некоторым изменением распределения электрического поля. Поскольку в исходном состоянии ($\Delta r = 0$) это распределение было оптимизировано для получения минимального скоростного разброса, любое изменение этого распределения сопровождается увеличением значения $\delta v_{\perp}$ (рис. 5, *b*).

В заключение исследования был выполнен траекторный анализ в гиротроне СПбПУ с модифицированной МИП как с учетом шероховатости катода, так и с учетом тепловых эффектов, вызванных его нагревом. Рассматривали температурный режим, соответствующий использованию катода, изготовленного из гексаборида лантана. При $\Delta z = 1{,}41$ мм, $\Delta r = 0{,}29$ мм, $T^* = 67 \cdot 10^3$ K и $\Delta\theta = \pm 90^\circ$ были получены следующие значения среднего питч-фактора и скоростного разброса: $\alpha = 2{,}25$ и $\delta v_{\perp} = 5{,}89$ %. Заметное увеличение питч-фактора, по сравнению с исходным значением $\alpha \approx 1{,}3$ (см. рис. 2), произошло в результате одновременного удлинения катодной ножки и расширения эмитирующего пояска. При больших значениях α и $\delta v_{\perp}$ часть электронов с большими поперечными скоростями отражается от магнитной пробки в области перед входом в резонатор (см., например, статьи [18, 21]). Отраженные частицы могут накапливаться в ловушке между катодом и магнитной пробкой, что сопровождается возбуждением паразитных низкочастотных колебаний (НЧК), негативно влияющих на качество формируемого ВЭП. В описанном выше режиме, от магнитной пробки отражалось 364 частицы из 30 120 частиц, стартующих с катода. Это соответствует коэффициенту отражения $K_{refl} = 1{,}2 \cdot 10^{-2}$. При таком коэффициенте отражения могут возбуждаться паразитные НЧК с заметной амплитудой [21].

Добиться снижения величин α и K_{refl} можно за счет увеличения индукции магнитного поля B_c у катода и, соответственно, уменьшения коэффициента магнитной компрессии B_0/B_c. При этом значения основных параметров U_0, B_0 и I_b, от которых в первую очередь зависит генерируемая мощность и частота излучения, остаются неизменными. В гиротроне СПбПУ для увеличения магнитного поля у катода следует увеличивать число витков катодной катушки [22]. Описанные выше результаты для модифицированной МИП были получены при $B_0/B_c = 19{,}20$, что соответствует 22 виткам катодной катушки. Переход к 24 виткам сопровождается уменьшением значения B_0/B_c до 18,02. Рассчитанные при таком B_0/B_c значения питч-фактора и скоростного разброса составили $\alpha = 1{,}44$ и $\delta v_{\perp} = 6{,}59$ %. Эти значения характеризуют качество ВЭП как высокое, при котором отсутствует отражение электронов от магнитной пробки и может быть обеспечена повышенная эффективность работы гиротрона с большим значением электронного КПД [20].

Заключение

Новая методика, предложенная в данной работе, может быть использована для учета разброса начальных скоростей электронов, вызванного шероховатостью поверхности катода, при выполнении трехмерного моделирования траекторий электронов в электронно-оптической системе гиротрона. Определено влияние шероховатости катода на скоростной разброс и средний питч-фактор электронов в ЭОС гиротрона средней мощности 4-миллиметрового диапазона длин волн. Сопоставление данных, полученных в эксперименте, с результатами траекторного анализа позволило определить усредненный размер неоднородностей на поверхности катода, который использовался в этом гиротроне.

Были получены данные, характеризующие нагрев различных элементов ЭОС при рабочих температурах термокатодов, используемых в гиротроне. Определено влияние удлинения катодной ножки и радиального расширения эмитирующего пояска на параметры ВЭП. Показана возможность реализации режима работы гиротрона с высоким качеством ВЭП с учетом влияния на его параметры шероховатости катода и тепловых эффектов в электронной пушке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Litvak A. G., Denisov G. G., Myasnikov V. E., Tai E. M., Azizov E. A., Ilin V. I.** Development in Russia of megawatt power gyrotrons for fusion // Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. 2011. Vol. 32. No. 3. Pp. 337–342.

2. **Thumm M.** State-of-the-art of high-power gyro-devices and free electron masers // Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves. 2020. Vol. 41. No. 1. Pp. 1–140.

3. **Nusinovich G. S.** Introduction to physics of gyrotrons. Baltimore, USA: Johns Hopkins University Press, 2004. 335 p.

4. **Цимринг Ш. Е.** Введение в высокочастотную вакуумную электронику и физику электронных пучков. Пер. с англ. Нижний Новгород: Ин-т прикладной физики РАН, 2012. 575 с.

5. **Цимринг Ш. Е.** О разбросе скоростей в винтовых электронных пучках // Известия вузов. Радиофизика. 1972. Т. 15. № 8. С. 1247–1259.

6. **Авдошин Е. Г., Николаев Л. В., Платонов И. М., Цимринг Ш. Е.** Экспериментальное исследование скоростного разброса в винтовых электронных пучках // Известия вузов. Радиофизика. 1973. Т. 16. № 4. С. 605–612.

7. **Lau Y. Y.** Effects of cathode surface roughness on the quality of electron beams // Journal of Applied Physics. 1987. Vol. 61. No. 1. Pp. 36–44.

8. **Lygin V. K.** Numerical simulation of intense helical electron beams with the calculation of the velocity distribution functions // International Journal of Infrared and Millimeter Waves. 1995. Vol. 16. No. 2. Pp. 363–376.

9. **Запевалов В. Е., Корнишин С. Ю., Котов А. В., Куфтин А. Н., Малыгин О. В., Мануилов В. Н., Седов А. С., Цалолихин В. И.** Система формирования электронного пучка для гиротрона с частотой 258 ГГц, предназначенного для экспериментов по динамической поляризации ядер // Известия вузов. Радиофизика. 2010. Т. 53. № 4. С. Р. 251–259.

10. **Лещева К. А., Мануилов В. Н.** Численное 3D-моделирование систем формирования винтовых электронных пучков гироприборов с азимутально неоднородным распределением тока эмиссии // Успехи прикладной физики. 2019. Т. 7. № 3. С. 298–308.

11. **Zhang J., Illy S., Pagonakis I., Avramidis K., Thumm M., Jelonnek J.** Influence of emitter surface roughness on high power fusion gyrotron operation // Nuclear Fusion. 2016. Vol. 56. No. 2. P. 026002.

12. CST Studio Suite. Режим доступа: https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/cst-studio-suite/ (Дата обращения: 17.06.2022).

13. **Касьяненко Д. В., Лукша О. И., Пиосчик Б., Соминский Г. Г., Тумм М.** Низкочастотные паразитные колебания пространственного заряда в винтовом электронном пучке гиротрона // Известия вузов. Радиофизика. 2004. Т. 47. № 5–6. С. 463–470.

14. **Лукша О. И., Пиосчик Б., Соминский Г. Г., Тумм М., Самсонов Д. Б.** Подавление паразитных колебаний пространственного заряда в гиротроне // Известия вузов. Радиофизика. 2006. Т. 49. № 10. С. 880–886.

15. **Лукша О. И.** Моделирование низкочастотных коллективных процессов в электронных потоках гиротронов // Известия вузов. Радиофизика. 2009. Т. 52. № 5–6. С. 425–437.

16. **Louksha O. I., Sominski G. G., Arkhipov A. V., Dvoretskaya N. V., Kolmakova N. G., Samsonov D. B., Trofimov P. A.** Gyrotron research at SPbPU: Diagnostics and quality improvement of electron beam // IEEE Transactions on Plasma Science. 2016. Vol. 44. No. 8. Pp. 1310–1319.

17. **Лукша О. И., Трофимов П. А., Малкин А. Г.** Влияние шероховатости поверхности катода на характеристики электронного потока в электронно-оптической системе гиротрона // XI Всероссийская научно-техническая конференция «Электроника и микроэлектроника СВЧ». 31 мая – 3 июня 2022 г., г. Санкт-Петербург, Россия. Сборник докладов. СПб.: СПбГЭТУ "ЛЭТИ", 2022. С. 456-460.

18. **Лукша О. И., Трофимов П. А.** Моделирование неоднородных электронных потоков в электронно-оптической системе гиротрона // ЖТФ. 2018. Т. 88. № 4. С. 614–620.

19. **Лукша О. И., Самсонов Д. Б., Соминский Г. Г., Цапов А. А.** Повышение качества винтового электронного потока и КПД гиротрона при регулировании распределения электрического поля в области магнетронно-инжекторной пушки // ЖТФ. 2012. Т. 82. № 6. С. 101–105.

20. **Лукша О. И., Трофимов П. А.** Высокоэффективный гиротрон с многоступенчатой рекуперацией остаточной энергии электронов // ЖТФ. 2019. Т. 89. № 12. С. 1988–1996.

21. **Лукша О. И., Самсонов Д. Б., Соминский Г. Г., Семин С. В.** Динамические процессы в винтовых электронных потоках гиротронов // ЖТФ. 2013. Т. 83. № 5. С. 132–140.

22. **Лукша О. И.** Винтовые электронные потоки гиротронов: динамика пространственного заряда и методы повышения качества. Дисс. ... докт. физ.-мат. наук. 01.04.04. Защ. 01 декабря 2011 г.: утв. 01.12.2011. СПб.: СПбГПУ, 2011. 285 с.

REFERENCES

1. **Litvak A. G., Denisov G. G., Myasnikov V. E., et al.,** Development in Russia of megawatt power gyrotrons for fusion, J. Infrared Millim. Terahertz Waves. 32 (3) (2011) 337–342.

2. **Thumm M.,** State-of-the-art of high-power gyro-devices and free electron masers, J. Infrared Millim. Terahertz Waves. 41 (1) (2020) 1–140.

3. **Nusinovich G. S.,** Introduction to physics of gyrotrons, Johns Hopkins University Press, Baltimore, USA, 2004.

4. **Tsimring Sh. E.,** Electron beams and microwave vacuum electronics, John Wiley & Sons, Hoboken, 2007.

5. **Tsimring Sh. E.,** On the spread of velocities in helical electron beams, Radiophys. Quant. El. 15 (8) (1972) 952–961.

6. **Avdoshin E. G., Nikolaev L. V., Platonov I. N., Tsimring Sh. E.,** Experimental investigation of the velocity spread in helical electron beams, Radiophys. Quant. El. 16 (4) (1973) 461–466.

7. **Lau Y. Y.,** Effects of cathode surface roughness on the quality of electron beams, J. Appl. Phys. 61 (1) (1987) 36–44.

8. **Lygin V. K.,** Numerical simulation of intense helical electron beams with the calculation of the velocity distribution functions, Int. J. Infrared Millim. Waves. 16 (2) (1995) 363–376.

9. **Zapevalov V. E., Kornishin S. Yu., Kotov A. V., et al.,** System for the formation of an electron beam in a 258 GHz gyrotron designed for experiments on dynamic polarization of nuclei, Radiophys. Quant. El. 53 (4) (2010) 229–236.

10. **Leshcheva K. A., Manuilov V. N.,** Numerical simulation of 3-D systems of formation of helical electron beams of gyro-devices with azimutally inhomogeneous distribution of emission current, Advances in Applied Physics. 7 (3) (2019) 298–308 (in Russian).

11. **Zhang J., Illy S., Pagonakis I., et al.,** Influence of emitter surface roughness on high power fusion gyrotron operation, Nucl. Fusion. 56 (2) (2016) 026002.

12. CST Studio Suite, URL: https://www.3ds.com/products-services/simulia/ products/cst-studio-suite/. Accessed July 06, 2022.

13. **Kas'yanenko D. V., Louksha O. I., Sominsky G. G., et al.,** Low-frequency parasitic space-charge oscillations in the helical electron beam of a gyrotron, Radiophys. Quant. El. 47 (5–6) (2004) 414–420.

14. **Louksha O. I., Piosczyk B., Sominski G. G., et al.,** Suppression of parasitic space-charge oscillations in a gyrotron, Radiophys. Quant. El. 49 (10) (2006) 793–798.

15. **Louksha O. I.,** Simulation of low-frequency collective processes in gyrotron electron beams, Radiophys. Quant. El. 52 (5–6) (2009) 386–397.

16. **Louksha O. I., Sominski G. G., Arkhipov A. V., et al.,** Gyrotron research at SPbPU: Diagnostics and quality improvement of electron beam, IEEE Trans. Plasma Sci. 44 (8) (2016) 1310–1319.

17. **Louksha O. I., Trofimov P. A., Malkin A. G.,** Vliyaniye sherokhovatosti poverkhnosti katoda na kharakteristiki elektronnogo potoka v elektronno-opticheskoy sisteme girotrona [Effect of cathode surface roughness on the characteristics of the electron beam in the electron optical system of a gyrotron], In book: XI Vserossiyskaya nauchno-tekhnicheskaya konferentsiya "Elektronika i mikroelektronika SVCH". Sbornik dokladov [Transactions of XI All-Russian Scientific and Technical Conference "Electronics and Microelectronics of Microwaves", May 31 – June 3, 2022, St. Petersburg, Russia. The collection of reports, ETU "LETI", St. Petersburg (2022) 456-460 (in Russian).

18. **Louksha O. I., Trofimov P. A.,** Simulation of non-uniform electron beams in the gyrotron electron-optical system, Tech. Phys. 63 (4) (2018) 598–604.

19. **Louksha O. I., Samsonov D. B., Sominskii G. G., Tsapov A. A.,** Improvement of the helical electron beam quality and the gyrotron efficiency by controlling the electric field distribution near a magnetron injection gun, Tech. Phys. 57 (6) (2012) 835–839.

20. **Louksha O. I., Trofimov P. A.,** Highly efficient gyrotron with multi-stage recuperation of residual electron energy, Tech. Phys. 64 (12) (2019) 1889–1897.

21. **Louksha O. I., Samsonov D. B., Sominskii G. G., Semin S. V.,** Dynamic processes in helical electron beams in gyrotrons, Tech. Phys. 58 (5) (2013) 751–759.

22. **Louksha O. I.,** Vintovye elektronnye potoki girotronov: dinamika prostranstvennogo zaryda i metody povysheniya kachestva [Gyrotron helical electron beams: Space charge dynamics and methods for quality improvement], Thesis for a Doctor's degree (phys.-math. sci.), St. Petersburg, SPbPU, 2011.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛУКША Олег Игоревич – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
louksha@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-6402-8112

ТРОФИМОВ Павел Анатольевич – *кандидат физико-математических наук, инженер Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
trofpa@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-3585-1169

МАЛКИН Александр Геннадьевич – *студент Высшей инженерно-физической школы Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alexmalkin47@gmail.com
ORCID: 0000-0003-4047-3956

THE AUTHORS

LOUKSHA Oleg I.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
louksha@rphf.spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-6402-8112

TROFIMOV Pavel A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
trofpa@yandex.ru
ORCID: 0000-0002-3585-1169

MALKIN Alexander G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
alexmalkin47@gmail.com
ORCID: 0000-0003-4047-3956

Статья поступила в редакцию 31.05.2022. Одобрена после рецензирования 06.07.2022. Принята 06.07.2022.

Received 31.05.2022. Approved after reviewing 06.07.2022. Accepted 06.07.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Физическое материаловедение

Научная статья
УДК 53.043
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15311

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В КОМПОЗИЦИОННОМ МАТЕРИАЛЕ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ПОЛИАНИЛИНА

А. А. Третьяков [1], В. М. Капралова [1], В. В. Лобода [1], И. Ю. Сапурина [2], Н. Т. Сударь [1]✉

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия;

[2] Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

✉ sudar53@mail.ru

Аннотация. В работе исследовано влияние температуры (диапазон 22 – 140 °C) на коэффициент мощности (КМ) композиционного материала из многостенных углеродных нанотрубок с нанесенным на их поверхность полианилиновым покрытием (толщина около 10 нм). Величина проводимости покрытия варьировалась путем обработки композита буферными растворами с различными значениями pH. В исследуемых образцах композита нанотрубки были беспорядочно ориентированы друг относительно друга. Установлено, что наибольшим значением КМ обладает композиционный материал, в котором полианилин находится в окисленной проводящей форме. У этого образца при комнатной температуре значение КМ составило примерно 0,5 мкВт/(м·К^2), а при 140° С – около 1 мкВт/(м·К^2).

Ключевые слова: термоэлектричество, полианилин, нанотрубка, коэффициент Зеебека, проводимость, буферный раствор, водородный показатель

Финансирование: Исследование финансируется Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы «Исследовательский центр мирового уровня: передовые цифровые технологии» (контракт № 075-15-2022-311 от 20.04.2022).

Для цитирования: Третьяков А. А., Капралова В. М., Лобода В. В., Сапурина И. Ю., Сударь Н. Т. Влияние температуры на термоэлектрический эффект в композиционном материале на основе углеродных нанотрубок и полианилина // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 143–153. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15311

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

© Третьяков А. А., Капралова В. М., Лобода В. В., Сапурина И. Ю., Сударь Н. Т., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15311

INFLUENCE OF TEMPERATURE ON THERMOELECTRIC EFFECT IN THE COMPOSITE MATERIAL BASED ON CARBON NANOTUBES AND POLYANILINE

A. A. Tretyakov [1], V. M. Kapralova [1], V. V. Loboda [1], I. Yu. Sapurina [2], N. T. Sudar [1]✉

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

[2] Institute of Macromolecular Compounds, RAS, St. Petersburg, Russia

✉ sudar53@mail.ru

Abstract. In the paper, the effect of temperature (range 22 − 140 °C) on the power factor (PF) of composite material made of multi-walled carbon nanotubes with a 10 nm thick polyaniline coating applied to their surface has been studied. The conductivity value of the coating was varied by treating the composite with buffer solutions of different pH values. The nanotubes were randomly oriented relative to each other in the composite samples under study. It was found that the composite material where polyaniline was in an oxidized conductive form had the highest PF value. In that sample, the PF values were about 0.5 μW/(m·K^2) at room temperature and about 1 μW/(m·K^2) at 140° C.

Keywords: thermoelectricity, polyaniline, nanotube, Seebeck coefficient, conductivity, buffer solution, pH value

Funding: The research is funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, within the framework of the program "The World-Class Research Centre: Advanced Digital Technologies" (Contract No. 075-15-2022-311 dated April 20, 2022).

For citation: Tretyakov A. A., Kapralova V. M., Loboda V. V., Sapurina I. Yu., Sudar N. T., Influence of temperature on thermoelectric effect in the composite material based on carbon nanotubes and polyaniline, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 143–153. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15311

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

Введение

В последние годы существенно возрос интерес к экологически чистым источникам энергии. Термоэлектрические генераторы (ТЭГ), обеспечивающие прямое преобразование тепловой энергии в электрическую, стали рассматриваться как перспективные источники такой энергии [1 − 4].

Для изготовления ТЭГ в настоящее время наиболее широко используются неорганические полупроводниковые материалы. Так, например, сильно легированные халькогениды свинца PbTe, PbSe, PbS являются основными материалами термоэлектрической энергетики [4, 5]. Эффективность преобразования энергии термоэлектриками можно оценивать по коэффициенту мощности P, определяемому как $P = \alpha^2\sigma$ (α – коэффициент Зеебека, σ – удельная проводимость). В диапазоне температур 600 − 950 K для неорганических термоэлектриков достигнуты значения коэффициента мощности порядка 400 мкВт/(м·K^2). Но наряду с таким достоинством, как высокая эффективность преобразования энергии, полупроводниковые неорганические материалы обладают и рядом недостатков: характеризуются значительной стоимостью и сложностью в производстве; высоко токсичны, а значит, не могут использоваться в быту. Негативные свойства таких термоэлектриков существенным образом ограничивает возможности их применения в ТЭГ.

© Tretyakov A. A., Kapralova V. M., Loboda V. V., Sapurina I. Yu., Sudar N. T., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

В качестве альтернативы традиционным неорганическим термоэлектрическим материалам могут быть предложены новые нетоксичные материалы – электропроводящие полисопряженные полимеры. Их отличает целый ряд уникальных свойств, а именно: малый удельный вес, низкий коэффициент теплопроводности, простота синтеза, незначительная стоимость, а также, что немаловажно, возможность создания гибких ТЭГ [3]. Важно отметить, что ТЭГ на основе органических материалов демонстрируют приемлемые термоэлектрические характеристики в диапазоне температур 200 – 380 K, т. е. способны работать при значительно меньших температурах, чем неорганические аналоги. Поэтому их можно устанавливать в жилых помещениях и даже включать в состав электронного текстиля для одежды [6].

Однако, несмотря на отмеченные достоинства, органические электропроводящие полимеры обладают относительно невысокой проводимостью и малым коэффициентом Зеебека, вследствие чего не могут на равных конкурировать с неорганическими термоэлектрическими материалами [7].

Существенного улучшения термоэлектрических свойств удалось добиться при использовании композитов из органических и неорганических составляющих; при этом особый интерес вызвали композиционные материалы на основе проводящих полимеров и углеродных нанотрубок (*англ*. Carbon NanoTubes (CNTs)) [8 – 11]. Свойства таких композитов зависят от множества факторов, которые включают тип (однослойные или многослойные), хиральность, чистоту, плотность дефектов и размеры (длина и диаметр) нанотрубок, дисперсное состояние и выравнивание нанотрубок в полимерной матрице, а также межфазную адгезию между нанотрубкой и полимерной матрицей. Эти факторы следует учитывать при представлении, интерпретации и сравнении результатов, полученных в композитах нанотрубок с полимерами [12].

Авторы работы [10] исследовали образец композита полианилина (*англ*. PANI) с многослойными (многостенными – Multi-Walled) углеродными нанотрубками (MWCNTs), изготовленный с применением постадийно двух методов. На первом этапе для формирования композита MWCNT / PANI был использован метод *in-situ*-полимеризации анилина в присутствии MWCNT, а затем на основе композита MWCNT / PANI были электроформованы микроволокона, где одномерные частицы MWCNT/ PANI укладывались параллельно друг другу. Данная методика позволила существенным образом упорядочить структуру материала. Для такого композита значения проводимости и коэффициента Зеебека составили соответственно 17,1 См/см и 10 мкВ/К, а коэффициент мощности – 0,171 мкВт/(м·К^2). Создание пористого слоя PANI на поверхности MWCNT позволило авторам статьи [8] повысить коэффициент Зеебека до 79,8 мкВ/К при практически неизменной проводимости, равной 14,1 См/см, что привело к значительному возрастанию коэффициента мощности до значения около 9 мкВт/(м·К^2). По мнению авторов указанной публикации, наличие пор с линейными размерами 10 –20 нм (сопоставимы с длиной пробега фононов в PANI) приводит к значительному увеличению рассеяния фононов и, как следствие, к снижению теплопроводности композита.

Композиты на основе одностенных (Single-Walled) углеродных нанотрубок (SWCNTs) и PANI демонстрируют значительно более высокую электропроводность и коэффициент Зеебека [9 – 11], чем композиты MWCNT / PANI. Коэффициент мощности композитов SWCNT / PANI, согласно оценкам, сделанным в статье [11], составил 175 мкВт/(м·К^2), что на сегодняшний день представляет собой рекордное значение P среди органических композитных термоэлектрических материалов и сопоставимо со значением коэффициента мощности неорганических термоэлектрических материалов. Полагают, что причиной возрастания удельной проводимости и коэффициента Зеебека в данных композитах является сильное взаимодействие между (π–π)-сопряженными связями углеродных нанотрубок и молекул полианилина, способствующее образованию более упорядоченной структуры полимерных цепей вдоль нанотрубки.

Цель настоящего исследования – проследить изменение термоэлектрических параметров композита MWCNT / PANI в широком температурном диапазоне и оценить влияние степени допирования полианилина на термоэлектрические характеристики исследуемого объекта.

Ожидается, что реализация поставленной цели позволит установить оптимальные условия изготовления композита, при которых достигается наибольшее значение коэффициента мощности.

Исследованные образцы и методика измерений

В работе использованы многостенные углеродные нанотрубки, полученные методом каталитического пиролиза углеводородов. Их диаметр составлял 17 ± 5 нм, а длина достигала 10 мкм. MWCNT не были агрегированы, хаотически переплетались и образовывали однородный материал. Реагенты (анилин, персульфат аммония фирмы Fluka (США)), использовались без предварительной очистки. Растворы с фиксированным значением pH получали с использованием стандартных фиксанолов 0,1 н и дистиллированной воды.

PANI наносили на поверхности нанотрубок MWCNT методом гетерофазного синтеза (метод *in-situ*-полимеризации), путем окислительной полимеризации анилина в присутствии MWCNT, диспергированных в реакционной среде. Реакцию проводили в водно-спиртовом растворе под действием персульфата аммония при 0° С и при интенсивном перемешивании. По окончании синтеза продукт декантировали на фильтр и промывали сначала подкисленным водным раствором, а затем ацетоном. Затем его сушили при нормальных условиях до стабилизации веса продукта. Содержание PANI в составе материала определялось по приросту массы композита, что хорошо коррелировало со 100%-м выходом полимера в ходе синтеза. В качестве материала сравнения использовался PANI, полученный при тех же условиях синтеза, но в отсутствие MWCNT.

На протяжении синтеза PANI формируется в окисленной электропроводящей форме. Для контролируемого снижения электропроводности композит MWCNT / PANI обрабатывали буферными растворами с определенным pH, после чего материал отфильтровывали от буферного раствора и сушили до постоянного веса.

Морфологию материалов изучали с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) NANOSEM 450 (производство компании FEI, США), при межэлектродном напряжении 5 кВ и давлении 90 Па.

Для проведения термоэлектрических измерений, из композита MWCNT / PANI прессовались таблетки диаметром 16 мм и толщиной 1− 3 мм под давлением 392 МПа.

Измерения удельной проводимости и коэффициента Зеебека проводились с помощью прибора NETZSCHSBA458 Nemesis (Германия). Для измерения удельной проводимости образца использовался четырехточечный метод. При измерении коэффициента Зеебека градиент температуры создавался посредством двух микронагревателей, расположенных на краях образца. Процесс измерения величин α и σ происходил автоматически, попеременно для каждой температурной точки (с постоянным шагом). Точность измерения коэффициента Зеебека составляла 7 %, а удельной проводимости − 6 − 7 %.

Экспериментальные результаты и их обсуждение

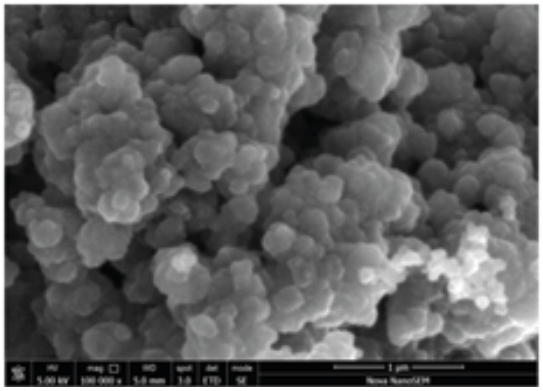
Типичная морфология PANI, получаемого при полимеразации в отсутствие темплата (в частности, углеродных нанотрубок) и служившего материалом сравнения, представлена на рис. 1, *a*. Полимер имеет иерархическую структуру. В результате самоорганизации нерастворимых олигомеров анилина формируется первый уровень иерархии − это сферические частицы диаметром порядка десяти нанометров. В ходе синтеза они объединяются в квазисферические агломераты субмикронных размеров (агломераты хорошо видны на снимке). Затем данные агломераты слипаются в бесформенные частицы микронных размеров, которые и образуют порошкообразный полимерный материал [13].

В присутствии темплата с высокой удельной площадью поверхности, каковыми являются MWCNT, вместо самоорганизации олигомеров в наносферы, происходит их сорбция на поверхность MWCNT с последующим гетерофазным ростом полимерной оболочки, покрывающей поверхность углеродных труб.

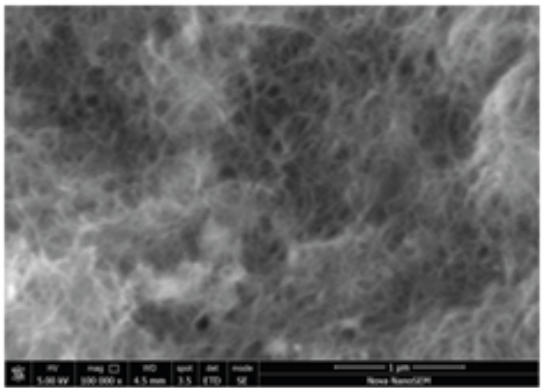
На рис. 1, *b*, *c* показаны изображения исходных углеродных нанотрубок (MWCNT) и композита MWCNT / PANI. Исходный углеродный материал представляет собой однородный пористый мат из хаотически сплетенных MWCNT (рис. 1, *b*). При нанесении PANI общая структура материала не изменилась, однако диаметр композиционных труб увеличился практически вдвое (рис. 1, *c*), что позволяет оценить толщину оболочки PANI

как равную примерно 10 нм. Видно, что она однородная и протяженная. Весь материал имеет морфологию типа «нанокабель». Нанотрубки беспорядочно ориентированы друг относительно друга.

a)



b)



c)

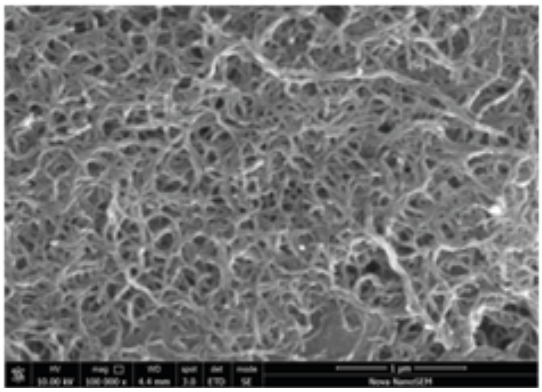


Рис. 1. СЭМ-изображения полианилина (материал сравнения), полученного в отсутствие MWCNT (*a*), а также исходных углеродных нанотрубок (*b*) и тех же трубок после нанесения PANI (*c*).
Масштабные отрезки одинаковы и составляют 1 мкм

На рис. 2 представлены температурные зависимости проводимости σ, коэффициента Зеебека α и коэффициента мощности композитов MWCNT / PANI, обработанных растворами буферов с различным значением pH. Видно (рис. 2, *a*), что максимальной проводимостью характеризуется композит, обработанный наиболее кислым раствором буфера со значением pH = 1,0. Увеличение водородного показателя буферного раствора приводит к неравномерному уменьшению проводимости композита во всем исследованном температурном диапазоне. Например, при температуре 296 K возрастание pH буфера от 1,0 до 2,0 обеспечивает снижение удельной проводимости с 32 до 22 См/см, а при его увеличении от 3,5 до 7 проводимость снижается от 18,5 до 16,5 См/см. Известно, что при значении pH буфера, равном 1,5 – 2,0, в пленках PANI наблюдается резкий переход из основной эмеральдинной формы (в ней он представляет собой диэлектрик) в допированную кислую эмеральдинную форму, когда его проводимость резко возрастает [14]. Однако в данном случае обращает на себя внимание тот факт, что обработка композита MWCNT / PANI в кислом (pH = 1,0) и нейтральном (pH = 7) буферах приводит всего лишь к двукратному изменению его проводимости, в то время как обработка порошка или достаточно толстой пленки PANI в растворах с такими же показателями кислотности, снижает его проводимость на несколько порядков величины [14, 15].

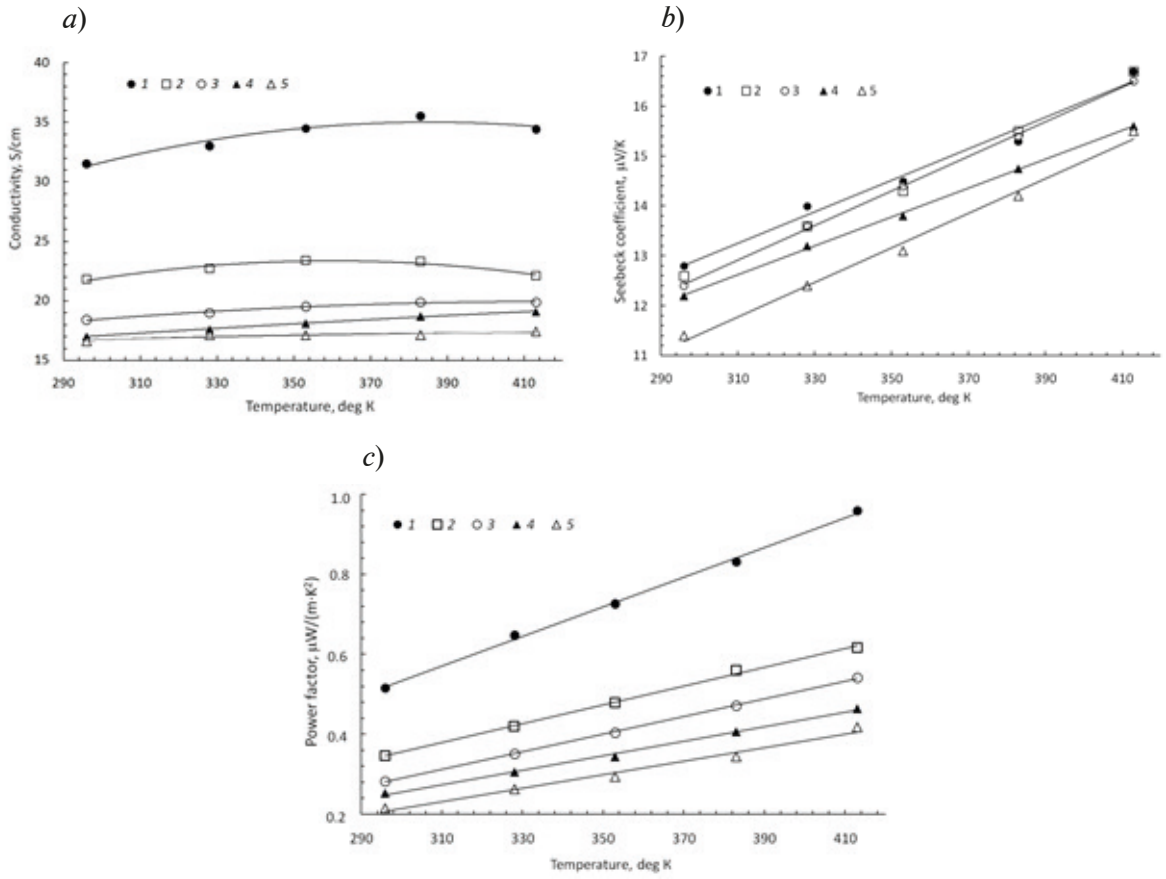


Рис. 2. Температурные зависимости проводимости (*a*), коэффициента Зеебека (*b*) и коэффициента мощности (*c*) для образцов композита MWCNT/PANI после обработки растворами с разными значениями pH: 1,0 (*1*), 2,0 (*2*), 3,5 (*3*); 6,0 (*4*) и 7,0 (*5*)

Исследование электропроводности PANI показывает, что контакт между агрегатами последнего иерархического уровня лимитирует транспорт носителей заряда [16]. Такие агрегаты представляют собой бесформенные рыхлые частицы микронных размеров, которые формируются в основном в ходе седиментации PANI по завершении синтеза. Наибольшей электропроводностью обладают наносферы – частицы первого иерархического уровня, где полимерные цепи плотно упаковываются в процессе синтеза. Дедопирование микронных частиц снижает критическим образом электропроводность материала. В то же время дедопирование плотноупакованных сфер происходит только на периферии частиц и не ведет к значительному снижению их проводимости. По-видимому, оболочка композита MWCNT / PANI представляет собой плотноупакованный слой макромолекул, аналогичный частицам первого иерархического уровня. Она имеет повышенную электропроводность и слабо дедопируется, поэтому проводимость MWCNT / PANI с ростом pH снижается незначительно.

Характер температурной зависимости проводимости исследуемого композита оказывается различным для образцов, обработанных буферными растворами с разными значениями pH. При обработке композита буфером с pH = 7 температура лишь незначительно влияет на удельную проводимость, которая с ростом температуры приблизительно линейно возрастает с 16,5 до 17,5 См/см при повышении температуры от 295 до 413 K. При pH = 6,0 линейный характер зависимости $\sigma(T)$ сохраняется, но наклон прямой заметно увеличивается, т. е. нагрев образца приводит к более существенному росту его проводимости. Начиная с pH = 3,5 зависимость $\sigma(T)$ перестает быть линейной, на ней начинает формироваться максимум (при $T \approx 370$ K), который для образцов с высокой проводимостью становится явно выраженным.

Повторение цикла нагрева образца высокопроводящего композита MWCNT / PANI до 413 K с его последующим охлаждением показало, что зависимости σ(*T*), измеренные в процессе нагрева и охлаждения, не совпадают. На рис. 3 представлен график зависимости σ(*T*) для композита MWCNT / PANI, обработанного буферным раствором с pH = 1,0, при его нагреве и последующем охлаждении. Видно, что кривая σ(*T*), относящаяся к охлаждению, проходит ниже таковой, полученной при нагреве. Различие в величинах σ составляет около 2 См/см. Можно предположить, что причиной уменьшения проводимости композита при нагреве образцов свыше 370 K может являться потеря ими воды и допанта. На возможность реализации такого процесса в PANI при повышенной температуре указывают авторы работы [17].

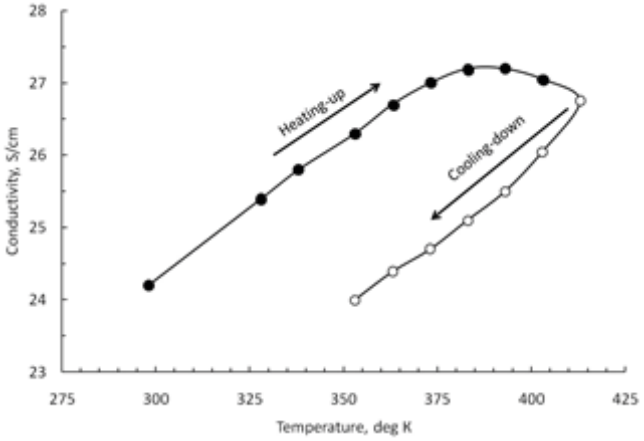


Рис. 3. Изменение удельной проводимости образца композита MWCNT/PANI, обработанного раствором буфера с pH = 1,0 при его нагреве и последующем охлаждении

График температурной зависимости коэффициента Зеебека исследуемых образцов, обработанных буферными растворами с различными pH, представлен на рис. 2, *b*. Значение α демонстрирует линейный рост во всем исследуемом температурном диапазоне для всех значений pH. Увеличение коэффициента Зеебека относительно начального значения при $T = 413$ K составило примерно 30 %. На графике видно, что самым большим коэффициентом Зеебека во всем диапазоне температур обладает образец с наибольшей проводимостью, обработанный раствором буфера с pH = 1,0. По мере увеличения показателя pH значение α снижается.

На основе полученных результатов измерений σ(*T*) и α(*T*) были рассчитаны температурные зависимости коэффициента мощности для всех образцов (см. рис. 2, *c*). Видно, что вне зависимости от степени их допирования увеличение температуры приводит к возрастанию величины *P* по закону, близкому к линейному. Наибольшее значение коэффициента мощности характерно для композиционного материала, обработанного раствором буфера с pH = 1,0. У этого образца при комнатной температуре $P \approx 0{,}5$ мкВт/(м·K^2), а при 413 K этот коэффициент возрастает до значения около 1 мкВт/(м·K^2). Однако при столь высокой температуре его термоэлектрические характеристики будут постепенно ухудшаться со временем вследствие ухода допанта из образца. Поэтому, несмотря на значительное повышение коэффициента мощности, использование данного композита при температуре выше 370 K оказывается нецелесообразным.

Заключение

Таким образом, исследование влияния температуры на композиционный материал MWCNT/PANI при различной степени допирования PANI, выполненное в настоящей работе, показало, что набольшим значением коэффициента мощности, равным 0,5 мкВт/(м·K^2) при комнатной температуре, обладает композит с наибольшей проводимостью. Сопоставление полученных результатов с известными литературными данными

позволяет заключить, что коэффициент мощности данного образца, характеризуемого хаотичным расположением нанотрубок, существенно превосходит значение P для композита MWCNT / PANI, полученного авторами работы [10] с применением значительно более сложной технологии – метода электроспиннинга, который обеспечивает упорядочение нанотрубок MWCNT друг относительно друга.

Несмотря на то, что величина P исследованных образцов возрастает при увеличении температуры (при $T = 370$ K величина $P \approx 0{,}8$ мкВт/(м·K^2)), использование данного композита при температуре свыше 370 K представляется нецелесообразным, поскольку, как можно полагать, при высокой температуре происходит постепенный уход из него допанта и снижение проводимости композита.

В качестве следующего шага, направленного на улучшение термоэлектрических характеристик композита MWCNT / PANI, предполагается разработка технологии изготовления образцов, обеспечивающей повышение пористости покрытия PANI на поверхности MWCNT.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Булат Л. П., Сергиенко О. И., Савоскула В. А.** Термоэлектрические преобразователи энергии: экологические аспекты // Физика и техника полупроводников. 2017. Т. 51. № 7. С. 970–974.

2. **Korotkov A. S., Loboda V. V.** Thermoelectricity: From history to modernity through the CASS activity // IEEE Circuits and Systems Magazine. 2021. Vol. 21. No. 3. Pp. 57–65.

3. **Wang H., Yu C.** Organic thermoelectrics: materials preparation, performance optimization, and device integration // Joule. 2019. Vol. 3. No. 1. Pp. 53–80.

4. **Beretta D., Neophytou N., Hodges J. M., et al.** Thermoelectrics: From history, a window to the future // Materials Science and Engineering: R: Reports. 2019. Vol. 138. October. P. 100501.

5. **Buslaev R., Galitskaya A., Loboda V.** Simulation of flexible thermoelectric generators based on Bi_2Te_3/Sb_2Te_3 synthesized by electrochemical deposition method // Proceedings of the 2019 IEEE International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). October 17–18, 2019. St. Petersburg. Peter the Great Polytechnical University, Institute of Electrical and Electronics Engineers. Pp. 54–57.

6. **Chatterjee K., Ghosh T. K.** Thermoelectric materials for textile applications // Molecules. 2021. Vol. 26. No. 11. P. 3154.

7. **Mateeva N., Niculescu H., Schlenoff J., Testardi L. R.** Correlation of Seebeck coefficient and electric conductivity in polyaniline and polypyrrole // Journal of Applied Physics. 1998. Vol. 83. No. 6. Pp. 3111–3117.

8. **Zhang K., Davis M., Qiu J., Hope-Weeks L., Wang S.** Thermoelectric properties of porous multi-walled carbon nanotube/polyaniline core/shell nanocomposites // Nanotechnology. 2012. Vol. 23. No. 38. P. 385701.

9. **Yao Q., Chen L., Zhang W., Liufu S., Chen X.** Enhanced thermoelectric performance of single-walled carbon nanotubes/polyaniline hybrid nanocomposites // ACS (American Chemical Society) Nano. 2010. Vol. 4. No. 4. Pp. 2445–2451.

10. **Wang Q., Yao Q., Chang J., Chen L.** Enhanced thermoelectric properties of CNT/PANI composite nanofibers by highly orienting the arrangement of polymer chains // Journal of Materials Chemistry. 2012. Vol. 22. No. 34. Pp. 17612–17618.

11. **Yao Q., Wang Q., Wang L., Chen L.** Abnormally enhanced thermoelectric transport properties of SWNT/PANI hybrid films by the strengthened PANI molecular ordering // Energy & Environmental Science. 2014. Vol. 7. No. 11. Pp. 3801–3807.

12. **Moniruzzaman M., Winey K. I.** Polymer nanocomposites containing carbon nanotubes // Macromolecules. 2006. Vol. 39. No. 16. Pp. 5194–5205.

13. **Shishov M., Moshnikov V., Sapurina I.** Self-organization of polyaniline during oxidative polymerization: formation of granular structure // Chemical Papers. 2013. Vol. 67. No. 8. Pp. 909–918.

14. **Иванов В. Ф., Грибкова О. Л., Ванников А. В.** Регулирование в широких пределах проводимости полианилина при межфазном допировании полианилинового слоя // Электрохимия. 2006. Т. 42. № 3. С. 304–309.

15. **McManus P. M., Cushman R. J., Yang S. C.** Influence of oxidation and protonation on the electrical conductivity of polyaniline // Journal of Physical Chemistry. 1987. Vol. 91. No. 3. Pp. 744–747.

16. **Moučka R., Kazantseva N., Sapurina I.** Electric properties of MnZn ferrite/polyaniline composites: the implication of polyaniline morphology // Journal of Materials Science. 2018. Vol. 53. No. 3. Pp. 1995–2004.

17. **Prokeš J., Stejskal J.** Polyaniline prepared in the presence of various acids: 2. Thermal stability of conductivity // Polymer Degradation and Stability. 2004. Vol. 86. No. 1. Pp. 187–195.

REFERENCES

1. **Bulat L. P., Sergiyenko O. I., Savoskula V. A.,** Thermoelectric energy converters: Environmental aspects, Semiconductors. 51 (7) (2017) 932–935.

2. **Korotkov A. S., Loboda V. V.,** Thermoelectricity: From history to modernity through the CASS activity, IEEE Circ. Syst. Mag. 21 (3) (2021) 57–65.

3. **Wang H., Yu C.,** Organic thermoelectrics: Materials preparation, performance optimization, and device integration, Joule. 3 (1) (2019) 53–80.

4. **Beretta D., Neophytou N., Hodges J. M., et al.,** Thermoelectrics: From history, a window to the future, Mater. Sci. Eng. R. 138 (October) (2019) 100501.

5. **Buslaev R., Galitskaya A, Loboda V.,** Simulation of flexible thermoelectric generators based on Bi2Te3/Sb2Te3 synthesized by electrochemical deposition method, Proc. 2019 IEEE Int. Conf. on Elect. Eng. Photonics (EExPolytech), Oct. 17–18, 2019. St. Petersburg. Peter the Great Polytechnical University, Institute of Electrical and Electronics Engineers (2019) 54–57.

6. **Chatterjee K., Ghosh T. K.,** Thermoelectric materials for textile applications, Molecules. 26 (11) (2021) 3154.

7. **Mateeva N., Niculescu H., Schlenoff J., Testardi L. R.,** Correlation of Seebeck coefficient and electric conductivity in polyaniline and polypyrrole, J. Appl. Phys. 83 (6) (1998) 3111–3117.

8. **Zhang K., Davis M., Qiu J., et al.,** Thermoelectric properties of porous multi-walled carbon nanotube/polyaniline core/shell nanocomposites, Nanotechnol. 23 (38) (2012) 385701.

9. **Yao Q., Chen L., Zhang W., et al.,** Enhanced thermoelectric performance of single-walled carbon nanotubes/polyaniline hybrid nanocomposites, ACS Nano. 4 (4) (2010) 2445–2451.

10. **Wang Q., Yao Q., Chang J., Chen L.,** Enhanced thermoelectric properties of CNT/PANI composite nanofibers by highly orienting the arrangement of polymer chains, J. Mater. Chem. 22 (34) (2012) 17612–17618.

11. **Yao Q., Wang Q., Wang L., Chen L.,** Abnormally enhanced thermoelectric transport properties of SWNT/PANI hybrid films by the strengthened PANI molecular ordering, Energy & Environ. Sci. 7 (11) (2014) 3801–3807.

12. **Moniruzzaman M., Winey K. I.,** Polymer nanocomposites containing carbon nanotubes, Macromol. 39 (16) (2006) 5194–5205.

13. **Shishov M., Moshnikov V., Sapurina I.,** Self-organization of polyaniline during oxidative polymerization: formation of granular structure, Chem. Papers. 67 (8) (2013) 909–918.

14. **Ivanov B. F., Gribkova O. L., Vannikov A. V.,** Wide-range regulation of polyaniline conduction by interphase doping of a polyaniline film, Russian Journal of Electrochemistry. 42 (3) (2006) 263–267.

15. **McManus P. M., Cushman R. J., Yang S. C.,** Influence of oxidation and protonation on the electrical conductivity of polyaniline, J. Phys. Chem. 91 (3) (1987) 744–747.

16. **Moučka R., Kazantseva N., Sapurina I.,** Electric properties of MnZn ferrite/polyaniline composites: the implication of polyaniline morphology, J. Mater. Sci. 53 (3) (2018) 1995–2004.

17. **Prokeš J., Stejskal J.,** Polyaniline prepared in the presence of various acids: 2. Thermal stability of conductivity, Polym. Degr. Stab. 86 (1) (2004) 187–195.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ТРЕТЬЯКОВ Артем Александрович – *аспирант Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
tretartem@gmail.com
ORCID: 0000-0003-1009-8016

КАПРАЛОВА Виктория Маратовна – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
kapralova2006@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-9050-4453

ЛОБОДА Вера Владимировна – *кандидат физико-математических наук, директор Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vera_loboda@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3103-7060

САПУРИНА Ирина Юрьевна – *доктор химических наук, ведущий научный сотрудник Института высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
199004, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В. О., 31
sapurina@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7579-7577

СУДАРЬ Николай Тобисович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы электроники и микросистемной техники Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sudar53@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7380-7727.

THE AUTHORS

TRETYAKOV Artem A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
tretartem@gmail.com
ORCID: 0000-0003-1009-8016

KAPRALOVA Viktoria M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
kapralova2006@yandex.ru
ORCID: 0000-0001-9050-4453

LOBODA Vera V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vera_loboda@mail.ru
ORCID: 0000-0003-3103-7060

SAPURINA Irina Yu.
Institute of Macromolecular Compounds RAS
31 Bolshoy Ave. V. Isl., St. Petersburg, 199004, Russia
sapurina@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7579-7577

SUDAR Nikolay T.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
sudar53@mail.ru
ORCID: 0000-0001-7380-7727.

Статья поступила в редакцию 31.05.2022. Одобрена после рецензирования 19.06.2022. Принята 19.06.2022.
Received 31.05.2022. Approved after reviewing 19.06.2022. Accepted 19.06.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Научная статья
УДК 536.2
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15312

ЭФФЕКТИВНЫЕ ДИФФУЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИКРИСТАЛЛА

Д. М. Пашковский [1] ✉, К. П. Фролова [2], Е. Н. Вильчевская [2]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия;

[2] Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

✉ mr.vivivilka@icloud.com

Аннотация. Работа посвящена определению эффективных коэффициентов диффузии поликристаллического материала, для описания которого используется модель двухфазного композита, состоящего из матрицы и сфероидальных неоднородностей. Для учета взаимодействия между неоднородностями используется схема Мори – Танаки. В модели также учтен эффект сегрегации. Предложены две модели описания поликристаллического материала. В первой зерна моделируются неоднородностями, а граница зерен матрицей; во второй модели, наоборот, граница зерен моделируется неоднородностями, а зерна – матрицей материала. Результаты моделирования сравниваются с экспериментальными данными. Показано, что важно учитывать параметр сегрегации при расчете эффективных коэффициентов диффузии поликристаллического материала.

Ключевые слова: двухфазный композит, поликристаллический материал, схема Мори – Танаки, эффективные диффузионные свойства, эффект сегрегации

Финансирование: работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 18–19–00160.

Для цитирования: Пашковский Д. М., Фролова К. П., Вильчевская Е. Н. Эффективные диффузионные свойства поликристалла // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 154–168. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15312

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15312

EFFECTIVE DIFFUSION PROPERTIES OF A POLYCRYSTAL

D. M. Pashkovsky [1] ✉, K.P. Frolova [2], E. N. Vilchevskaya [2]

[1] Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia;

[2] Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, St. Petersburg, Russia

✉ mr.vivivilka@icloud.com

Abstract. The paper deals with the calculation of polycrystalline material effective diffusion coefficients. The polycrystalline material has been simulated by two-phase composite consisting of matrix and spheroidal inhomogeneities. The Mori – Tanaka scheme was used to account interactions between inhomogeneities. The proposed simulation took into account the effect of segregation as well. The paper put forward two models to describe the polycrystalline material.

© Пашковский Д. М., Фролова К. П., Вильчевская Е. Н., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

The former considered grains to be inhomogeneities, and grain boundaries to be a material matrix. The latter, in contrast, did the grain boundaries to be inhomogeneities, and the grains to be a material matrix. The simulation results were compared with experimental data. The importance of taking into account the segregation parameter when calculating effective diffusion coefficients of polycrystalline material was shown.

Keywords: two-phase composite, polycrystalline material, Mori – Tanaka scheme, effective diffusion properties, segregation effect

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Project No. 18–19–00160).

For citation: Pashkovsky D. M., Frolova K. P., Vilchevskaya E. N., Effective diffusion properties of a polycrystal, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 154–168. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15312

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

Введение

Задача определения эффективных коэффициентов диффузии твердых тел является актуальной для многих областей промышленности и строительства. Процесс диффузии газа в твердом теле может приводить к образованию пор, трещин или других микродефектов, которые со временем могут развиваться и приводить к разрушению элементов конструкции. Поэтому важно учитывать концентрации диффундирующего вещества при оценке прочностных свойств материала.

К основным практическим приложениям данной проблемы следует отнести борьбу с водородным охрупчиванием металлов и сплавов и разрушением тонких пленок. При водородном охрупчивании, вследствие диффузии водорода, в металлическом сплаве происходит снижение прочностных свойств, которое в дальнейшем приводит к разрушению материала [1]. Данный эффект особенно важно учитывать в конструкциях водородной энергетики или при проектировании топливных элементов в транспортных средствах, работающих на водородном топливе. Под тонкими пленками в данном случае подразумеваются тонкие слои другого материала, нанесенные на элементы конструкции. Одним из самых характерных примеров является антикоррозийное покрытие. Наличие дефектов в таких покрытиях может приводить к повышенным концентрациям диффундирующего вещества и нарушению изоляции металлов от агрессивной среды.

В данной работе решается задача количественного определения коэффициентов диффузии поликристаллического материала, который представляет собой неоднородный материал, состоящий из большого числа произвольно ориентированных монокристаллов, каждый из которых может иметь разные химические и физические свойства.

Монокристалл в литературе также называют «зерном», а пространство между монокристаллами – «границей зерен» [2].

Существует много различных математических моделей для количественного определения коэффициентов диффузии поликристаллического материала. Так, например, в работе Э. В. Харта [3] были получены коэффициенты объемной диффузии для случая, когда в материале имеются дислокации; при этом использовалось уравнение, напоминающее правило смесей. В работе Р. М. Баррера [4] использовано сходство между процессами теплопроводности и диффузии, что позволило определить тензор эффективных коэффициентов диффузии аналогично тензору проводимости в задаче теплопроводности. Также это позволило получить соотношение между эффективными характеристиками и свойствами составляющих материала. Подход Баррера также используется в других работах [5, 6].

В работе И. Чжана и Л. Лю [7] было отмечено, что, в отличие от температуры, в задаче теплопроводности, концентрация в задаче диффузии не является непрерывной функцией на границе раздела фаз. Это обусловлено тем, что диффундирующее вещество скапливается на границе или внутри неоднородностей, поэтому концентрация имеет скачок. Данное

© Pashkovsky D. M., Frolova K. P., Vilchevskaya E. N., 2022. Published by Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University.

явление носит название эффекта сегрегации. В работах И. В. Беловой и Г. Е. Марч [8, 9] введен параметр сегрегации в уравнения Харта и Максвелла – Гарнетта для расчета эффективных свойств материала, состоящего из границ зерен и сферических зерен. В работе А. Г. Князевой и др. [2] метод Мори – Танаки и схема гомогенизации Максвелла представлены в терминах тензоров вклада в диффузию, на основании чего рассчитаны эффективные коэффициенты диффузии изотропного материала, состоящего из сфероидальных зерен, представляющих собой неоднородности, и границ зерен, представляющих собой матрицу. При этом в статье [2] эффект сегрегации не был учтен на этапе осреднения полей. В работе [10] эффект сегрегации был учтен на всех этапах решения задачи гомогенизации при рассмотрении трансверсально-изотропного материала с порами, анизотропия которого обусловлена геометрией микроструктуры.

Целью работы является сравнение двух подходов к моделированию поликристаллического материала.

При этом в первом из них зерна моделируются неоднородностями, а граница зерен матрицей, а во втором наоборот – граница зерен моделируется неоднородностями, а зерна – матрицей материала. Для того чтобы сравнить эти модели, требуется построить тензор эффективных коэффициентов диффузии $\mathbf{D}_{eff}$. Для его построения используются результаты, полученные в работе [10]. При этом тензор $\mathbf{D}_{eff}$ будет иметь одинаковый вид для обеих моделей материала. Различие моделей будет отражено в количественных значениях используемых микроструктурных параметров.

Постановка задачи

Для достижения поставленной цели решаются две задачи. Во-первых, требуется выбрать модель описания поликристаллического материала (рис. 1, I), которая бы наилучшим образом аппроксимировала эффективные диффузионные коэффициенты реального материала. Во-вторых, требуется построить выражение для тензора $\mathbf{D}_{eff}$. Для этого нужно решить задачу гомогенизации (рис. 1, II). Далее рассмотрим каждую из задач подробнее.

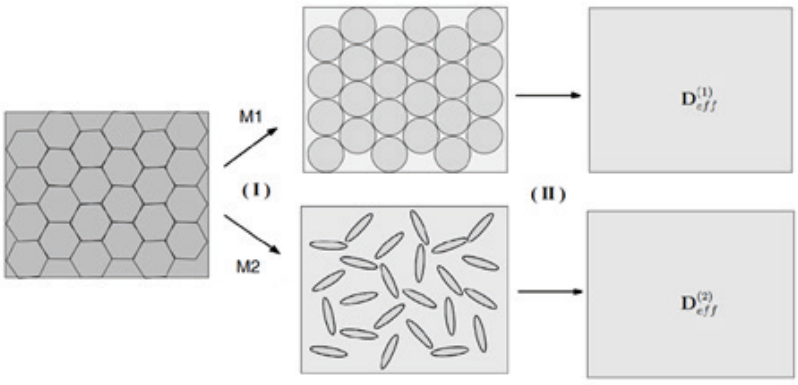
Для описания поликристаллического материала рассматриваются две модели двухфазного композита (см. рис. 1):

матрица – граница зерен, неоднородности – зерна (M1);

матрицы – зерна, неоднородности – граница зерен (M2).

В обеих моделях композит состоит из матрицы материала и помещенных в нее изолированных неоднородностей; при этом матрица материала и неоднородности обладают разными физическими свойствами.

Модели M1 и M2 различаются только значениями микроструктурных параметров: параметра сегрегации s и отношения главных полуосей сфероида γ (см. таблицу). Распределение неоднородностей считается изотропным.



PM 2PhC HAM

Рис. 1. Схема аппроксимации поликристаллического материала (PM) с использованием модели 1 (M1) и модели 2 (M2) в две стадии: моделирование (I), гомогенизация (II); 2PhC – 2-фазный композит, HAM – однородный анизотропный материал; справа указаны соответствующие тензоры

Таблица

Параметры использованных моделей и их значения

Номер модели	Параметр сегрегации s	Отношение главных полуосей сфероида γ
1	$s > 1$	1,00
2	$s < 1$	0,05 – 0,10

На границе раздела фаз «матрица (+) / неоднородность (−)» ставятся следующие граничные условия [8, 9]:

$$D_0 \left.\frac{\partial c(x)}{\partial n}\right|_{x\to\partial V_1+} = D_1 \left.\frac{\partial c(x)}{\partial n}\right|_{x\to\partial V_1-}; \quad (1)$$

$$\left. c(x)\right|_{x\to\partial V_1+} = s\left. c(x)\right|_{x\to\partial V_1-}, \quad (2)$$

где D_0, D_1 − коэффициенты диффузии матрицы материала и неоднородности, соответственно; $c(x)$ − функция концентрации от координаты; ∂V_1 − граница неоднородности; **n** − вектор внешней нормали к границе неоднородности, s − параметр сегрегации.

Условие (1) отвечает за равенство потоков на границе раздела фаз, а (2) описывает эффект сегрегации, т. е. скачок концентрации на границе между матрицей и неоднородностью.

В модели М1 параметр сегрегации s принимает значение больше единицы, а в М2 он принимает значения меньше единицы. Это следует из того, что диффундирующее вещество скапливается вдоль границ зерен.

В М1 рассматриваются неоднородности сферической формы, поэтому γ = 1; в М2 граница зерен представляет собой сильно сплюснутый сфероид, поэтому параметр γ берется в диапазоне от 0,05 до 0,10.

Матрица и неоднородности состоят из изотропного материала с тензорами диффузии, имеющими следующий вид:

$$\mathbf{D}_0 = D_0\mathbf{E},\ \mathbf{D}_i = \mathbf{D}_i\mathbf{E}, \quad (3)$$

где D_i − коэффициент диффузии i-ой неоднородности, **E** − единичный тензор второго ранга.

Для модели М1 $D_i < D_0$, так как коэффициент диффузии зерен всегда меньше, чем коэффициент границы зерен. Для модели М2 наоборот: $D_i > D_0$.

Далее после выбора модели описания поликристаллического материала строится выражение для тензора эффективных коэффициентов диффузии $\mathbf{D}_{eff}$. Для этого требуется осуществить процедуру гомогенизации, которая заключается в переходе от неоднородного материала к однородной континуальной среде с анизотропными свойствами [11].

В процессе решения задачи гомогенизации учитывается взаимодействие между неоднородностями. Для этого используется схема Мори − Танаки, основная идея которой заключается в том, что каждая из неоднородностей помещается в однородное поле (в контексте задачи диффузии в качестве такого поля выступает либо градиент концентрации, либо диффузионный поток), равное среднему полю по матрице материала [12]. Схема Мори − Танаки относится к методам эффективного поля, к которым также относят широко используемые схемы Максвелла и Канауна − Левина. Схема Мори − Танаки, в отличие от двух последних схем, не имеет сингулярности при объемной доле неоднородностей, равной единице, что позволяет корректно использовать модель М1, так как в ней концентрация неоднородностей составляет около 95 − 99 %.

Вклад изолированной неоднородности

Для определения вклада изолированной неоднородности в эффективные свойства материала, проводятся рассуждения, аналогичные приведенным в нашей статье [10]. При решении задачи гомогенизации в рассмотрение вводятся концентрации и потоки, осредненные по объему. Операция осреднения обозначается угловыми скобками, и подстрочным буквенным обозначением объема, по которому идет осреднение.

Предполагается, что на границе рассматриваемого репрезентативного объема V задана концентрация $c(\mathbf{x})|\partial V = \mathbf{G}^0 \cdot \mathbf{x}$. Тогда значения градиента концентрации $\langle \nabla c \rangle_V$, осредненного по репрезентативному объему V, будут равны $\mathbf{G}^0$. При этом поток $\langle \mathbf{J} \rangle_V$, также осредненный по репрезентативному объему V, зависит от микроструктуры материала.

Градиент концентрации $\langle \nabla c \rangle_V$ складывается из среднего градиента концентрации вещества $\langle \nabla c \rangle_m$, распределенного в матрице, среднего градиента концентрации вещества $\langle \nabla c \rangle_{in}$, распределенного внутри неоднородности объемом V_1, и вещества, скопившегося на границе раздела матрицы и неоднородности в результате возникающего эффекта сегрегации:

$$\mathbf{G}^0 = \left\langle \nabla c \right\rangle_V = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right)\left\langle \nabla c \right\rangle_m + \frac{V_1}{V}\left\langle \nabla c \right\rangle_{in} + \frac{1}{V}\int\limits_{\partial V_1} \mathbf{n}(c_0 - c_1)d(\partial V_1). \tag{4}$$

С учетом условия (2) выражение (4) преобразуется к следующему виду:

$$\mathbf{G}^0 = \left\langle \nabla c \right\rangle_V = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right)\left\langle \nabla c \right\rangle_m + s\frac{V_1}{V}\left\langle \nabla c \right\rangle_{in}. \tag{5}$$

Поток $\langle \mathbf{J} \rangle_V$ непрерывен при переходе через границу раздела фаз и состоит из двух слагаемых:

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = \left(1 - \frac{V_1}{V}\right)\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_m + \frac{V_1}{V}\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_{in}. \tag{6}$$

С учетом первого закона Фика выражение (6) принимает следующий вид:

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\left(1 - \frac{V_1}{V}\right)\mathbf{D}_0 \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_m - \frac{V_1}{V}\mathbf{D}_1 \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_{in}. \tag{7}$$

Выражение (7) с учетом (5) преобразуется к виду

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_V - \frac{V_1}{V}(\mathbf{D}_1 - s\mathbf{D}_0) \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_{in}. \tag{8}$$

Далее $\langle \nabla c \rangle_{in}$ выражается через $\langle \nabla c \rangle_V$:

$$\langle \nabla_c \rangle_{in} = \mathbf{\Lambda}_c \cdot \langle \nabla_c \rangle_V = \mathbf{\Lambda}_c \cdot \mathbf{G}^0. \tag{9}$$

Тензор $\mathbf{\Lambda}_c$ является решением задачи Эшелби для диффузии. Выражение для этого тензора получено в работе [10] и имеет вид:

$$\mathbf{\Lambda}_c = [s\mathbf{E} + \mathbf{P} \cdot (\mathbf{D}_1 - \mathrm{s}\mathbf{D}_0)]^{-1}, \tag{10}$$

где $\mathbf{P}$ – тензор Хилла.

Уравнение (8) с учетом (9) преобразуется следующим образом:

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\left(\mathbf{D}_0 + \frac{V_1}{V}(\mathbf{D}_1 - s\mathbf{D}_0) \cdot \mathbf{\Lambda}_c\right) \cdot \mathbf{G}^0 = \mathbf{D}_{eff} \cdot \mathbf{G}^0. \tag{11}$$

Таким образом, неоднородный материал, состоящий из матрицы и неоднородности, был заменен однородным анизотропным материалом с тензором эффективной диффузии $\mathbf{D}_{eff}$.

Метод Мори – Танаки

В данном разделе рассматривается материал общего вида, состоящий из матрицы и неоднородностей в количестве n. Взаимодействие неоднородностей описывается по схеме Мори – Танаки [12]. Основная идея этой схемы представлена на рис. 2. Каждая из неоднородностей рассматривается как изолированная и помещается в эффективное однородное поле градиента концентрации $\mathbf{G}^{eff}$, отличное от приложенного ($\mathbf{G}^0$) и равное среднему полю по матрице материала $\langle \nabla c \rangle_m$.

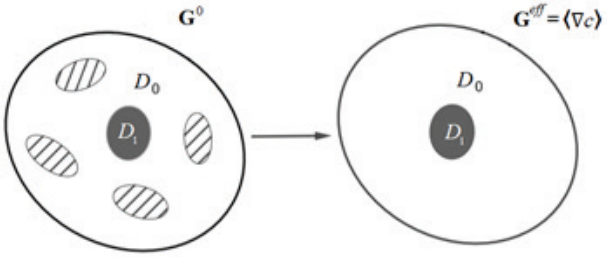


Рис. 2. Схема Мори – Танаки:
взаимодействие изолированных неоднородностей (слева) учитывается посредством помещения каждой из них в эффективное поле, равное среднему по матрице материала (справа)

Градиент концентрации $\langle \nabla c \rangle_V$ записывается следующим образом:

$$\mathbf{G}^0 = \langle \nabla c \rangle_V = \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \langle \nabla c \rangle_{in}^{i} + (1-\varphi)\langle \nabla c \rangle_m + \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n}\int_{\partial V_i} \mathbf{N}_i (c_0 - c_i) d(\partial V_i), \tag{12}$$

где V_i, ∂V_i – объем и граница i-ой неоднородности; $\mathbf{N}_i$ – нормаль к ее границе; φ – объемная доля неоднородностей.

С учетом граничных условий (1) и (2) выражение (12) преобразуется к следующему виду:

$$\mathbf{G}^0 = \langle \nabla c \rangle_V = s\frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \langle \nabla c \rangle_{in}^{i} + (1-\varphi)\langle \nabla c \rangle_m . \tag{13}$$

Из выражения (13) можно выразить $(1-\varphi)\langle \nabla c \rangle_m$:

$$(1-\varphi)\langle \nabla c \rangle_m = \mathbf{G}^0 - s\frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \langle \nabla c \rangle_{in}^{i} . \tag{14}$$

С учетом взаимодействия по схеме Мори – Танаки, $\langle \nabla c \rangle_{in}^{i}$ запишется следующим образом:

$$\langle \nabla c \rangle_{in}^{i} = \mathbf{\Lambda}_c^{\,i} \cdot \langle \nabla c \rangle_m \tag{15}$$

где $\Lambda_c^{\,i}$ – тензор концентрации для i-ой неоднородности.

Осредненный поток представляется в следующем виде:

$$\langle \mathbf{J} \rangle_V = \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \langle \mathbf{J} \rangle_{in}^{i} + (1-\varphi)\langle \mathbf{J} \rangle_m . \tag{16}$$

Далее выражение (16) преобразуется с учетом закона Фика:

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \mathbf{D}_i \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_{in}^{i} - \left(1-\varphi\right)\mathbf{D}_0 \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_m . \tag{17}$$

С учетом формулы (14) выражение (17) преобразуется к следующей форме:

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}^0 - \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \left(\mathbf{D}_i - s\mathbf{D}_0\right) \cdot \left\langle \nabla c \right\rangle_{in}^{i} . \tag{18}$$

Из соотношений (14) и (15) получается выражение для $\left\langle \nabla c \right\rangle_{in}^{i}$:

$$\left\langle \nabla c \right\rangle_{in}^{i} = \mathbf{\Lambda}_c^i \cdot \left[s\frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \mathbf{\Lambda}_c^i + \left(1-\varphi\right)\mathbf{E} \right]^{-1} \cdot \mathbf{G}^0 . \tag{19}$$

Далее форма (18) преобразуется, с учетом выражения (19), к следующему виду:

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\mathbf{D}_0 \cdot \mathbf{G}^0 - \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \left(\mathbf{D}_i - s\mathbf{D}_0\right) \cdot \mathbf{\Lambda}_c^i \cdot \left[s\frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \mathbf{\Lambda}_c^i + \left(1-\varphi\right)\mathbf{E} \right]^{-1} \cdot \mathbf{G}^0 . \tag{20}$$

С учетом закона Фика получаем формулу

$$\left\langle \mathbf{J} \right\rangle_V = -\mathbf{D}_{eff} \cdot \mathbf{G}^0 . \tag{21}$$

Из равенств (20) и (21) следует, что выражение для $\mathbf{D}_{eff}$ выглядит следующим образом:

$$\mathbf{D}_{eff} = \mathbf{D}_0 + \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \left(\mathbf{D}_i - s\mathbf{D}_0\right) \cdot \mathbf{\Lambda}_c^i \cdot \left[s\frac{1}{V}\sum_{i=1}^{n} V_i \mathbf{\Lambda}_c^i + \left(1-\varphi\right)\mathrm{E} \right]^{-1} . \tag{22}$$

Далее преобразуем выражение (22) с учетом осреднения и равенства $\mathbf{D}_i = \mathbf{D}_1$:

$$\mathbf{D}_{eff} = \mathbf{D}_0 + \varphi\left(\mathbf{D}_i - s\mathbf{D}_0\right) \cdot \left\langle \mathbf{\Lambda} \right\rangle_c \cdot \left[s\varphi\left\langle \mathbf{\Lambda} \right\rangle_c + \left(1-\varphi\right)\mathbf{E} \right]^{-1} . \tag{23}$$

Тензор эффективной диффузии

Для сфероидальных неоднородностей тензор Хилла принимает следующий вид [11]:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{D_0}\left[f_0(\gamma)(\mathbf{E} - \mathbf{nn}) + (1 - 2f_0(\gamma)\right]\mathbf{nn}), \tag{24}$$

где функция $f_0(\gamma)$ выражается как

$$f_0(\gamma) = \frac{\left[1-g(\gamma)\right]\gamma^2}{2(\gamma^2-1)}, \quad g(\gamma) = \begin{cases} \dfrac{1}{\gamma\sqrt{1-\gamma^2}} \arctan\left(\dfrac{\sqrt{1-\gamma^2}}{\gamma}\right), & \gamma < 1; \\ 1/3, & \gamma = 1; \\ \dfrac{1}{2\gamma\sqrt{1-\gamma^2}} \log\left(\dfrac{\gamma+\sqrt{\gamma^2+1}}{\gamma-\sqrt{\gamma^2+1}}\right), & \gamma > 1. \end{cases} \tag{25}$$

Для вычисления обратного тензора второго ранга используем формулу Шермана – Моррисона [14]. В общем случае она выглядит следующим образом:

$$\mathbf{B}^{-1} = (\mathbf{A} + \mathbf{n}_1\mathbf{n}_2)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{1}{1+\mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{n}_1}(\mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{n}_1\mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{A}^{-1}), \tag{26}$$

где $\mathbf{n}_1$, $\mathbf{n}_2$ – произвольные векторы; $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ – тензоры второго ранга.

В случае, когда тензор $\mathbf{A} = \mathbf{E}$, формула (26) преобразуется к виду

$$\mathbf{B}^{-1} = (\mathbf{E} + \mathbf{n}_1\mathbf{n}_2)^{-1} = \mathbf{E} - \frac{1}{1 + \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_1}\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2. \tag{27}$$

Вычислим обратный тензор в выражении (10) и получим следующее уравнение:

$$\left\langle [s\mathbf{E} + \mathbf{P} \cdot (\mathbf{D}_1 - s\mathbf{D}_0)]^{-1} \right\rangle = A_1\mathbf{E} + A_2 \left\langle \mathbf{nn} \right\rangle, \tag{28}$$

где

$$A_1 = \frac{1}{s + \dfrac{f_0(D_1 - D_0 s)}{D_0}},$$

$$A_2 = \frac{D_0(3f_0 - 1)(D_1 - D_0 s)}{(D_1 - 2D_1 f_0 + 2D_0 f_0 s)(D_1 f_0 + D_0 s - D_0 f_0 s)}.$$

В случае, когда существует некоторое преимущественное распределение неоднородностей по ориентациям, его можно учесть при помощи функции распределения следующего вида:

$$\psi_1(\upsilon, \xi) = \frac{1}{2\pi}\left[(\xi^2 + 1)\exp(-\xi\upsilon) - \frac{1}{2}\exp(-\xi\pi)\right], \quad \upsilon \in [0, \pi], \tag{29}$$

где ξ – параметр разброса ориентаций, υ – зенитный угол в сферической системе координат.

В работе [15] рассматривается другая функция распределения, которая имеет следующий вид:

$$\psi_2(\upsilon, \xi) = \frac{1}{2\pi}\left[(\xi^2 + 1)\exp(-\xi\upsilon) + \xi\exp\left(-\xi\frac{\pi}{2}\right)\right], \quad \upsilon \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right]. \tag{30}$$

На рис. 3 показано влияние параметра ξ на разброс ориентаций неоднородностей. При $\xi = 0$ все неоднорwодности ориентированы случайным образом, поэтому преимущественное направление отсутствует. При увеличении ξ ориентации неоднородностей стремятся к заданному преимущественному направлению.

Вектор ориентации задается в сферической системе координат следующим образом:

$$\mathbf{n} = \cos(\theta)\sin(\upsilon)\mathbf{e}_1 + \sin(\theta)\sin(\upsilon)\mathbf{e}_2 + \cos(\upsilon)\mathbf{e}_3, \tag{31}$$

где $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_3$ – ортонормированный базис; θ – азимутальный угол в сферической системе координат.

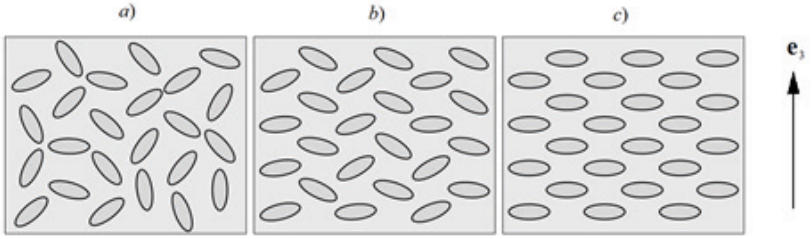


Рис. 3. Влияние значений параметра ξ на разброс ориентаций неоднородностей относительно преимущественного направления $\mathbf{e}_3$; $\xi = 0$ (*a*), 7(*b*) 100 (*c*)

Осредненный тензор $\langle \mathbf{nn} \rangle$, с учетом функции распределения ψ_1, вычисляется по следующей формуле:

$$\langle \mathbf{nn} \rangle = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \mathbf{nn} \psi_1(\upsilon, \xi) \sin(\varphi) d\theta d\upsilon. \tag{32}$$

В результате получаем следующее выражение для диады $\langle \mathbf{nn} \rangle$ (преимущественное направление $\mathbf{e}_3$):

$$\langle \mathbf{nn} \rangle = \mathrm{N}_1 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + \mathrm{N}_2 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 + \mathrm{N}_3 \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3. \tag{33}$$

Компоненты $\langle \mathbf{nn} \rangle$ имеют следующий вид:

$$\mathrm{N}_1 = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{6\pi}{\xi^2 + 9} - \frac{2\pi}{3(\xi^2 + 9)} \xi^2 \exp(-\pi\xi) \right], \tag{34}$$

$$\mathrm{N}_2 = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{6\pi}{\xi^2 + 9} - \frac{2\pi}{3(\xi^2 + 9)} \xi^2 \exp(-\pi\xi) \right], \tag{35}$$

$$\mathrm{N}_3 = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{6\pi}{\xi^2 + 9} + \frac{2\pi\xi^2}{\xi^2 + 9} + \frac{4\pi}{3(\xi^2 + 9)} \xi^2 \exp(-\pi\xi) \right]. \tag{36}$$

В случае функции распределения ψ_2 тензор $\langle \mathbf{nn} \rangle$ вычисляется по формуле

$$\langle \mathbf{nn} \rangle = \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} \mathbf{nn} \psi_2(\upsilon, \xi) \sin(\upsilon) d\theta d\upsilon. \tag{37}$$

Тензор $\langle \mathbf{nn} \rangle$ будет иметь вид (33), но с другими компонентами:

$$\mathrm{N}_1 = \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{\xi^2 + 9} \left[6\pi + 2\pi\xi \exp\left(-\frac{\pi}{2} \xi \right) \right] - \frac{\pi}{3} \xi \exp\left(-\frac{\pi}{2} \xi \right) \right\}, \tag{38}$$

$$\mathrm{N}_2 = \frac{1}{2\pi} \left\{ \frac{1}{\xi^2 + 9} \left[6\pi + 2\pi\xi \exp\left(-\frac{\pi}{2} \xi \right) \right] - \frac{\pi}{3} \xi \exp\left(-\frac{\pi}{2} \xi \right) \right\}, \tag{39}$$

$$\mathrm{N}_3 = \exp\left(-\frac{\pi}{2} \xi \right) \frac{\xi^2 + 3}{3(\xi^2 + 9)} \left[\xi + 3 \exp\left(\frac{\pi}{2} \xi \right) \right]. \tag{40}$$

Итоговое выражение для тензора $\langle \mathbf{\Lambda} \rangle_c$ имеет следующий вид:

$$\langle \mathbf{\Lambda} \rangle_c = \left\langle \left[s\mathbf{E} + \mathbf{P} \cdot \left(\mathbf{D}_1 - s\mathbf{D}_0 \right) \right]^{-1} \right\rangle = A_1 \mathbf{E} + A_2 \left(\mathrm{N}_1 \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + \mathrm{N}_2 \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2 + \mathrm{N}_3 \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3 \right). \tag{41}$$

Выражение для $\mathbf{D}_{eff}$ (22) преобразуется с учетом (41) к виду

$$\mathbf{D}_{eff} = D_0 \mathbf{E} + (D_1 - sD_0) \varphi \left[B_1 (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \mathbf{e}_2) + B_2 \mathbf{e}_3 \mathbf{e}_3 \right], \tag{42}$$

где коэффициенты B_1 и B_2 следуют выражениям:

$$B_1 = \frac{A_1 + A_2 \mathrm{N}_1}{s\varphi(A_1 + A_2 \mathrm{N}_1) + (1 - \varphi)},$$

$$B_2 = \frac{A_1 + A_2 \mathrm{N}_3}{s\varphi(A_1 + A_2 \mathrm{N}_3) + (1 - \varphi)}.$$

Построенное выражение для тензора эффективных коэффициентов диффузии (42) используется для обеих моделей поликристаллического материала. Различие моделей заключается только в числовых значениях микроструктурных параметров.

Результаты

Исследуем зависимость компонент тензора $\mathbf{D}_{eff}$ от различных обобщенных микроструктурных параметров. Коэффициент диффузии границы зерен принят равным $D_{gb} = 4 \cdot 10^{-2}$ м^2/с, а коэффициент диффузии зерна – равным $D_{gr} = 9 \cdot 10^{-5}$ м^2/с. Остальные микроструктурные параметры указаны выше в таблице.

Сначала сравним влияние функций ψ_1 и ψ_2 (распределения неоднородностей по ориентациям) на эффективные диффузионные свойства. В модели М1 материал изотропный, так как неоднородности имеют сферическую форму, поэтому эффективные коэффициенты диффузии не зависят от выбора функции распределения. Для модели М2 на рис. 4 показан график зависимости компонент тензора $\mathbf{D}_{eff}$ от параметра разброса ξ.

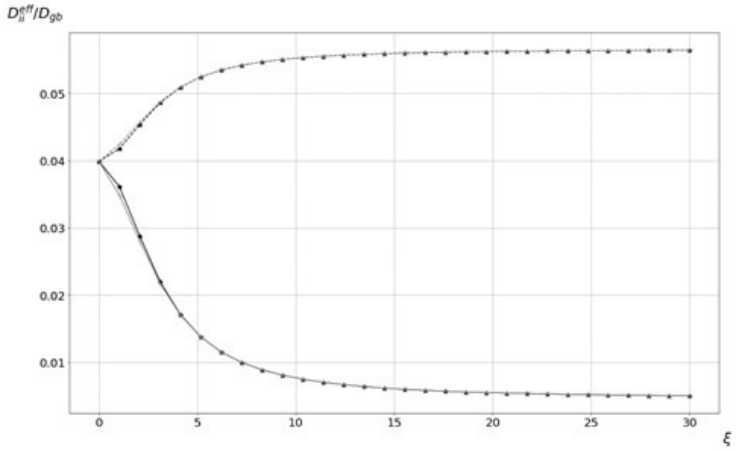


Рис. 4. Зависимости отношений D^{eff}_{11} / D_{gb} и D^{eff}_{33} / D_{gb} (компонент тензора $\mathbf{D}_{eff}$) от параметра ξ для функций ψ_1 и ψ_2 (распределения неоднородностей по ориентациям); модель М2; $\gamma = 0{,}05$; $\varphi_{gr} = 0{,}5$; $s = 1$ (все 4 кривые совпадают)

Функции распределения ψ_1 и ψ_2 определяются соответственно формулами (29) и (30). На рис. 4 видно, что эффективные свойства не зависят от того, какую из функций распределения выбрать для учета разброса ориентаций неоднородностей. Далее рассматривается $\mathbf{D}_{eff}$ с учетом функции распределения (29).

Также отметим, что при $\xi = 0$ выбор функции распределения не оказывает какого-либо влияния на эффективные коэффициенты диффузии, так как это соответствует изотропному распределению неоднородностей. Предположим, что в материале неоднородности распределены изотропно ($\xi = 0$), поэтому все компоненты тензора эффективных коэффициентов диффузии $\mathbf{D}_{eff}$ будут одинаковыми.

На рис. 5 показаны зависимости D^{eff} / D_{gb} от объемной доли зерен φ_{gr} для моделей М1 и М2. График построен для объемных долей в пределах от 0 до 1, для того чтобы проверить, совпадают ли две модели в предельных случаях при $s = 1$. В реальных же поликристаллических материалах концентрация зерен φ_{gr} близка к единице.

Две модели при значении параметра сегрегации $s = 1$ совпадают при $\varphi_{gr} = 0$ и 1 (см. рис. 5). Видно также, что поведение кривых для моделей М1 и М2 сильно различается при любых значениях объемной доли φ_{gr}, поэтому нельзя говорить об эквивалентности двух моделей при заданных значениях параметров (см. таблицу).

На рис. 6 показано влияние параметра сегрегации s на эффективный коэффициент диффузии при больших значениях объемных долей зерен.

Видно, что изменение параметра сегрегации больше влияет на зависимости для модели М2, чем на таковые для модели М1. Для обеих моделей характерно, что при увеличении параметра сегрегации эффективный коэффициент диффузии уменьшается. В модели М1

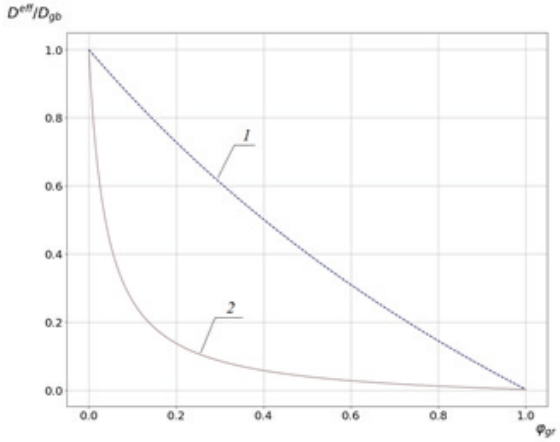


Рис. 5. Зависимости отношения D^{eff}_{33} / D_{gb} (компоненты тензора $\mathbf{D}_{eff}$) от объемной доли зерен φ_{gr} для обеих моделей; $\gamma = 1{,}00$ для модели М1 (кривая *1*) и $\gamma = 0{,}05$ для модели М2 (2); $s = 1{,}0$, $\xi = 0{,}0$

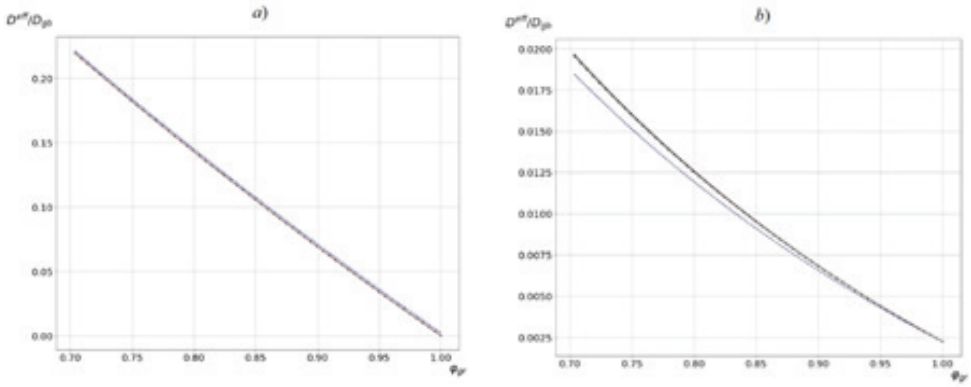


Рис. 6. Зависимости отношения D^{eff}_{33} / D_{gb} (компоненты тензора $\mathbf{D}_{eff}$) от объемной доли зерен φ_{gr} для моделей М1 (*a*) и М2 (*b*) при разных значениях параметра сегрегации *s*: 1, 10, 100 (*a*) и 1, 0,1 и 0,01 (*b*);
кривая $s = 1$ для М2 отделилась от остальных, которые совпали; для М1 совпали все кривые

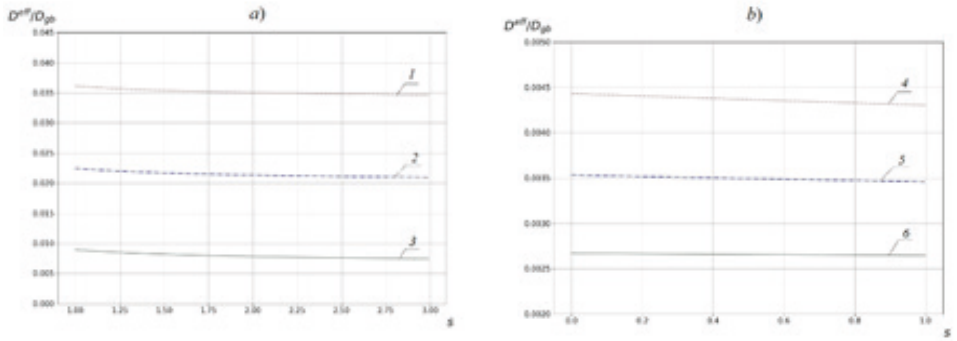


Рис. 7. Зависимости отношения D^{eff}_{33} / D_{gb} от параметра сегрегации *s* для моделей М1 (*a*) и М2 (*b*) при разных значениях параметров γ и φ_{gr}; $\xi = 0{,}0$; *a*) $\gamma = 1{,}00$, $\varphi = 0{,}95$ (*1*), 0,97 (*2*), 0,99 (*3*); *b*) $\gamma = 0{,}05$, $\varphi = 0{,}05$ (*4*), 0,03 (*5*), 0,01 (*6*)

при больших концентрациях неоднородностей параметр сегрегации практически не влияет на изменение эффективного коэффициента диффузии.

На рис. 7 показана зависимость D^{eff}_{33} / D_{gb} от параметра сегрегации s при больших объемных долях зерен (в диапазоне от 95 до 99%). Видно, что параметр сегрегации не оказывает большого влияния на изменение эффективного коэффициента диффузии для обеих моделей, но при этом наблюдается незначительное убывание коэффициента диффузии при увеличении s.

Верификация обеих моделей

В данном разделе проводится сравнение построенной математической модели с экспериментальными данными. В статье [16] приведены экспериментальные данные для зависимости коэффициента эффективной диффузии водорода в никеле от размера зерна d.

В модели М1 за сферические неоднородности приняты зерна с коэффициентом диффузии $D_1 = 9 \cdot 10^{-14}$ м^2/с, а за матрицу принята граница зерен с $D_0 = 4 \cdot 10^{-10}$ м^2/с. В модели М2 наоборот: $D_0 = 9 \cdot 10^{-14}$ м^2/с, а $D_1 = 4 \cdot 10^{-10}$ м^2/с. Остальные микроструктурные параметры указаны в таблице.

Объемная доля границ зерен вычисляется по формуле из статьи [16]:

$$\varphi_{GB} = Ad^p,\ A = 8{,}138 \cdot 10^{-3},\ p = -0{,}636. \tag{43}$$

Объемная доля зерен вычисляется по следующей формуле:

$$\varphi = 1 - \varphi_{GB} = 1 - Ad^p. \tag{44}$$

Сначала построим зависимость D^{eff} от размера зерна d для обеих моделей при $s = 1$.

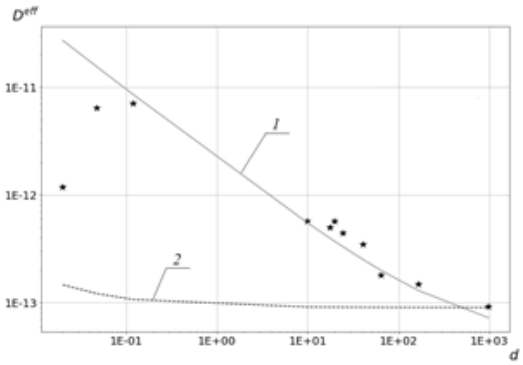


Рис. 8. Расчетные (линии) и экспериментальные (символы) зависимости компоненты тензора D^{eff} от d для моделей М1 (*1*) и М2 (*2*) при $s = 1$

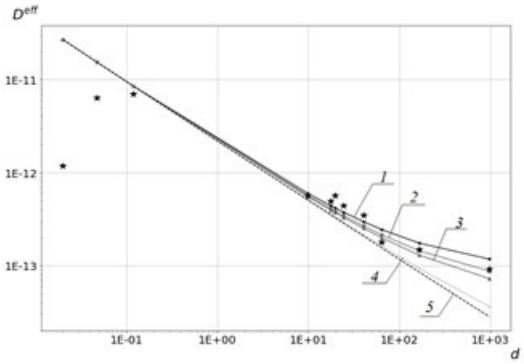


Рис. 9. Расчетные (линии) и экспериментальные (символы) зависимости компоненты тензора D^{eff} от d для модели М1 при разных значениях параметра сегрегации s: 1,0 (*1*); 1,5 (*2*); 2,0 (*3*); 10 (*4*) и 100 (*5*)

На рис. 8 видно, что модель М1 хорошо описывает экспериментальные данные. Ошибка аппроксимации экспериментальных данных для модели М2 очень большая, поэтому далее будет рассматриваться только модель М1.

На рис. 9 показано влияние параметра сегрегации s. Видно, что важно учитывать параметр сегрегации при аппроксимации эффективных коэффициентов диффузии. Наилучшее приближение экспериментальных данных достигается при значениях s в диапазоне от 1 до 2.

Таким образом, на практике для аппроксимации коэффициентов диффузии поликристаллического материала рекомендуется использовать модель М1 (матрица – границы зерен, неоднородности – зерна), а не модель М2 (матрица – зерна, а неоднородности – границы зерен). Также нужно отметить, что при размерах зерен меньше 0,1 мкм в экспериментальных данных наблюдается уменьшение значений эффективных коэффициентов диффузии, связанное с дополнительными внутренними эффектами. В работе [8] говорится о том, что уменьшение значения коэффициента диффузии связано с ростом количества растворенных веществ при уменьшении размера зерна. Поскольку этот эффект не учитывается в математической модели материала, обе модели и не описывают эффективные диффузионные свойства при размерах зерен меньше 0,1 мкм. Также отметим, что параметр сегрегации не оказывает существенного влияния на эффективный коэффициент диффузии в случае сферических зерен. Влияние параметра сегрегации при сфероидальных зернах в данной работе не исследовалось; решение этой задачи планируется осуществить в нашей дальнейшей работе.

Заключение

В работе рассмотрены два подхода к описанию поликристаллического материала. При этом в первом случае зерна моделируются неоднородностями, а граница зерен матрицей, а во втором наоборот: граница зерен моделируется неоднородностями, а зерна – матрицей материала. Модели используются для аппроксимации эффективных коэффициентов диффузии поликристаллического материала и учитывают эффект сегрегации, а также влияние зерен друг на друга; применяется схема Мори – Танаки. Построено аналитическое приближение тензора эффективных коэффициентов диффузии для случая сфероидальных неоднородностей. Проведена верификация моделей на экспериментальных данных. Показано, что важно учитывать параметр сегрегации при расчете эффективных коэффициентов диффузии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Яковлев Ю. А., Полянский В. А., Седова Ю. С., Беляев А. К.** Модели влияния водорода на механические свойства металлов и сплавов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета (ПНИПУ). Механика. 2020. № 3. С. 136–160.

2. **Knyazeva A. G., Grabovetskaya G. P., Mishin I. P., Sevostianov I.** On the micromechanical modelling of the effective diffusion coefficient of a polycrystalline material // Philosophical Magazine. 2015. Vol. 95. No. 19. Pp. 2046–2066.

3. **Hart E. W.** Thermal conductivity // Acta Metallurgica. 1957. Vol. 5. No. 9. Pp. 597–605.

4. **Barrer R. M.** Diffusion and permeation in heterogeneous media // Diffusion in polymers. Edited by J. Crank and G. S. Park. London: Academic Press, 1968. 259 p.

5. **Bell G. E., Crank J.** Influence of imbedded particles on steady-state diffusion // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions. 1974. Vol. 70. No. 2. Pp. 1259–2732.

6. **Cussler E. L.** Diffusion: mass transfer in fluid systems. Cambridge: Cambridge University Press, 2009. 631 p.

7. **Zhang Y., Liu L.** On diffusion in heterogeneous media // American Journal of Science. 2012. Vol. 312. No. 9. Pp. 1028–1047.

8. **Belova I. V., Murch G. E.** Diffusion in nanocrystalline materials // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2003. Vol. 64. No. 5. Pp. 873–878.

9. **Belova I. V., Murch G. E.** The effective diffusivity in polycrystalline material in the presence of interphase boundaries // Philosophical Magazine. 2004. Vol. 84. No. 1. Pp. 17–28.

10. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.** Effective diffusivity of transversely isotropic material with embedded pores // Materials Physics and Mechanics. 2021. Vol. 47. No. 6. Pp. 937–950.

11. **Kachanov M., Sevostianov I.** Micromechanics of materials, with applications. Switzerland: Springer International Publishing AG (part of Springer Nature), 2018. 712 p.

12. **Mori T., Tanaka K.** Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions // Acta Metallurgica. 1973. Vol. 21. No. 5. Pp. 571–574.

13. **Fricke H.** A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems. I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids // Physical Review. 1924. Vol. 24. No. 5. Pp. 575–587.

14. **Sherman J., Morrison W. J.** Adjustment of an inverse matrix corresponding to a change in one element of a given matrix // The Annals of Mathematical Statistics. 1950. Vol. 21. No 1. Pp. 124–127.

15. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.** Effective diffusion coefficient of a porous material applied to the problem of hydrogen damage // Advances in Hydrogen Embrittlement Study. Edited by Polyanskiy V. A., Belyaev A. K. Book Ser. Advanced Structured Materials. Vol. 143. Springer International Publishing, Cham., 2021. Pp. 113–130.

16. **Oudris A., Creus J., Bouhattate J., Conforto E., Berziou C., Savall C., Feaugas X.** Grain size and grain-boundary effects on diffusion and trapping of hydrogen in pure nickel // Acta Materialia. 2012. Vol. 60. No. 19. Pp. 6814–6828.

REFERENCES

1. **Yakovlev Yu. A., Polyanskiy V. A., Sedova Yu. S., Belyaev A. K.,** Models of hydrogen influence on the mechanical properties of metals and alloys, PNRPU Mechanics Bulletin. (3) (2020) 136–160 (in Russian)

2. **Knyazeva A. G., Grabovetskaya G. P., Mishin I. P., Sevostianov I.** On the micromechanical modelling of the effective diffusion coefficient of a polycrystalline material, Phil. Mag. 95 (19) (2015) 2046–2066.

3. **Hart E. W.** Thermal conductivity, Acta Metallurgica. 5 (9) (1957) 597–605.

4. **Barrer R. M.,** Diffusion and permeation in heterogeneous media, In book: "Diffusion in polymers", Ed. by J. Crank and G. S. Park, Academic Press, London, 1968.

5. **Bell G. E., Crank J.** Influence of imbedded particles on steady-state diffusion, J. Chem. Soc. Farad. Trans. 70 (2) (1974) 1259–2732.

6. **Cussler E. L.,** Diffusion: mass transfer in fluid systems, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.

7. **Zhang Y., Liu L.,** On diffusion in heterogeneous media, Am. J. Sci. 312 (9) (2012) 1028–1047.

8. **Belova I. V., Murch G. E.,** Diffusion in nanocrystalline materials, J. Phys. Chem. Solids. 64 (5) (2003) 873–878.

9. **Belova I. V., Murch G. E.,** The effective diffusivity in polycrystalline material in the presence of interphase boundaries, Phil. Mag. 84 (1) (2004) 17–28.

10. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.,** Effective diffusivity of transversely isotropic material with embedded pores, Mater. Phys. & Mech. 47 (6) (2021) 937–950.

11. **Kachanov M., Sevostianov I.** Micromechanics of materials, with applications. Springer International Publishing AG (part of Springer Nature), Switzerland, 2018.

12. **Mori T., Tanaka K.,** Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions, Acta Metallurgica. 21 (5) (1973) 571–574.

13. **Fricke H.,** A mathematical treatment of the electric conductivity and capacity of disperse systems. I. The electric conductivity of a suspension of homogeneous spheroids, Phys. Rev. 24 (5) (1924) 575–587.

14. **Sherman J., Morrison W. J.,** Adjustment of an inverse matrix corresponding to a change in one element of a given matrix, Ann. Math. Statistics. 21 (1) (1950) 124–127.

15. **Frolova K. P., Vilchevskaya E. N.,** Effective diffusion coefficient of a porous material applied to the problem of hydrogen damage, In book: "Advances in hydrogen embrittlement study", Ed. by Polyanskiy V. A., Belyaev A. K., Book Ser. Advanced Structured Materials. Vol. 143, Springer International Publishing, Cham. (2021) 113–130.

16. **Oudris A., Creus J., Bouhattate J., et al.,** Grain size and grain-boundary effects on diffusion and trapping of hydrogen in pure nickel, Acta Materialia. 60 (19) (2012) 6814–6828.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАШКОВСКИЙ Дмитрий Максимович – *студент Физико-механического института Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
mr.vivivilka@icloud.com
ORCID: 0000-0002-2218-6649

ФРОЛОВА Ксения Петровна – *младший научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61.
kspfrolova@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0376-4463

ВИЛЬЧЕВСКАЯ Елена Никитична – *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61.
vilchevskaya_en@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-5173-3218

THE AUTHORS

PASHKOVSKY Dmitry M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
mr.vivivilka@icloud.com
ORCID: 0000-0002-2218-6649

FROLOVA Ksenia P.
Institute for Problems in Mechanical Engineering, RAS
61 Bolshoi Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia
kspfrolova@gmail.com
ORCID: 0000-0003-0376-4463

VILCHEVSKAYA Elena N.
Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS
61 Bolshoi Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia
vilchevskaya_en@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-5173-3218

Статья поступила в редакцию 08.04.2022. Одобрена после рецензирования 16.05.2022. Принята 16.05.2022.
Received 08.04.2022. Approved after reviewing 16.05.2022. Accepted 16.05.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Научная статья
УДК 539.561
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM15313

ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДНОГО СКИН-ЭФФЕКТА НА ХАРАКТЕР РАЗРУШЕНИЯ СТАЛЬНЫХ ОБРАЗЦОВ

Ю. С. Седова ✉, Н. М. Бессонов, В. А. Полянский

Институт проблем машиноведения РАН,

Санкт-Петербург, Россия

✉ sedova.yus@mail.ru

Аннотация. Исследовано влияние насыщения водородом стальных образцов на результаты их стандартизованного тестирования на стойкость к водородному растрескиванию. При моделировании учтен водородный скин-эффект, который наблюдается при стандартизованном насыщении образцов водородом в различных растворах электролитов. Использована классическая декогезионная модель водородной хрупкости HEDE. Показано, что, несмотря на микроскопическую глубину скин-слоя, скин-эффект приводит к двойственному характеру разрушения, когда на изломе образца наблюдаются как площадки водородной хрупкости, так и области обычного разрушения. Сопоставление расчетных результатов с экспериментальными показало сильное влияние водородного скин-слоя на результаты стандартизованного тестирования металлов. Этот скин-эффект играет существенную роль в распространении процесса разрушения по металлическому образцу и должен приниматься во внимание при проведении промышленных испытаний, моделирования и экспериментальных исследований.

Ключевые слова: водородный скин-эффект, индуцированное растрескивание, декогезия, насыщение водородом, диффузия водорода

Финансирование: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда (проект №18-19-00160).

Для цитирования: Седова Ю. С., Бессонов Н. М., Полянский В. А. Влияние водородного скин-эффекта на характер разрушения стальных образцов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 169–184. DOI: https://doi.org/10.18721/ JPM.15313

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15313

INFLUENCE OF THE HYDROGEN SKIN EFFECT ON THE NATURE OF THE FRACTURE OF STEEL SPECIMENS

Yu. S. Sedova ✉, N. M. Bessonov, V. A. Polyanskiy

Institute for Problems in Mechanical Engineering of the RAS,

St. Petersburg, Russia

✉ sedova.yus@mail.ru

Abstract. The influence of hydrogen saturation of steel specimens on the results of their standardized testing for resistance to hydrogen cracking has been carried out. The simulation took into account the hydrogen skin effect observed when metal samples being charged with hydrogen in various electrolyte solutions. The classical decohesion model of hydrogen embrit-

© Седова Ю. С., Бессонов Н. М., Полянский В. А., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

tlement HEDE was used. It was shown that, despite the microscopic skin depth, the effect led to a dual fracture pattern, when the specimen's cross-sectional view exhibited both a hydrogen brittleness area and a normal destruction one. The comparison of calculated results with experimental ones showed the strong influence of the hydrogen skin layer on the results of standardized metal testing. This skin effect plays a significant role in the destruction propagation over a metal sample and should be taken into account when conducting industrial tests, simulations and experimental studies.

Keywords: hydrogen-induced cracking, decohesion, hydrogen charged sample, hydrogen diffusion, destruction

Funding: The reported study was funded by Russian Science Foundation (Project No. 18-19-00160).

For citation: Sedova Yu. S., Bessonov N. M., Polyanskiy V. A., Influence of the hydrogen skin effect on the nature of the fracture of steel specimens, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 169–184. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15313

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

Введение

В процессе производства металлов и продукции из них происходит накопление так называемого металлургического растворенного водорода. Он отрицательно влияет на все механические и технологические характеристики металлов, является одной из основных причин хрупкости, пористости, образования флокенов в прокате. Концентрацию металлургического водорода на заводах контролируют. В сталях и алюминиевых сплавах она поддерживается на уровне порядка 1 млн$^{-1}$ и менее.

Вторым источником растворенного водорода является агрессивная внешняя среда, в которой металлические детали эксплуатируются. Любой коррозионный процесс сопровождается выделением водорода и поглощением его внутри металла. Внешние механические нагрузки и наличие в окружающей среде чистого водорода приводят к существенному ускорению водородной деградации свойств металлов.

За последние несколько десятилетий была разработана и внедрена в промышленности система стандартизованного тестирования на стойкость к водородному растрескиванию (ВР) [1 – 3]. Как правило, процедура состоит из фазы экспонирования (насыщение водородом) металлических образцов в коррозионной среде, которая длится до 100 ч. Вторая фаза заключается в механических испытаниях, а также изучении образцов под микроскопом: регистрируют поверхности изломов и трещин, индуцированных водородом.

Применение этих тестов позволило добиться высокой стойкости к ВР современных трубных сталей. Если двадцать лет назад индуцированные водородом трещины при тестировании образовывались внутри стальных образцов [4], то для современных сталей характерно лишь незначительное микрорастрескивание. Вместе с тем механические характеристики образцов заметно ухудшаются после насыщения водородом, и для высокопрочных сталей характерно кратное снижение трещиностойкости [5, 6]. Многочисленные фрактографические исследования [7 – 10], выполненные в ходе экспериментального изучения сталей, разрушенных при механических испытаниях, свидетельствуют о наличии в образцах двух характерных областей разрушения: хрупкого и вязкого. Современные сплавы широко применяются в самых различных областях энергетики и промышленности. Поэтому эффект их быстрой деградации при насыщении водородом необходимо исследовать и сводить к минимуму.

Средняя парциальная концентрация атомов водорода к атомам матрицы в металле в процессе ВР-тестирования увеличивается до величин, не более чем до 1:30000 [11]. Кроме того, результаты последних исследований показывают, что в водных коррозионных растворах и при катодной поляризации возникает скин-эффект насыщения водородом,

© Sedova Yu. S., Bessonov N. M., Polyanskiy V. A., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

при котором весь поглощенный металлом водород сосредоточен в тонком поверхностном слое образцов толщиной порядка 50 – 100 мкм [12 – 15]. При диаметре рабочей части образца 8 – 10 мм этот слой можно отнести к слоям малой толщины (соотношение 1:100 характерно для теории тонких оболочек). Таким образом, с точки зрения механики мы сталкиваемся с задачей о влиянии малого параметра.

К настоящему времени предложено несколько подходов к описанию индуцированного водородом разрушения.

Одной из первых была модель усиленной водородом декогезии (*англ.* Hydrogen-Enhanced Decohesion (HEDE)) [16]. Она описывает хрупкое разрушение в результате накопления водорода в вершине трещины и развития водородного охрупчивания без пластических деформаций. Идея подхода на микроскопическом уровне основана на том, что межузельный водород расширяет металлическую решетку кристаллов, тем самым способствуя уменьшению прочности сцепления атомов [17]. С энергетической точки зрения, атомы водорода снижают энергетический барьер разрушения, что приводит к разделению зерен, или декогезии.

Принципиально другой подход к моделированию водородной деградации механических свойств материалов рассматривается в модели усиленной водородом локальной пластичности (*англ.* Hydrogen-Enhanced Localised Plasticity (HELP)) [18, 19]. В рамках этой модели растворенный в металле водород интерпретируется как химическое вещество, снижающее энергию, необходимую для зарождения дислокаций. Предполагается, что в вершине трещины, где под действием внутренних напряжений концентрируется водород, происходит «размягчение» металла, или проявление локализованной пластичности.

Наблюдаемый при ВР-тестировании двойственный характер разрушения принято интерпретировать с помощью комбинации обеих моделей: HELP + HEDE. Считается, что, если локальные концентрации водорода в вершине трещины оказываются выше некоторого «порога переключения», то работает хрупкий HEDE-механизм, а при концентрации ниже пороговой – механизм HELP. Одной из проблем такого подхода является экспоненциальный (вплоть до 100 раз) рост концентрации водорода при пластической деформации, который прямо следует из уравнений модели HELP [20]. Таким образом, при последовательном «сложении» моделей, локализованная пластическая деформация, инициированная водородом, должна приводить к многократному росту его локальной концентрации и срабатыванию хрупкого декогезионного механизма разрушения.

Кроме того, модель HELP фактически описывает увеличение пластичности ввиду снижения предела текучести материала. Однако основная масса экспериментальных данных не выявляет снижения предела текучести при испытаниях образцов [6]. Все это ведет к тому, что представление о том, что HELP-модель начинает действовать и определяет основное сечение разрушения, не соответствует существующим экспериментальным и исследовательским данным.

Эти парадоксы HELP + HEDE позволяют нам остановиться на декогезионой модели водородного растрескивания.

Описание модели

Современная концепция HEDE-модели состоит из следующих основных элементов:

уравнений упругой или вязкоупругой сплошной среды с упрочнением (в том числе для материалов с упрочнением);

уравнений диффузии, описывающих перераспределение и накопление водорода;

зависимостей, описывающих водородную деградацию параметров когезионного закона.

Транспорт водорода внутри твердого вещества традиционно рассматривался как диффузионный процесс, и для его описания использовалось уравнение второго закона Фика [21]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D\left(T, \mathbf{r}\right) \nabla C \right], \tag{1}$$

где C – концентрация водорода, t – время, $\mathbf{r}$ – вектор координат, D – коэффициент диффузии, T – абсолютная температура, ∇ – оператор набла.

Однако современные подходы, как правило, основываются на введении в рассмотрение слагаемых, учитывающих термодинамический или химический потенциал [22]:

$$\mu = \mu_0(T) + RT\ln C - V_{\text{H}} p.$$

В этом случае уравнение (1) приобретает вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D(T, \mathbf{r}) \left(\nabla C - \frac{C V_{\text{H}}}{RT} \nabla p \right) \right], \tag{2}$$

а с учетом влияния механических напряжений оно имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C - \frac{D V_{\text{H}}}{RT} \nabla C \cdot \nabla p - \frac{DC V_{\text{H}}}{RT} \nabla^2 p, \tag{3}$$

где p – давление в шаровой части тензора напряжений, V_{H} – парциальный молярный объем водорода [23].

Согласно закону Горского [24], водород стремится к зонам максимальных растягивающих напряжений. Увеличение его концентрации в этих областях неизбежно приводит к снижению сцепления берегов трещины, в результате чего и происходит декогезия [16]. Для того чтобы охарактеризовать это явление, в модели используется параметр степени заполнения свободной поверхности берегов трещины атомами водорода θ:

$$\theta = \frac{C}{C + \exp\left(-\frac{\Delta g_{\text{H}}}{RT} \right)}, \tag{4}$$

где Δg_{H} – разница свободной энергии Гиббса для водорода между состоянием, адсорбированным внутри кристаллической решетки, и свободным (устанавливается из эксперимента).

Данное выражение было предложено С. Серебринским [25] на основании термодинамического соотношения величины парциальной концентрации водорода внутри и на поверхности монокристалла, полученном в работе Д. МакЛина [26].

Следует отметить, что в случае использования значения парциальной концентрации вещества в этом соотношении, и с учетом значения C в млн$^{-1}$, выражение (4) принимает вид:

$$\theta = \frac{55{,}85 \cdot C \cdot 10^{-6}}{55{,}85 \cdot C \cdot 10^{-6} + \exp\left(-\frac{\Delta g_{\text{H}}}{RT} \right)}. \tag{5}$$

Величина параметра θ позволяет вычислить удельную энергию свободной поверхности γ(θ), зависящую от сорбции водорода на ней. Для описания этой взаимосвязи в большинстве существующих исследований используется формула, предложенная С. Серебринским [25]:

$$\gamma(\theta) = \left(1 - 1{,}0467\theta + 0{,}1687\theta^2\right)\gamma(0), \tag{6}$$

где γ(0) – поверхностная энергия в отсутствие водорода.

Далее в рамках модели хрупкого разрушения принимается во внимание энергетическое тождество

$$G = 2\gamma(\theta) = f(\sigma_{Zc}, \delta_c), \tag{7}$$

где G – энергия разрушения; $f(\sigma_{Zc}, \delta_c)$ – линейная функция, зависящая от величины максимальных когезионных напряжений σ_{Zc}, нормальных к берегам трещины, и от мак-

симального значения относительного перемещения краев трещины δ_c, при котором не происходит разрыва связей между ними (или декогезия).

Вид функции $f(\sigma_{Zc}, \delta_c)$ определяется установлением когезионного закона.

На основании предположения о том, что величина δ_c слабо зависит от величины θ, в HEDE-модели постулируется закон водородной деградации:

$$\sigma_{Zc}(\theta) = \left(1 - 1{,}0467\theta + 0{,}1687\theta^2\right)\sigma_Z(0), \tag{8}$$

где $\sigma_Z(0)$ – когезионные напряжения, нормальные к берегам трещины, действующие в отсутствие водорода.

Согласно критерию инициирования и распространения трещины по декогезионному механизму HEDE, трещина сохраняет свою конфигурацию до тех пор, пока уровень упругих напряжений, нормальных к ее берегам и действующих вблизи вершины трещины, не превышает величину когезионных напряжений, связывающих их между собой. Как только водород, скопившийся в вершине трещины под действием химического потенциала, снизит эти напряжения настолько, что данное условие нарушится, произойдет инициирование роста трещины с образованием новой свободной поверхности. Это продвижение, в то же время, вызовет локальное повышение уровня нормальных напряжений в новом положении вершины трещины, которое повлечет за собой рост локальной концентрации водорода. Происходит очередное снижение величины когезионных напряжений до нарушения условия устойчивости трещины, и процесс повторяется вновь и вновь.

С другой стороны, энергия, необходимая для разрушения, может быть выражена через параметры материала. Для трещины нормального отрыва ее можно записать как

$$G = \frac{K_{Ic}^2}{\widehat{E}}, \tag{9}$$

где K_{Ic} – критический коэффициент интенсивности напряжений, действующий в окрестности вершины трещины; величина $\widehat{E} = E/\left(1-\nu^2\right)$ либо $\widehat{E} = E$, соответственно для случаев плоского деформированного состояния либо плоского напряженного (E – модуль Юнга, ν – коэффициент Пуассона).

С учетом тождества (7) можно показать, что снижение удельной энергии свободной поверхности, вызванное ростом концентрации водорода, приводит также к уменьшению K_{Ic}:

$$\frac{K_{Ic}^2}{K_{Ic}^2(0)} = \frac{\gamma(\theta)}{\gamma(0)} = 1 - 1{,}0467\theta + 0{,}1687\theta^2.$$

Таким образом, величина критического коэффициента интенсивности напряжений (параметр трещиностойкости материала) зависит от содержания водорода как

$$K_{Ic}(\theta) = \sqrt{1 - 1{,}0467\theta + 0{,}1687\theta^2}\,K_{Ic}(0), \tag{10}$$

где $K_{Ic}(0)$ – экспериментально установленное значение трещиностойкости материала в отсутствие водорода.

Отсюда следует, что присутствие водорода, растворенного в материале, вносит поправку в силовой критерий разрушения Ирвина ($K_I = K_{Ic}$) [27, 28], поэтому развитие трещины становится возможным при более низком значении K_I.

Постановка задачи

В рамках данного исследования мы рассмотрим задачу об одноосном растяжении цилиндрического стержня, насыщенного водородом, с вырезом эллиптической формы. Мы исключили использование стандартных конечно-элементных пакетов со встроенными в них блоком моделирования когезионной зоны (cohesive zone modeling) и модуля развития трещин. Это связано с тем, что обращение к ним предполагает введение в рассмотрение специальных фиктивных когезионных элементов и работу с определенным когезионным законом. Такое введение требует задания большого количества дополнительных параметров модели и выполнения ряда добавочных предположений.

Реализацию модели мы осуществляли с помощью собственного разработанного программного кода в среде Microsoft Visual Studio на языке C++, позволяющего методом конечных объемов получать численное решение задач о напряженно-деформированном состоянии тела.

Вычислительная процедура состояла из двух последовательных этапов.

Первый этап. Решение задачи о напряженно-деформированном состоянии растянутого образца.

Второй этап. Решение диффузионной задачи о перераспределении водорода по стержню.

В рамках второго этапа проводился также расчет величины когезионных напряжений σ_{Zc} и параметра трещиностойкости K_{Ic}.

На первом этапе задачи решали систему уравнений линейной теории упругости (11) – (13). Система включает дифференциальное уравнение равновесия (11), определение тензора линейной деформации (12) и обобщенный закон Гука (13):

$$\begin{cases} \nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}+\mathbf{f}=0, & (11)\\ \boldsymbol{\varepsilon}=\dfrac{1}{2}\left(\nabla\mathbf{u}+\mathbf{u}\nabla\right), & (12)\\ \boldsymbol{\sigma}=\lambda\theta\mathbf{E}+2G\boldsymbol{\varepsilon}, & (13)\end{cases}$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши; $\mathbf{f}$ – интенсивность объемных сил; $\mathbf{u}$ – вектор перемещений; λ, G – параметры Ляме; $\theta = \mathrm{tr}(\boldsymbol{\varepsilon})$ относительное изменение объема, при этом гидростатическое давление $p=\dfrac{1}{3}\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma})$.

Для численного решения уравнения (11) был использован метод установления, предложенный М. Л. Уилкинсом [29].

Характеристики напряженно-деформированного состояния образца, полученные на первом шаге процедуры, фиксировались на втором этапе. Он включал в себя решение системы уравнений (3), (5), (8) и (10), описанных ранее; приведем их повторно:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C}{\partial t}=D\nabla^2 C-\dfrac{DV_{\mathrm{H}}}{RT}\nabla C\cdot\nabla p-\dfrac{DCV_{\mathrm{H}}}{RT}\nabla^2 p,\\ \theta=\dfrac{55{,}85\cdot C\cdot 10^{-6}}{55{,}85\cdot C\cdot 10^{-6}+\exp\left(-\dfrac{\Delta g_{\mathrm{H}}}{RT}\right)},\\ \sigma_{Zc}(\theta)=\left(1-1{,}0467\theta+0{,}1687\theta^2\right)\sigma_Z(0),\\ K_{Ic}(\theta)=\sqrt{1-1{,}0467\theta+0{,}1687\theta^2}\,K_{Ic}(0).\end{cases}$$

Численное решение уравнения (3) было также выполнено на основании метода установления Уилкинса [29].

Для вычисления текущего значения коэффициента интенсивности напряжений в окрестности вершины трещины использовалась приближенная формула Бентема – Койтера [30, 31], полученная для случая трещины длины c, возникающей на краевом вырезе в цилиндрическом стержне диаметром D под действием одноосного растяжения σ_z^{∞}:

$$K_{\mathrm{I}}=\frac{1}{2}\sigma_{net}\sqrt{\frac{\pi dc}{D}}\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{d}{D}\right)+\frac{3}{8}\left(\frac{d}{D}\right)^2-0{,}363\left(\frac{d}{D}\right)^3+0{,}731\left(\frac{d}{D}\right)^4\right], \qquad (14)$$

$$\sigma_{net} = \sigma_Z^{\infty}\left(\frac{D}{d}\right)^2.$$

По результатам второго этапа, на основании критерия когезионных напряжений или силового критерия разрушения Ирвина, определялись условия роста трещины.

Для того чтобы иметь возможность сопоставления и оценки получаемых результатов конечно-объемного решения, при выборе модели мы ориентировались на экспериментальные данные. За основу была взята недавно опубликованная работа [8], в которой исследовано влияние водорода на свойства хромомолибденовой стали. В статье рассмотрен образец из ферритной стали 2.25Cr1Mo в виде цилиндрического стержня диаметром 9,0 мм с радиальным надрезом глубиной 2,0 мм, шириной 1,2 мм и радиусом скругления 0,15 мм.

После проведения испытаний на растяжение детали, предварительно насыщенной водородом методом катодной поляризации, авторы получили фрактографические снимки поверхности разрушения, на которых они отметили наличие кольцевой области хрупкого разрушения шириной до 1 мм и внутренней области вязкопластического разрушения.

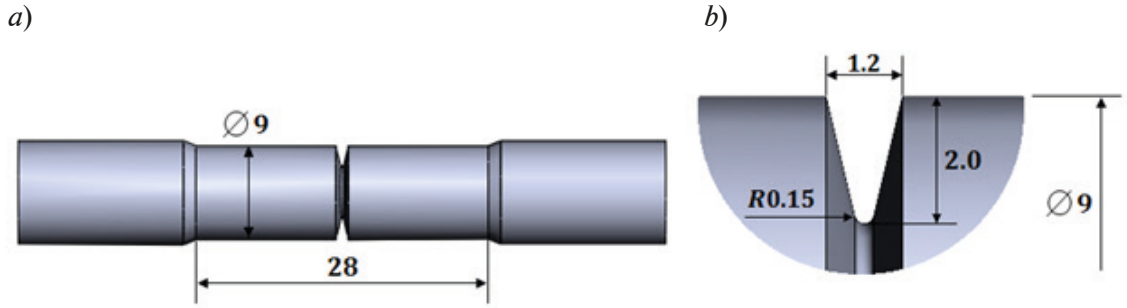


Рис. 1. Изображение цилиндрического стального образца с радиальным надрезом (*a*) и его половинного поперечного сечения в месте надреза (*b*)
(размеры указаны в мм)

Мы в своей работе исследовали одноосное растяжение цилиндрического стержня той же геометрии (рис. 1), изготовленного из той же стали (растягивающая нагрузка составляла 650 МПа). Расчет проводили в двумерной осесимметричной постановке. В силу симметрии геометрия моделируемого образца представляла собой четверть участка продольного сечения стержня (рис. 2).

Свойства стали 2.25Cr1Mo, использованные в расчетах, следующие:

Физические свойства стали 2.25Cr1Mo

Предел прочности σ_B . . . . . 895 Мпа
Предел текучести σ_T . . . . . 761 МПа
Плотность ρ . . . . . 7750 кг/м^3
Модуль сдвига μ . . . . . 80 ГПа
Коэффициент Пуассона ν 0,3
Объемный модуль упругости K . . . . . 140 ГПа
Параметр трещиностойкости $K_{Ic}(0)$ . . . . . 64,1 МПа·м $^{1/2}$

Приведем также значения остальных расчетных параметров. Коэффициент диффузии был принят постоянным и составлял $D = 2\cdot10^{-11}$ м^2/с; парциальный молярный объем водорода $V_H = 2\cdot10^{-6}$ м^3/моль [32]; разность значений свободной энергии Гиббса для состояния водорода, адсорбированного внутри кристаллической решетки, и его свободного состояния составляла $\Delta g_H = 30$ кДж/моль [32], абсолютная температура $T = 298$ K. Величина напряжений, входящая в уравнение (8), с учетом рекомендаций, представленных в работе [33], была принята равной $\sigma_z(0) = 30\ \sigma_T$.

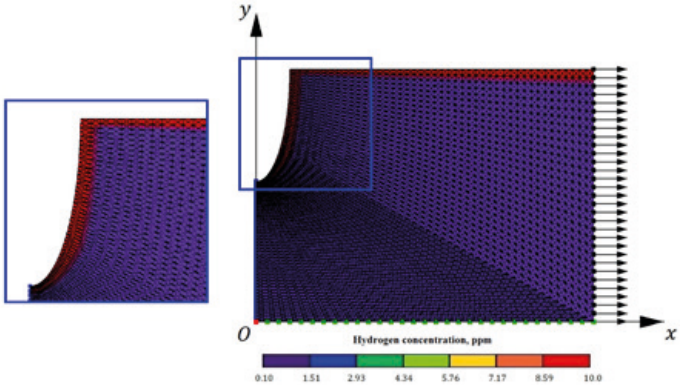


Рис. 2. Расчетная конечно-объемная модель четверти участка продольного сечения стержня (см. рис. 1, *а*); показаны геометрия, граничные и начальные условия; стрелки указывают направление растяжения

Начальное распределение водорода по образцу устанавливалось следующим образом: фоновая равномерная концентрация $c_0 = 0{,}1$ млн$^{-1}$ по всей области и концентрация $c_0 = 10$ млн$^{-1}$ в поверхностном слое толщиной в один структурный элемент ($t = 20$ мкм). Последняя характеризует экспериментально наблюдаемое содержание водорода в металлических образцах, который скапливается на поверхности (насыщение водородом вследствие скин-эффекта), (см. увеличенную область на рис. 2).

В силу симметрии, на левую грань накладывали запрет перемещений вдоль горизонтального направления *Ox*, на нижнюю грань – вдоль вертикального направления *Oy*. К правому краю области прикладывали растягивающее напряжение величиной σ, действующее вдоль оси *Ox*.

Инициирование и распространение трещины мы моделировали следующим образом. После получения характеристик напряженно-деформированного состояния тела, на втором этапе вычислительной процедуры запускали анализ диффузионной задачи о перераспределении водорода по образцу. В процессе анализа отслеживали поведение двух неравенств: для напряжений $\sigma_{el} < \sigma_{Zc}(\theta)$ и для коэффициентов интенсивности напряжений $K_{\mathrm{I}} < K_{\mathrm{I}c}(\theta)$ на узлах конечно-объемной сетки вдоль предполагаемой линии распространения трещины (вдоль левой грани области). Как только в узле наблюдали нарушение одного из этих неравенств, обусловленное повышением концентрации водорода или же подъемом уровня упругих напряжений, в этом узле снимали ограничение на перемещение вдоль горизонтальной оси *Ox*, имитируя тем самым разрыв связи с узлом на противоположном берегу трещины. И тогда узел получал возможность свободно передвигаться под действующей нагрузкой.

Результаты конечно-объемного моделирования

На рис. 3 представлен график зависимости интервала времени между выполнением критерия разрушения в двух последовательных узлах конечно-объемной модели. Он представляет собой отрезок времени, который был необходим для перераспределения водорода под действием упругих напряжений, его последующего накопления в рассматриваемом узле и за счет этого снижения когезионных напряжений $\sigma(\theta)$ или же параметра трещиностойкости материала $K_{\mathrm{I}c}(\theta)$.

На рис. 3 видно, что в первых двух узлах сетки происходит мгновенное выполнение критерия разрыва связей по декогезионному механизму. Это обуславливается высоким содержанием водорода в поверхностном слое образца, в результате чего когезионные напряжения, связывающие узлы материала, оказываются сильно сниженными, и разрушение по механизму HEDE происходит на первом же шаге решения задачи по времени. Распределения компоненты упругих напряжений, действующих в горизонтальном направлении, и содержания водорода в окрестности вершины трещины в разные моменты времени представлены на рис. 4 и 5, соответственно.

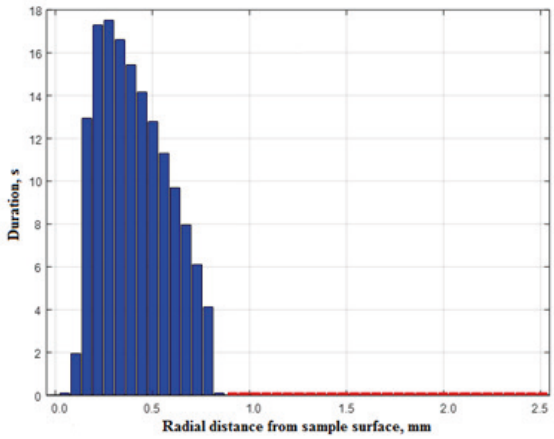


Рис. 3. Зависимость времени распространения трещины на одно межузловое расстояние от степени удаления от поверхности образца;
декогезионный механизм и трещиностойкость показаны синим и красным цветами соответственно

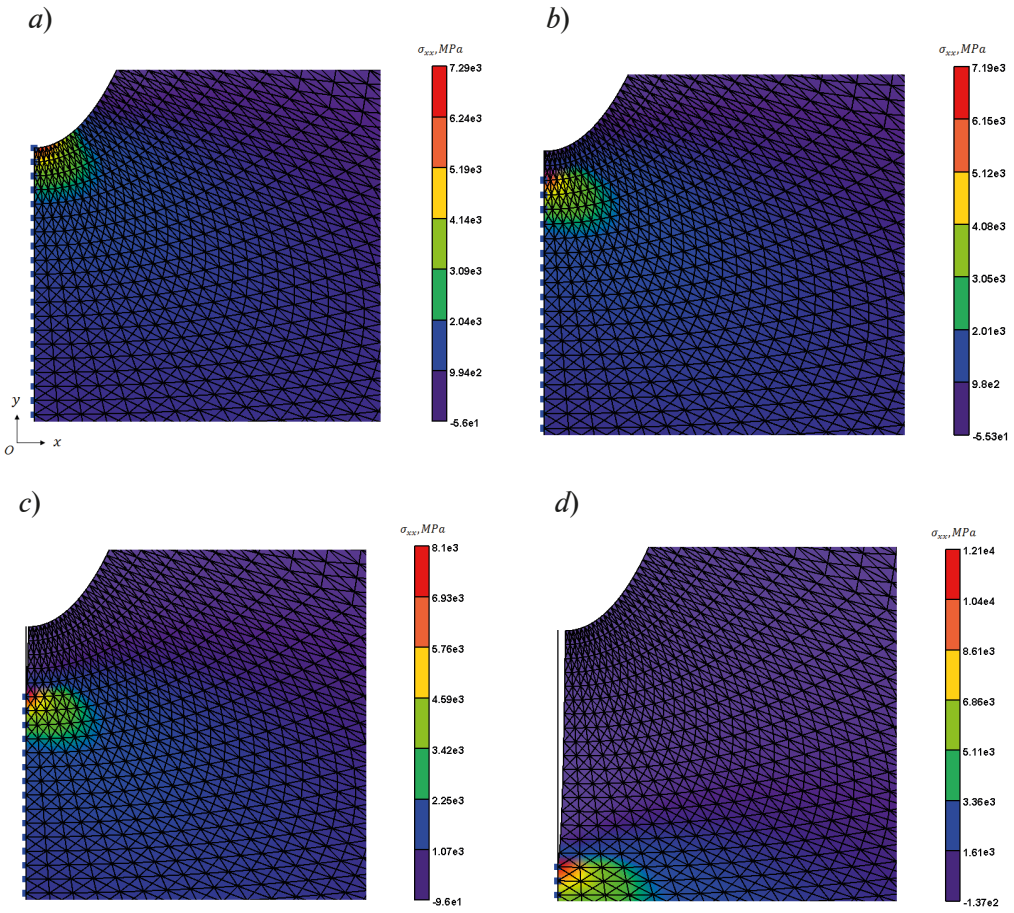


Рис. 4. Распределения компоненты упругих напряжений, действующих в горизонтальном направлении, в разные моменты времени, когда наблюдается декогезия в первом (*a*), третьем (*b*), шестом (*c*) узлах сетки и смена механизма разрушения (*d*)

Однако по мере удаления от поверхности образца требуется некоторое время для диффузии и соответствующего отражения процесса в решении диффузионной задачи. Необходим временной промежуток для того, чтобы водород мог перераспределиться, продиффундировать и накопиться в текущей вершине трещины к моменту выполнения критерия разрыва. Поэтому, начиная с третьего узла (см. рис. 4,*b* и 5,*b*), зависимость показана увеличивающимся отрезком, но распространение трещины по-прежнему есть следствие механизма разрушения HEDE.

Описанный сценарий продолжается вплоть до шестого узла сетки. Далее существенное влияние начинают оказывать упругие напряжения (см. рис. 4, *c*), действующие вблизи концентратора напряжений. Их величина постепенно растет, и в связи с этим для вступления в действие декогезионного механизма разрушения достаточно в меньшей степени снизить когезионные напряжения, инициированные водородом (см. рис. 5,*c*). И тогда, как следствие, необходим все меньший промежуток времени для решения диффузионной задачи.

Следует отметить, что на данном этапе отслеживания процесса, значение параметра трещиностойкости также существенно понижается ввиду присутствия водорода в материале, но оно пока еще оказывается выше значения коэффициента интенсивности напряжений, действующего вблизи вершины трещины.

Как следует из графика на рис. 3, тенденция к снижению уровня критической концентрации водорода, при которой происходит декогезия, сохраняется и по мере последующего удаления от поверхности образца. И вместе с тем, на расстоянии порядка 0,97 мм, которое соответствует семнадцатому узлу сетки, величина упругих напряжений, действующих в вершине трещины, становится столь велика, что дальнейшее распространение трещины возможно теперь и при фоновом значении содержания водорода.

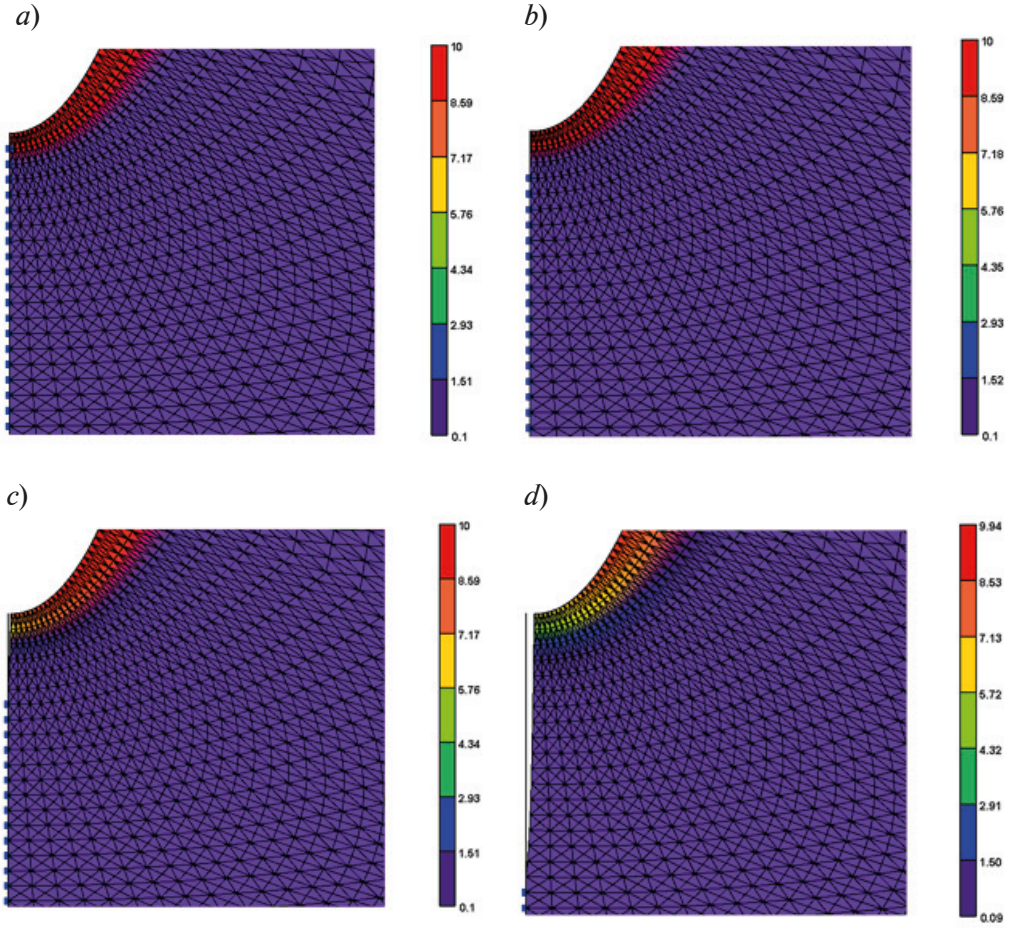


Рис. 5. Распределение содержания водорода (млн$^{-1}$) в те же моменты времени, которые указаны в подписи к рис. 4

После этого размер трещины становится внушительным, так что вблизи ее вершины коэффициент интенсивности напряжений достигает высокого значения, и буквально в следующем узле, при распространении разрушения всего на 1,0 мм, его значение превосходит величину трещиностойкости материала, также сниженную присутствием водорода в стержне (см. рис. 4, *d* и 5, *d*). Очевидно, что при дальнейшем росте трещины уровень действующих напряжений будет только увеличиваться. Этим объясняется наблюдаемое непрерывное развитие магистральной трещины после смены механизма разрушения, связанное с выполнением силового критерия разрушения.

На рис. 6 приведено распределение концентрации водорода по радиусу образца в ключевые моменты времени, характеризующие развитие процесса от начального состояния до распространения трещины на половину его толщины. Хорошо видно, что по мере рас-

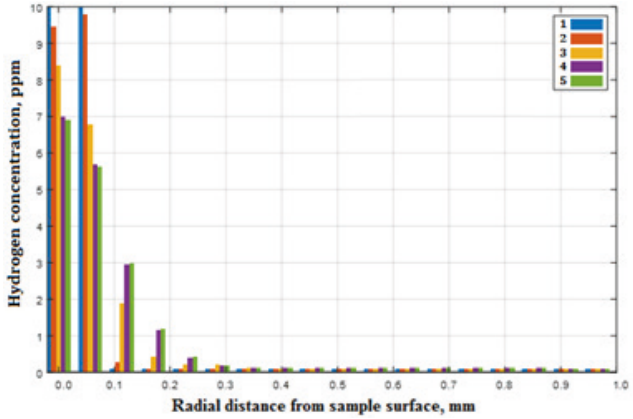


Рис. 6. Распределение концентрации водорода по радиусу образца (от поверхности к центральной оси) в ключевые моменты развития процесса: начальное состояние (*1*), декогезия в 3-м (*2*) и 6-м (*3*) узлах сетки, смена механизма разрушения (*4*) и трещина на половину толщины образца (*5*)

пространения трещины водород постепенно перераспределяется с поверхности образца и перемещается в глубь материала под действием химического потенциала приложенных напряжений. Но здесь важно отметить, что глубина его проникновения не превышает 1 мм, потому что дальнейшее разрушение стали происходит при исходном фоновом содержании водорода, вследствие высоких напряжений вблизи вершины трещины.

Таким образом, моделирование процесса позволило выявить и проследить механизм влияния насыщения образцов водородом на характер разрушения металлического сплава под нагрузкой (скин-эффект).

Обсуждение результатов

Рассмотрим результаты конечно-объемного решения уравнений классической модели хрупкого разрушения HEDE, инициированного водородом, учитывающей скин-эффект водородного насыщения образцов. За основу взят простой подход линейной теории развития трещин и классическая модель водородной хрупкости. Результаты проведенных расчетов показывают, что сначала происходит разрушение по хрупкому декогезионному механизму, ввиду большой концентрации водорода в поверхностном слое. Водород диффундирует под действием как градиента концентраций, так и химического потенциала вдоль линии распространения трещины, но, ввиду медленного протекания диффузионного процесса, его концентрация в движущейся вершине трещины падает до фоновых значений. При этом важен баланс между длиной трещины, индуцированной водородом, и уровнем нагрузки, так как при достижении критического значения длины, дальнейший рост трещины становится возможным при фоновой концентрации водорода по обычному механизму растрескивания.

Изображение областей распределения водорода по сечению стержня (рис. 7) дает, на наш взгляд, возможность наглядно показать сценарий развития рассматриваемого

процесса. По краям излома происходит хрупкое разрушение, связанное с повышенной концентрацией водорода; в этой области наблюдаются площадки водородной хрупкости. В центральной части образца происходит обычное разрушение, в соответствии с теорией развития трещин.

Результаты моделирования количественно и качественно совпадают с экспериментальными данными, представленными в работах [8, 34]. Ширина зоны хрупкого, инициированного водородом разрушения, составляет 1 мм. Исследование включало расчеты с варьированием толщины скин-слоя, концентрации водорода и величины приложенной нагрузки. Согласно полученным результатам, эта толщина существенно зависит лишь от уровня нагрузки, прикладываемой к образцу (либо скорости растяжения образца): чем она больше, тем меньше зона водородной хрупкости. Это также качественно соответствует экспериментальным данным [35].

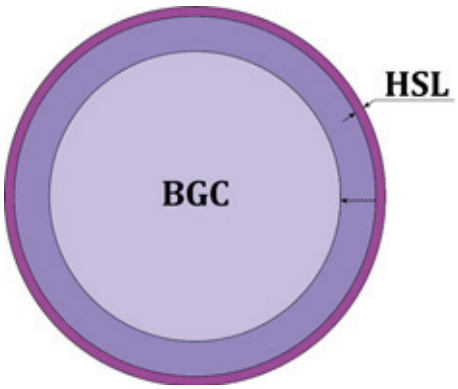


Рис. 7. Схематичное изображение областей перераспределения водорода внутри образца: HSL – водородный скин-слой; BGC – обычное (фоновое) содержание водорода. Стрелка указывает направление диффузии водорода при росте трещины

Таким образом, использованные нами классические модели позволяют описать критическое влияние малой по объему области скин-эффекта (малого параметра) на разрушение образцов и связать экспериментально наблюдаемый двойственный характер разрушения образцов с процедурой их насыщения водородом. Полученные нами результаты позволяют объяснить различия между результатами тестирования стальных образцов и эксплуатации деталей и узлов из этих же сталей в агрессивных средах.

Заключение

В данной работе проведено конечно-объемное моделирование разрушения стального цилиндрического корсетного образца с эллиптическим вырезом, насыщенного водородом. В качестве модели водородной хрупкости использован механизм усиленной водородом декогезии HEDE. При этом учитывался скин-эффект насыщения образцов водородом, установленный экспериментально.

Результаты моделирования показали, что разрушение начинается с поверхности образца как хрупкое, инициированное водородом. Затем образуется трещина, и, по достижении ею определенной длины, рост трещины продолжается естественным образом при типичных фоновых значениях концентрации водорода. Такое изменение характера разрушения приводит к двойственной картине: на изломе образца наблюдаются площадки как водородной хрупкости, так и обычного разрушения.

Кроме того, результаты моделирования показали, что скин-эффект в распределении концентрации водорода может служить главным источником двойственного характера разрушения, тогда как, согласно общепринятым представлениям, указанную двойственность объясняют одновременным действием HELP- и HEDE-механизмов в вершине магистральной трещины.

Скин-эффект зарядки образцов водородом оказывает существенное влияние на разрушение металлических образцов, несмотря на свою малую глубину, и несомненно должен приниматься во внимание при проведении промышленных испытаний, экспериментальных исследований, теоретического рассмотрения и моделирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ISO11114-4. Transportable gas cylinders – compatibility of cylinder and valve materials with gas contents – part 4: Test methods for selecting metallic materials resistant to hydrogen embrittlement. ISO 11114-4:2017 International Organization for Standardization, 2017. URL: https://www.iso.org/standard/64587.html (Дата последнего обращения: 12.03.2022).

2. ISO16573. Steel – measurement method for the evaluation of hydrogen embrittlement resistance of high strength steels. ISO 16573:2015 International Organization for Standardization, 2015. URL: https://www.iso.org/standard/57128.html (Дата последнего обращения: 12.03.2022).

3. ISO17081. Method of measurement of hydrogen permeation and determination of hydrogen uptake and transport in metals by an electrochemical technique. ISO 17081:2014 International Organization for Standardization, 2014. URL: https://www.iso.org/standard/64514.html (Дата последнего обращения: 12.03.2022).

4. **Giuliani L., Mirabile M., Sarracino M.** Embrittlement kinetics of N 80 steel in H_2S environment // Metallurgical and Materials Transactions B. 1974. Vol. 5. No. 9. Pp. 2069–2073.

5. **Nagumo M., Yoshida H., Shimomura Y., Kadokura T.** Ductile crack growth resistance in hydrogen-charged steels // Materials Transactions. 2001. Vol. 42. No. 1. Pp. 132–137.

6. **Koyama M., Tasan C. C., Tsuzaki K.** Overview of metastability and compositional complexity effects for hydrogen-resistant iron alloys: Inverse austenite stability effects // Engineering Fracture Mechanics. 2019. Vol. 214. 1 June. Pp. 123–133.

7. **Troiano A. R.** The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals // Metallography, Microstructure & Analysis. 2016. Vol. 5. No. 6. Pp. 557–569.

8. **Peral L. B., Zafra A., Fernández-Pariente I., Rodríguez C., Belzunce J.** Effect of internal hydrogen on the tensile properties of different CrMo(V) steel grades: Influence of vanadium addition on hydrogen trapping and diffusion // International Journal of Hydrogen Energy. 2020. Vol. 45. No. 41. Pp. 22054–22079.

9. **Venezuela J., Hill T., Zhou Q., Li H., Shi Z., Dong F., Knibbe R., Zhang M., Dargusch M. S., Atrens A.** Hydrogen-induced fast fracture in notched 1500 and 1700 MPa class automotive martensitic advanced high-strength steel // Corrosion Science. 2021. Vol. 188. 1 August. P. 109550.

10. **Duportal M., Oudriss A., Savall C., Renaud A., Labrugère-Sarroste C., Feaugas X.** On the implication of mobile hydrogen content on the surface reactivity of an austenitic stainless steel // Electrochimica Acta. 2022. Vol. 403. 20 January. P. 139684.

11. **Алексеева Е. Л., Беляев А. К., Зегжда А. С., Полянский А. М., Полянский В. А., Фролова К. П., Яковлев В. А.** Влияние пограничного слоя на распределение концентраций водорода при испытаниях сталей на стойкость к водородному растрескиванию // Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures. 2018. № 3. С. 43–57.

12. **Polyanskiy V. A., Belyaev A. K., Alekseeva E. L., Polyanskiy A. M., Tretyakov D. A., Yakovlev Yu. A.** Phenomenon of skin effect in metals due to hydrogen absorption // Continuum Mechanics and Thermodynamics. 2019. Vol. 31. No. 6. Pp. 1961–1975.

13. **Martinsson A., Sandström R.** Hydrogen depth profile in phosphorus-doped, oxygen-free copper after cathodic charging // Journal of Materials Science. 2012. Vol. 47. No. 19. Pp. 6768–6776.

14. **Wu R., Ahiström J., Magnusson H., Frisk K., Martinsson Å.** Charging, degassing and distribution of hydrogen in cast iron (report SKB R-13-45). Stockholm: Svensk Kärnbränslehantering AB. Swedish Nuclear and Waste Management Co., May 2015. 47 p.

15. **Oriani R. A.** A mechanistic theory of hydrogen embrittlement of steels // Berichte der Bundesgesellschaft für physikalische Chemie. 1972. Vol. 76. No. 8. Pp. 848–857.

16. **Troiano A. R.** The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals // Transactions of the American Society of Metals (ASM). 1960. Vol. 52. Pp. 54–80.

17. **Birnbaum H. K., Sofronis P.** Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture // Materials Science and Engineering A. 1994. Vol. 176. No. 1–2. Pp. 191–202.

18. **Sofronis P., Birnbaum H. K.** Mechanics of the hydrogen dislocation-impurity interactions. I. Increasing shear modulus // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1995. Vol. 43. No. 1. Pp. 49–90.

19. **Taha A., Sofronis P.** A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement // Engineering Fracture Mechanics. 2001. Vol. 68. No. 6. Pp. 803–837.

20. Фика закон // Физический энциклопедический словарь. Гл. ред. А. М. Прохоров. М.: Советская энциклопедия, 1984. С. 818.

21. **Шьюмон П.** Диффузия в твердых телах. М.: Металлургия, 1966. 196 с.

22. **Колачев Б. А.** Водородная хрупкость металлов. М.: Металлургия, 1985. 216 с.

23. **Gorsky W.** Theorie der elastischen Nachwirkung in ungeordneten Mischkristallen (elastische Nachwirkung zweiter Art) // Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion. 1935. Bd. 8. S. 457–471.

24. **Serebrinsky S., Carter E. A., Ortiz M.** A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 2004. Vol. 52. No. 10. Pp. 2403–2430.

25. **McLean D.** Grain boundaries in metals. London: Clarendon Press, 1957. 346 p.

26. **Irwin G. R.** Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate // Journal of Applied Mechanics. 1957. Vol. 24. No. 3. Pp. 361–364.

27. **Irwin G. R.** Fracture // Encyclopedia of Physics. Ed. by S. Flugge. Vol. 6. Elasticity and Plasticity. Berlin: Springer Verlag, 1958. Pp. 551–590.

28. **Wilkins M. L.** Computer simulation of dynamic phenomena. Berlin, Heidelberg: Springer Science & Business Media, 1999. 246 p.

29. Справочник по коэффициентам интенсивности напряжений. Под ред. Ю. Мураками. Пер. с англ. В 2 тт. Т. 2. М.: Мир, 1990. 556 с.

30. **Benthem J. P., Koiter W. T.** Asymptotic approximations to crack problems // Methods of analysis and solutions of crack problems. Ed. by G. C. Sih. Book Series “Mechanics of Fracture”. Vol. 1. Dordrecht: Springer, 1973. Pp. 131–178.

31. **Hirth J. P.** Effects of hydrogen on the properties of iron and steel // Metallurgical Transactions A. 1980. Vol. 11. No. 6. Pp. 861–890.

32. **Tvergaard V., Hutchinson J. W.** The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1992. Vol. 40. No. 6. Pp. 1377–1397.

33. **Herms E., Olive J. M., Puiggali M.** Hydrogen embrittlement of 316L type stainless steel // Materials Science and Engineering A. 1999. Vol. 272. No. 2. Pp. 279–283.

34. **Momotani Y., Shibata A., Terada D., Tsuji N.** Effect of strain rate on hydrogen embrittlement in low-carbon martensitic steel // International Journal of Hydrogen Energy. 2017. Vol. 42. No. 5. Pp. 3371–3379.

REFERENCES

1. ISO11114-4. Transportable gas cylinders – compatibility of cylinder and valve materials with gas contents – part 4: Test methods for selecting metallic materials resistant to hydrogen embrittlement. ISO 11114-4:2017 International Organization for Standardization, (2017). URL: https://www.iso.org/standard/64587.html (Date of the last access: 12.03.2022).

2. ISO16573. Steel-measurement method for the evaluation of hydrogen embrittlement resistance of high strength steels. ISO 16573:2015 International Organization for Standardization, (2015). URL: https://www.iso.org/standard/57128.html (Date of the last access: 12.03.2022).

3. ISO17081. Method of measurement of hydrogen permeation and determination of hydrogen uptake and transport in metals by an electrochemical technique. ISO 17081:2014 International Organization for Standardization (2014). URL: https://www.iso.org/standard/64514.html (Date of the last access: 12.03.2022).

4. **Giuliani L., Mirabile M., Sarracino M.,** Embrittlement kinetics of N 80 steel in H_2S environment, Metall. Mater. Trans. B. 5 (9) (1974) 2069–2073.

5. **Nagumo M., Yoshida H., Shimomura Y., Kadokura T.,** Ductile crack growth resistance in hydrogen-charged steels, Mater. Trans. 42 (1) (2001) 132–137.

6. **Koyama M., Tasan C. C., Tsuzaki K.,** Overview of metastability and compositional complexity effects for hydrogen-resistant iron alloys: Inverse austenite stability effects, Eng. Fract. Mech. 214 (2019) 123–133.

7. **Troiano A. R.,** The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals, Metallogr. Microstruct. Anal. 5 (6) (2016) 557–569.

8. **Peral L. B., Zafra A., Fernández-Pariente I., et al.,** Effect of internal hydrogen on the tensile properties of different CrMo(V) steel grades: Influence of vanadium addition on hydrogen trapping

and diffusion, Int. J. Hydrog. Energy. 45 (41) (2020) 22054–22079.

9. **Venezuela J., Hill T., Zhou Q., et al.,** Hydrogen-induced fast fracture in notched 1500 and 1700 MPa class automotive martensitic advanced high-strength steel, Corr. Sci. 188 (1 August) (2021) 109550.

10. **Duportal M., Oudriss A., Savall C., et al.,** On the implication of mobile hydrogen content on the surface reactivity of an austenitic stainless steel, Electrochim. Acta. 403 (20 January) (2022) 139684.

11. **Alekseeva E., Belyaev A., Zegzhda A., et al.,** Boundary layer influence on the distribution of hydrogen concentrations during hydrogen-induced cracking test of steels, Diagnostics, Resource and Mechanics of Materials and Structures. (3) (2018) 43–57 (in Russian).

12. **Polyanskiy V. A., Belyaev A. K., Alekseeva E. L., et al.,** Phenomenon of skin effect in metals due to hydrogen absorption, Contin. Mech. Thermodyn. 31 (6) (2019) 1961–1975.

13. **Martinsson A., Sandström R.,** Hydrogen depth profile in phosphorus-doped, oxygen-free copper after cathodic charging, J. Mater. Sci. 47 (19) (2012) 6768–6776.

14. **Wu R., Ahiström J., Magnusson H., et al.,** Charging, degassing and distribution of hydrogen in cast iron (report SKB R-13-45), Svensk Kärnbränslehantering AB, Swedish Nuclear and Waste Management Co., Stockholm, May 2015.

15. **Oriani R. A.,** A mechanistic theory of hydrogen embrittlement of steels, Berichte der Bundesgesellschaft für physikalische Chemie. 76 (8) (1972) 848–857.

16. **Troiano A. R.,** The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals, Trans. ASM. 52 (1960) 54–80.

17. **Birnbaum H. K., Sofronis P.,** Hydrogen-enhanced localized plasticity – a mechanism for hydrogen-related fracture, Mater. Sci. Eng. A. 176 (1–2) (1994) 191–202.

18. **Sofronis P., Birnbaum H. K.,** Mechanics of the hydrogen dislocation-impurity interactions. I. Increasing shear modulus, J. Mech. Phys. Solid. 43 (1) (1995) 49–90.

19. **Taha A., Sofronis P.,** A micromechanics approach to the study of hydrogen transport and embrittlement, Eng. Fract. Mech. 68 (6) (2001) 803–837.

20. **von Fick A.,** Ueber Diffusion, Annalen der Physik. 170 (1) (1855) 59–86.

21. **Shewmon P. G.,** Diffusion in solids, Mc Graw-Hill Book Co, Inc., New York, 1963.

22. **Kolachev B. A.,** Vodorodnaya khrupkost metallov [Hydrogen embrittlement of metals], Metallurgiya, Moscow, 1985 (in Russian).

23. **Gorsky W.,** Theorie der elastischen Nachwirkung in ungeordneten Mischkristallen (elastische Nachwirkung zweiter Art), Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion. 8 (1935) 457–471.

24. **Serebrinsky S., Carter E. A., Ortiz M.,** A quantum-mechanically informed continuum model of hydrogen embrittlement, J. Mech. Phys. Solids. 52 (10) (2004) 2403–2430.

25. **McLean D.,** Grain boundaries in metals. Clarendon Press, London, 1957.

26. **Irwin G. R.,** Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate, J. Appl. Mech. 24 (3) (1957) 361–364.

27. **Irwin G. R.,** Fracture, In book: Encyclopedia of Physics, Ed. by S. Flugge, Vol. 6: Elasticity and Plasticity, Springer Verlag, Berlin (1958) 551–590.

28. **Wilkins M. L.,** Computer simulation of dynamic phenomena, Springer Science & Business Media, Berlin, Heidelberg, 1999.

29. Stress intensity factors handbook, in 2 Vols. Editor-in-Chief Murakami Y. Vol. 2. The Society of Materials Science, Pergamon Press Oxford, New York, 1987.

30. **Benthem J. P., Koiter W. T.,** Asymptotic approximations to crack problems, In book: Methods of analysis and solutions of crack problems, Ed. by G. C. Sih, Book Series “Mechanics of Fracture”, Vol. 1. Springer, Dordrecht (1973) 131–178.

31. **Hirth J. P.,** Effects of hydrogen on the properties of iron and steel, Metallurg. Trans. A. 11 (6) (1980) 861–890.

32. **Tvergaard V., Hutchinson J. W.,** The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids, J. Mech. Phys. 40 (6) (1992) 1377–1397.

33. **Herms E., Olive J. M., Puiggali M.,** Hydrogen embrittlement of 316L type stainless steel, Mater. Sci. Eng. A. 272 (2) (1999) 279–283.

34. **Momotani Y., Shibata A., Terada D., Tsuji N.,** Effect of strain rate on hydrogen embrittlement in low-carbon martensitic steel, Int. J. Hydrog. Energy. 42 (5) (2017) 3371–3379.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СЕДОВА Юлия Сергеевна – *стажер-исследователь Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61
sedova.yus@mail.ru
ORCID: 0000-0003-4397-6073

БЕССОНОВ Николай Михайлович – *доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61
nickbessonov1@gmail.com.ru
ORCID: 0000-0001-6462-5980

ПОЛЯНСКИЙ Владимир Анатольевич – *доктор технических наук, директор Института проблем машиноведения РАН.*
199178, Россия, г. Санкт-Петербург, Большой проспект В. О., 61
vapol@mail.ru
ORCID: 0000-0002-1199-1028

THE AUTHORS

SEDOVA Yuliya S.
Institute for Problems in Mechanical Engineering of the RAS
61 Bolshoy Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia
sedova.yus@mail.ru
ORCID: 0000-0003-4397-6073

BESSONOV Nikolay M.
Institute for Problems in Mechanical Engineering of the RAS
61 Bolshoy Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia
nickbessonov1@gmail.com.ru
ORCID: 0000-0001-6462-5980

POLYANSKIY Vladimir A.
Institute for Problems in Mechanical Engineering of the RAS
61 Bolshoy Ave., V. Isl., St. Petersburg, 199178, Russia
vapol@mail.ru
ORCID: 0000-0002-1199-1028

Статья поступила в редакцию 31.03.2022. Одобрена после рецензирования 30.06.2022. Принята 01.07.2022.
Received 31.03.2022. Approved after reviewing 30.06.2022. Accepted 01.07.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Радиофизика

Научная статья
УДК 535.3, 535-15, 535.417
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15314

СИНТЕЗ ОКОННЫХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ СНИЖЕНИЯ МЕТОДИЧЕСКИХ ОШИБОК МУЛЬТИПЛЕКСИРОВАННЫХ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИХ ДАТЧИКОВ

А. А. Маркварт ✉, Л. Б. Лиокумович, Н. А. Ушаков

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ markvart_aa@spbstu.ru

Аннотация. Проведен анализ методической погрешности цифровой обработки бигармонического сигнала двух мультиплексированных волоконно-оптических интерферометров при спектральном опросе, когда регистрируемая спектральная передаточная функция обрабатывается посредством дискретного преобразования Фурье. Предложен синтез специальной весовой оконной функции, позволяющей снизить методические погрешности определения частот полигармонического сигнала без существенного увеличения случайной погрешности. Эффективность такого подхода доказана численным моделированием и экспериментально, путем сравнения с результатами применения стандартного окна Дольфа – Чебышёва. Предложенный подход может использоваться в любых задачах, связанных с оценкой частот и фаз полигармонических сигналов.

Ключевые слова: гармонический анализ, дискретное преобразование Фурье, методическая погрешность, оконная функция, интерферометр

Финансирование: Работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2020-0024).

Для цитирования: Маркварт А. А., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А. Синтез оконных функций для снижения методических ошибок мультиплексированных волоконно-оптических датчиков // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 185–200. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15314

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15314

SYNTHESIS OF WINDOW FUNCTIONS FOR REDUCING SYSTEMATIC ERRORS OF MULTIPLEXED FIBER-OPTIC SENSORS

A. A. Markvart ✉, L. B. Liokumovich, N. A. Ushakov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ markvart_aa@spbstu.ru

Abstract. In the paper, the systematic (bias) error of digital processing of the biharmonic signal of two multiplexed fiber-optic interferometers under spectral interrogation, when the registered spectral transfer function being processed through a discrete Fourier transform has

© Маркварт А. А., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

been analyzed. The synthesis of a special weighted window function was put forward; this made it possible to reduce the systematic errors in determining the frequencies of a polyharmonic signal without a significant increase in the random (noise) error. The effectiveness of this approach was proven through numerical simulation and experimentally by comparison with the error when using standard Dolph − Chebyshev window. The proposed approach can be applied in any problems related to the estimation of frequencies and phases of polyharmonic signals.

Keywords: harmonic analysis, discrete Fourier transform, methodological error, window function, interferometer

Funding: The reported study was carried out as a part of the State Assignment for Fundamental Research (Subject Code FSEG-2020-0024).

For citation: Markvart A. A., Liokumovich L. B., Ushakov N. A., Synthesis of window functions for reducing systematic errors of multiplexed fiber-optic sensors, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 185–200. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15314

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

Введение

Волоконно-оптические датчики являются предметом активных исследований и разработок благодаря высокой точности, электромагнитной нейтральности, компактным размерам, возможности мультиплексирования и возможности удаленного опроса [1]. Такие датчики позволяют измерять различные физические воздействия, например, температуру, растяжение, давление и другие, и обладают широкой сферой применения: от мониторинга зданий и сооружений до медицинской диагностики.

Интерферометрические волоконно-оптические датчики относятся к одному из типов таких датчиков [2]. Эффективным и часто применяемым принципом организации их опроса служит спектральная интерферометрия. Она подразумевает регистрацию и последующую обработку зависимости относительного уровня интенсивности света S, прошедшего через чувствительный интерферометр, от частоты f этого света; указанная зависимость $S(f)$ есть спектральная передаточная функция (СПФ, *англ*. Spectral Transfer Function (STF)) этого интерферометра [3].

При подключении к одному опросному устройству пользователи стараются, как правило, мультиплексировать два или несколько интерферометров [4, 5]. Важно отметить (и это можно показать), что STF мультиплексированных интерферометров содержит суммы гармонических компонент с определенными частотами и фазами, характеризующих каждый из чувствительных элементов.

К наиболее распространенным методам обработки STF относится применение дискретного преобразования Фурье (ДПФ, *англ*. Discrete Fourier Transform (DFT)) с анализом полученных в результате гармонических компонент. Однако эффект спектрального просачивания приводит к появлению методических ошибок определения частот и фаз гармонических компонент в STF и, следовательно, к ошибкам демодуляции сигналов мультиплексированных датчиков и к их паразитному взаимовлиянию. Для снижения уровня этих ошибок обычно применяют стандартные весовые функции: окна Хэмминга, Кайзера, Блэкмана, Дольфа − Чебышёва и др. [6, 7]. Недостаток их использования − это снижение спектрального разрешения и увеличение влияния шумов на измерения из-за роста величины эквивалентной шумовой полосы (Equivalent Noise Bandwidth (ENBW)) окна. Поэтому стоит считать привлекательным синтез специальных окон, снижающих ошибки демодуляции без значительного ухудшения уровня ENBW. Такой подход был рассмотрен в работах [8 − 10] и использован в радиолокационных системах. Однако предложенный авторами алгоритм синтеза окна и нахождения частот гармонических компонент сигнала является многоитерационным, а значит, необходим пересчет окон при любом изменении частот гармонических компонент. При измерениях с помощью волоконно-оптических

© Markvart A. A., Liokumovich L. B., Ushakov N. A., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

интерферометров, частоты гармонических компонент в STF, как правило, изменяются незначительно. Это дает возможность избежать многоитерационного пересчета окон и использовать только одно весовое окно, специально синтезированное для конкретной схемы.

В данной работе предложен метод снижения ошибок демодуляции сигналов от двух мультиплексированных волоконно-оптических интерферометрических датчиков путем синтеза специального весового окна.

Предлагаемый метод лишен указанных недостатков, которые присущи известным методам синтеза окон.

Описание схемы и общий принцип синтеза специального окна

Для определенности будем рассматривать схему с двумя мультиплексированными чувствительными элементами, представляющими собой так называемые внешние волоконные интерферометры Фабри – Перо (ВВИФП, *англ.* Extrinsic Fiber Fabry – Perot Interferometer (EFFPI)) (рис. 1) [3, 8]. Каждый EFFPI образован торцом подводящего одномодового световода и некоторым зеркалом с воздушным зазором между ними с толщинами L_1 и L_2 для первого и второго EFFPI соответственно. При измерениях нужно определять изменения L_1 и L_2, вызываемые измеряемым воздействием (деформация, температура и т. п.). В ходе опроса излучение лазера, перестраиваемого по оптической частоте (длине волны), проходит циркулятор (Circulator) и направляется через разветвитель (Coupler) к обоим EFFPI, после чего отражается от них и через разветвитель и циркулятор поступает в фотоприемное устройство (Photodetector).

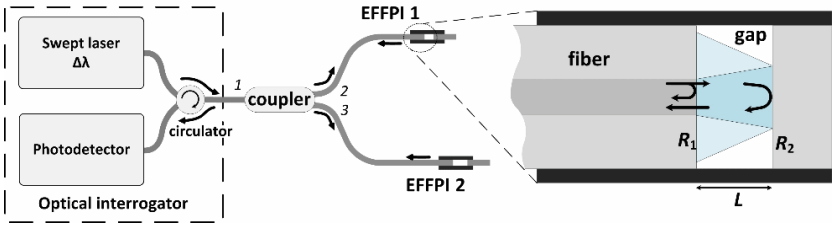


Рис. 1. Измерительная схема с мультиплексированными ВВИФП (EFFPI):
Optical interrogator – оптическое опросное устройство; Swept laser – перестраиваемый лазер; Circulator – циркулятор; Coupler – разветвитель с портами номер *1*, *2* и *3*; Fiber – волокно; Gap – зазор интерферометра шириной L; Photodetector – фотодетектор; R_1, R_2 – коэффициенты отражения зеркал

Будем подразумевать случай слабодобротных EFFPI (правомерно при малых R_1 и R_2), когда можно не рассматривать волны от многократных отражений. Если разность длин подводящих отрезков волокна между EFFPI и разветвителем больше длины когерентности источника излучения, то спектральная передаточная функция будет определяться интерференцией пар лучей от каждого EFFPI [4, 11]:

$$S\left(f, L_1, L_2\right) = \overline{S} + S_1 \cos\left[\frac{4\pi L_1}{c} f + \gamma_1\left(L_1\right)\right] + S_2 \cos\left[\frac{4\pi L_2}{c} f + \gamma_2\left(L_2\right)\right], \qquad (1)$$

где

$$\overline{S} = \alpha_{12}^2\left[R_1 + R_2\eta_1\right] + \alpha_{13}^2\left[R_1 + R_2\eta_2\right],$$

$$S_{1,2} = 2\alpha_{12,13}^2\sqrt{R_1 R_2 \eta_{1,2}},$$

$$\eta_{1,2} = \frac{\pi^2 w_0\left(f\right)^2}{L_{1,2}^2 c^2 / f^2 + \pi^2 w_0\left(f\right)^2},$$

$$\gamma_{1,2} = \pi - \operatorname{arctg}\left(\frac{L_{1,2}}{z_R}\right),$$

$$z_R = \pi \cdot f \cdot w_0^2\left(f\right)/c.$$

В выражении (1) использованы следующие обозначения: f, c – частота и скорость света; $\overline{S}$ – средний уровень STF; $S_{1,2}$ – амплитуды интерференционных компонент, определяющиеся зеркалами $R_{1,2}$, коэффициентами связи разветвителя $\alpha_{12,13}$ и потерями света в ВВИФП из-за расходимости света в зазоре (потери учитываются коэффициентами $\eta_{1,2}$); $\gamma_{1,2}$ – фазовые сдвиги волн; z_R – рэлеевская длина гауссова пучка; w_0 – радиус гауссова пучка в перетяжке.

Фазовый сдвиг приобретают волны при отражении от внешнего зеркала, а также вследствие расходимости света в зазоре интерферометра. Явный вид выражений для $\eta_{1,2}$ и $\gamma_{1,2}$ получается при использовании для света в зазоре интерферометра модели гауссового пучка [11] (z_R – рэлеевская длина гауссова пучка); радиус гауссова пучка в перетяжке соответствует радиусу модового пятна волокна. Отметим, что при расчете STF в небольших диапазонах перестройки частоты, используемых в практических устройствах опроса, незначительными изменениями величин $\eta_{1,2}$, $\gamma_{1,2}$, z_R и w_0 (вследствие изменения частоты f) обычно пренебрегают.

На практике при измерении STF система опроса регистрирует набор отсчетов $S_i = S(f_i, L_1, L_2)$, где i – номер отсчета. Для дальнейшей обработки сигнала необходим равномерный шаг изменения частоты Δ. Если f_0 – центр диапазона сканирования частоты, а N – количество отсчетов, то

$$f_i = f_0 + [i - (N-1)/2]\cdot\Delta, \tag{2}$$

где i меняется от 0 до $(N-1)$, а интервал сканирования $\Delta f = \Delta\cdot(N-1)$.

Задача демодуляции полученной зависимости $S(f)$ состоит в нахождении значений L_1 и L_2, что сводится к задаче оценки частот и фаз гармонических компонент следующей последовательности:

$$v(i) = w(i)\left\{\overline{S} + S_1\cos\left[\omega_1\left(L_1\right)\cdot i + \vartheta_1\left(L_1\right)\right] + S_2\cos\left[\omega_2\left(L_2\right)\cdot i + \vartheta_2\left(L_2\right)\right]\right\}, \tag{3}$$

где $w(i)$ – используемое весовое окно; $\omega_{1,2}(L_{1,2})$ – круговые частоты в радианах; $\vartheta_{1,2}(L_{1,2})$ – фазы гармонических компонент.

С учетом выражений (1) и (2) получим:

$$\omega_{1,2}(L_{1,2}) = 4\pi\Delta\cdot L_{1,2}/\mathrm{c}, \tag{4}$$

$$\vartheta_{1,2}\left(L_{1,2}\right) = 4\pi\cdot f_0\cdot L_{1,2}/c - 2\pi\cdot\Delta\cdot\left(N-1\right)\cdot L_{1,2}/c + \gamma_{1,2}\left(L_{1,2}\right). \tag{5}$$

Фурье-образ последовательности отсчетов (3) будет иметь вид [6]:

$$V\left(\omega, L_1, L_2\right) = \overline{S}\cdot W\left(\omega\right) +$$
$$+0{,}5\cdot S_1\cdot\exp\left[j\vartheta_1\left(L_1\right)\right]\cdot W\left[\omega-\omega_1\left(L_1\right)\right] + 0{,}5\cdot S_1\cdot\exp\left[-j\vartheta_1\left(L_1\right)\right]\cdot W\left[\omega+\omega_1\left(L_1\right)\right] + \tag{6}$$
$$+0{,}5\cdot S_2\cdot\exp\left[j\vartheta_2\left(L_2\right)\right]\cdot W\left[\omega-\omega_2\left(L_2\right)\right] + 0{,}5\cdot S_2\cdot\exp\left[-j\vartheta_2\left(L_2\right)\right]\cdot W\left[\omega+\omega_2\left(L_2\right)\right],$$

где $W(\omega)$ – Фурье-образ окна $w(i)$.

Частоты $\omega_{1,2}$ обычно находят, определяя положения $\omega_{1m,2m}$ максимумов модуля Фурье-образа V, а фазы $\vartheta_{1,2}$ – через вычисления аргумента V в этих максимумах (с учетом влияния окна). Однако, как видно из выражения (3), первое, третье, четвертое и пятое слагаемые ведут к появлению ошибок при нахождении ω_1 и ϑ_1. Это связано с тем, что при оценке максимума величины $|V(\omega)|$ и аргумента V в области ω_1 нужное второе слагаемое с

$W(0)$ будет дополняться искажающими результат слагаемыми с $W(\omega_1)$, $W(2\omega_1)$, $W(\omega_1 - \omega_2)$ и с $W(\omega_1 + \omega_2)$. Аналогично первое, второе, третье и пятое слагаемые ведут к появлению ошибок при нахождении ω_2 и ϑ_2 в области ω_2. Для корректного определения частот и фаз необходимо синтезировать такое весовое окно w^{synt}, Фурье-образ W^{synt} которого обеспечил бы минимизацию соответствующих паразитных слагаемых в области искомых частот, за счет провалов W^{synt} в областях ω_1, $2\omega_1$, $(\omega_1 + \omega_2)$, $(\omega_1 - \omega_2)$, ω_2, $2\omega_2$, $(\omega_2 - \omega_1)$. Кроме того, необходимо дополнительно обеспечить провалы W^{synt} и в области отрицательных частот, чтобы Фурье-образ W^{synt} был симметричным относительно нуля, ибо только в этом случае оценка частоты по максимумам Фурье-образа $|V|$ от последовательности, умноженной на окно w^{synt}, будет несмещенной. В отрицательной области это дополнительные частоты: $-\omega_1$, $-2\omega_1$, $-(\omega_1 + \omega_2)$, $-\omega_2$, $-2\omega_2$.

Таким образом, необходимо обеспечить минимизацию величины W^{synt} в области вышеуказанных двенадцати частот, т. е. в полосах $\Delta\Omega_p$, $p = \pm1, \pm2, \ldots, \pm6$, которые должны учитывать возможные изменения частот $\omega_{1,2}$ от изменения $L_{1,2}$, а также смещение положений $\omega_{1m,2m}$ максимумов $|V|$ из-за спектрального просачивания и влияния шумов измерительной аппаратуры. Если обозначить эти изменения частот как $\Delta\omega_1$ и $\Delta\omega_2$, то можно записать следующие выражения для полос провалов W^{synt}:

$$\Delta\Omega_{\pm1} = \Delta\omega_1,\ \Delta\Omega_{\pm2} = 2\Delta\omega_1,\ \Delta\Omega_{\pm3} = \Delta\omega_2,$$

$$\Delta\Omega_{\pm4} = 2\Delta\omega_2,\ \Delta\Omega_{\pm5} = \Delta\omega_1 + \Delta\omega_2,\ \Delta\Omega_{\pm6} = \Delta\omega_1 + \Delta\omega_2.$$

Целесообразно синтезировать требуемое окно $w^{synt}(i)$ на основе одного из стандартных окон $w(i)$, введя дополнительное требование минимальной невязки Фурье-образов этих окон $W^{synt}(\omega)$ и $W(\omega)$ вне данных областей. При этом требования, к окну $w^{synt}(i)$ можно записать в виде двух условий:

$$\begin{cases} \text{Условие 1:} \\ \left|W^{synt}(\omega)\right| \to \min \text{ для} \\ \quad \omega \in \pm\left[\omega_{1m} - \Delta\Omega_1/2;\ \omega_{1m} + \Delta\Omega_1/2\right] \cup \pm\left[2\omega_{1m} - \Delta\Omega_2/2;\ 2\omega_{1m} + \Delta\Omega_2/2\right] \cup \\ \qquad \cup \pm\left[\omega_{2m} - \Delta\Omega_3/2;\ \omega_{2m} + \Delta\Omega_3/2\right] \cup \pm\left[2\omega_{2m} - \Delta\Omega_4/2;\ 2\omega_{2m} + -\Delta\Omega_4/2\right] \cup \\ \qquad \cup \pm\left[\omega_{1m} - \omega_{2m} - \Delta\Omega_5/2;\ \omega_{1m} - \omega_{2m} + \Delta\Omega_5/2\right] \cup \\ \qquad \cup \pm\left[\omega_{1m} + \omega_{2m} - \Delta\Omega_6/2;\ \omega_{1m} + \omega_{2m} + \Delta\Omega_6/2\right]; \\ \text{Условие 2:} \\ \left|W^{synt}(\omega) - W(\omega)\right| \to \min \text{ для другой } \omega. \end{cases} \quad (7)$$

Условие 1 задает провалы W^{synt} на частотах $\pm\omega_1$, $\pm2\omega_1$, $\pm\omega_2$, $\pm2\omega_2$, $\pm|(\omega_1 - \omega_2)|$, $\pm(\omega_1 + \omega_2)$. Отметим, что это условие (7) отвечает за подавление $W^{synt}(\omega)$ в заданных частотных областях и фактически направлено на снижение методической погрешности при нахождения частот и фаз гармонических компонент, из-за паразитных влияний, указанных выше.

Условие 2 можно трактовать как минимизацию уширения главного лепестка Фурье-образа окна. Оно препятствует увеличению значения ENBW окна, т. е. увеличению случайной погрешности измерений, вызванной влиянием шумов измерительной аппаратуры.

Существуют различные подходы к формированию провалов в Фурье-образе некоторой последовательности отсчетов. Особенно развиты такие подходы в области антенных решеток, где часто нужен синтез дискретного амплитудно-фазового распределения токов на элементах антенной решетки для формирования провалов диаграммы направленности антенны в заданных направлениях [12 – 15]. Мы будем использовать один из подходов к решению такой задачи, представленный в работе [15], ввиду его относительной простоты. Согласно этому подходу, представим искомый Фурье-образ окна W^{synt} в виде разности

исходного W и компенсирующего W^{comp} Фурье-образов:

$$W^{synt} = W - W^{comp}. \tag{8}$$

Логика синтеза окна такова. Пусть, например, компенсирующий образ W^{comp} – это образ окна, главный лепесток которого сдвинут по частоте в положение ω_1 и равен по амплитуде модулю исходного образа W в этой точке. Тогда при вычитании в точке ω_1 образуется нуль образа W^{synt}. Для формирования широких провалов предлагается формировать набор нулей во многих точках ω_k, заполняющих области провалов. Компенсирующий Фурье-образ при этом составляется в виде суммы [15]:

$$W^{comp}(\omega) = \sum_{k=1}^{K} H_k \cdot G(\omega - \omega_k), \tag{9}$$

где $G(\omega)$ – базисные функции; $\{\omega_k\}$ – набор частотных точек, где создаются нули в Фурье-образе синтезируемого окна; $\{H_k\}$ – коэффициенты перед базисными функциями, рассчитываемые после задания набора $\{\omega_k\}$.

В качестве базисной функции будем использовать Фурье-образ прямоугольного окна. Для получения синтезируемой функции W^{synt}, необходимо найти набор $\{\omega_k\}$. Коэффициенты $\{H_k\}$ рассчитываются из условия, что значение вычитаемой функции W^{comp} должно быть равно величине исходной функции W в каждой из точек набора $\{\omega_k\}$. В матричной форме это условие можно записать в следующем виде:

$$\left[W(\omega_k)\right] = \left[G(\omega - \omega_k)\right] \cdot \left[H_k\right]. \tag{10}$$

Тогда коэффициенты $\{H_k\}$ можно найти с помощью выражения

$$\left[H_k\right] = \left[G(\omega - \omega_k)\right]^{-1} \cdot \left[W(\omega_k)\right]. \tag{11}$$

После расчета этих коэффициентов искомое окно $w^{synt}(i)$ находится обратным преобразованием Фурье от W^{synt}, или, с учетом теоремы о частотном сдвиге Фурье-образа, с помощью выражения

$$w^{comp}(i) = \sum_{k=1}^{K} H_k \cdot g(i) \cdot \exp\left[j\omega_k i\right], \tag{12}$$

где $g(i)$ – обратное преобразование Фурье базисной функции $G(\omega)$.

Метод поиска оптимального набора $\{\omega_k\}$

В рамках предложенного подхода ключевым является выбор набора $\{\omega_k\}$ для наилучшего соответствия условию (7). В работах [15, 16] использовался простой вариант с эквидистантным распределением определенного количества точек ω_k в областях предполагаемых провалов Фурье-образа W^{synt}. Однако такой выбор может оказаться далеким от оптимального. Фактически требуется многопараметрическая оптимизация, причем к оптимизируемым параметрам относятся не только значения ω_k, но и количество точек K в наборе. Для решения проблемы зададимся некоторой целевой функцией M. В нее логично ввести минимизацию наибольших уровней $|W^{synt}|$ в областях провалов, а также регуляризационное слагаемое r, зависящее от величины ENBW:

$$\begin{cases} M = \max\left|W^{synt}\left[\omega_{1m} - \Delta\Omega_1/2;\, \omega_{1m} + \Delta\Omega_1/2\right]\right| + \max\left|W^{synt}\left[2\omega_{1m} - \Delta\Omega_2/2;\, 2\omega_{1m} + \Delta\Omega_2/2\right]\right| + \\ + \max\left|W^{synt}\left[\omega_{2m} - \Delta\Omega_3/2;\, \omega_{2m} + \Delta\Omega_3/2\right]\right| + \max\left|W^{synt}\left[2\omega_{2m} - \Delta\Omega_4/2;\, 2\omega_{2m} + \Delta\Omega_4/2\right]\right| + \\ + \max\left|W^{synt}\left[\left|\omega_{1m} - \omega_{2m}\right| - \Delta\Omega_5/2;\, \left|\omega_{1m} - \omega_{2m}\right| + \Delta\Omega_5/2\right]\right| + \\ + \max\left|W^{synt}\left[\omega_{1m} + \omega_{2m} - \Delta\Omega_6/2;\, \omega_{1m} + \omega_{2m} + \Delta\Omega_6/2\right]\right| + \\ + r\left\{\mathrm{ENBW}\left(w^{synt}\right)\right\} \end{cases} \tag{13}$$

Как уже отмечалось выше, при увеличении глубины провалов возрастает значение ENBW, поэтому необходимо находить баланс между этими величинами, т. е. баланс между методической и случайной погрешностями; требуемое равновесие можно регулировать выбором функции $r\{\mathrm{ENBW}\ (w^{synt})\}$. Сами точки ω_k целесообразно выбирать в областях, немного более широких (в k раз), чем $\Delta\Omega_p$, т. е. в областях шириной $k{\cdot}\Delta\Omega_p$.

В данной работе для поиска набора $\{\omega_k^p\}$ мы использовали генетический алгоритм оптимизации [17], так как он хорошо подходит для задачи, где целевая функция, определяемая выражением (13), является существенно нелинейной и имеет множество разрывов. Процедуру оптимизации проводили в программном пакете MATLAB с помощью встроенной функции ga со случайным набором $\{\omega_k\}$ в первом поколении [18]. В соответствии с требованиями симметрии W^{synt}, набор $\{\omega_k\}$ задавали симметричным относительно нуля. Поколения имели длину $K/2$, поскольку, ввиду симметрии, значения ω_k оптимизировали в области положительных частот. Функция минимизации была запрограммирована так, чтобы оптимизировалось не только положение ω_k, но и значение K. С одной стороны, чем больше K, тем более глубокие провалы W^{synt} формируются, однако с другой стороны, снижается обусловленность матрицы $[W^{comp}(\omega_k)]$, что ведет к вычислительным ошибкам и появлению некорректных результатов. Начальное значение K и размер популяции выбирались эмпирическим путем. Остальные параметры функции ga были выбраны по умолчанию.

Демонстрация предложенного подхода на основе моделирования

С целью демонстрации результатов предлагаемого подхода и снижения методической погрешности демодуляции сигнала мультиплексированных EFFPI, мы провели численное моделирование в программном пакете MATLAB. Расчет $S(f)$ проводили по формуле (1) в частотном интервале $\Delta f = 9{,}99$ ТГц с центром диапазона сканирования частоты $f_0 = 193{,}54$ ТГц (в шкале длин волн это соответствует диапазону от 1510 до 1590 нм), шагом по частоте $\Delta = 5$ ГГц и количеством отсчетов $N = 2000$. В качестве параметров мультиплексированных EFFPI использовали коэффициенты отражения зеркал $R_{1,2} = 3{,}5$ %. Для используемого в выражении (1) радиуса гауссова пучка в перетяжке выбрано значение $w_0 = 5{,}2$ мкм (это соответствует значению диаметра модового поля (*англ.* Mode Field Diameter (MFD)) стандартного одномодового волокна для длины волны 1550 нм), которое считали фиксированным. С учетом этих значений был рассчитан набор последовательностей отсчетов $S(f)$ (5001 последовательностей); при этом зазор L_1 первого EFFPI задавали постоянным, со значением $L_1 = 664{,}8$ мкм, а зазор L_2 второго EFFPI линейно увеличивали от одной STF к другой STF в диапазоне от 861 до 906 мкм с шагом в 10 нм. Отметим, что указанные параметры моделирования мы выбирали с учетом экспериментальных данных (будут описаны и проанализированы далее). На рис. 2, *a* представлен график рассчитанной STF для $L_2 = 883{,}5$ мкм.

Для последующей обработки сигнала, по вычисленным отсчетам STF находили ее среднее значение и затем последовательность центрировали. Это делали для того, чтобы минимизировать паразитное влияние постоянной составляющей STF на результаты обработки сигнала посредством DFT. Далее для каждой центрированной STF рассчитывали двухсоттысячное точечное DFT $V(\omega)$. При этом в качестве исходного было выбрано прямоугольное единичное окно $w(i) = 1$, где $i = 0, 1, \ldots, N-1$. Его Фурье-образ определяется следующей формулой:

$$W(\omega) = \frac{\sin(\omega N/2)}{\sin(N/2)} \exp\left[-j\omega(N-1)/2\right]. \qquad (14)$$

На рис. 2,*b* представлены графики модулей $|V(\omega)|$ для трех значений L_2: 876,0, 883,5 и 891,0 мкм при значении $L_1 = 664{,}8$ мкм. Помимо частотной шкалы в радианах, для удобства на графике добавлена шкала значений L в микрометрах (пересчитана с помощью выражения (4)). Видно, что положение максимумов $|V(\omega)|$ отклоняется от заданных значений L_1 и L_2, что отражает проявление методической погрешности определения длин зазоров.

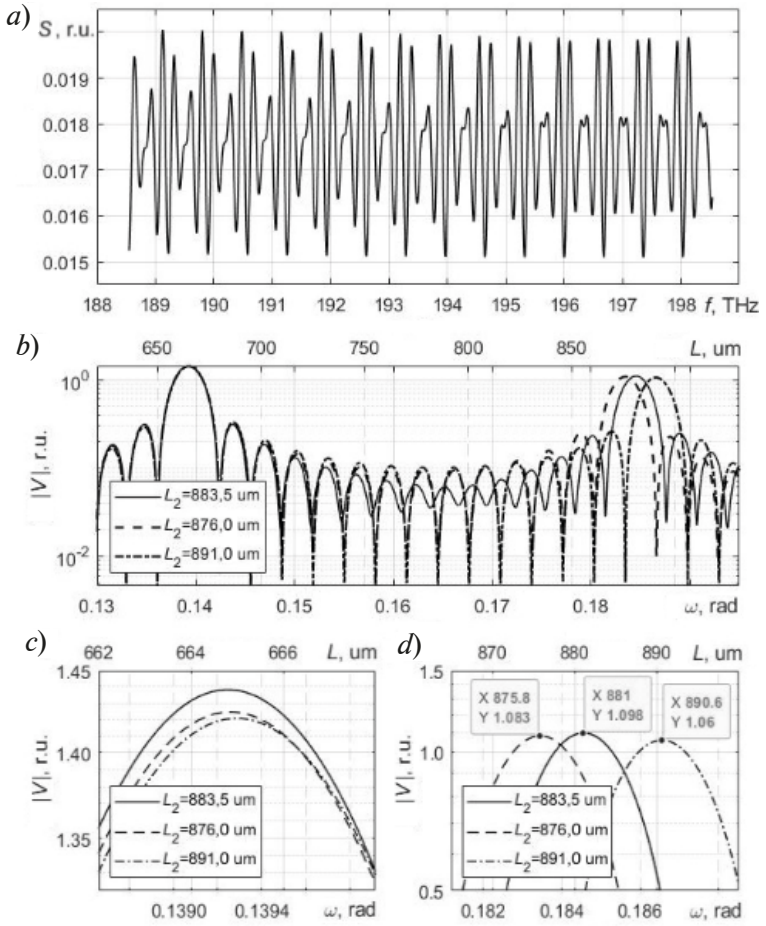


Рис. 2. Результаты численного моделирования бигармонического сигнала двух мультиплексированных волоконно-оптических интерферометров:
a – частотная зависимость STF для схемы; *b* – зависимости $|V(\omega)|$; *c*, *d* – фрагменты $|V(\omega)|$;
L_1 = 664,8 мкм, L_2 = 883,5 мкм (*a*); L_1 = 664,8 мкм, значения L_2 даны в легендах (*b* – *d*)

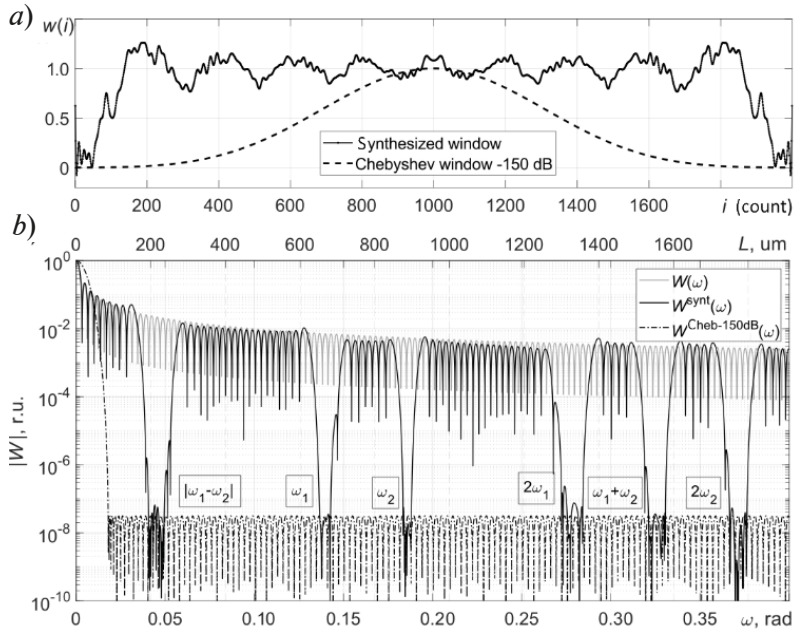


Рис. 3. Сравнение графиков для синтезированного нами окна и стандартного окна – окна Дольфа – Чебышёва: *a* – зависимости *w* от номера отсчета; *b* – нормированные зависимости модуля Фурье-образов для $w(i)$, $w^{synt}(i)$ и $w^{\text{Cheb-150dB}}(i)$

Далее, согласно описанному выше алгоритму, было синтезировано окно w^{synt}, удовлетворяющие условию (7). В качестве базисной при расчете окна по формулам (8), (9) была выбрана функция Фурье-образа прямоугольного окна, т. е. $G(\omega) = W(\omega)$. При нахождении оптимального набора $\{\omega_k\}$, функция $r\{\mathrm{ENBW}(w^C)\}$ в условии (13) была задана равной нулю, поскольку в данном случае значение ENBW окна при его синтезе оказывалось близким к единице.

Окно w^{synt} мы синтезировали исходя из предположения, что диапазон изменения зазора датчиков составляет 15 мкм с центрами L_{10} = 664,8 мкм, L_{20} = 883,5 мкм. Для этих параметров оптической схемы были выбраны следующие параметры в условии (13):

круговые частоты $\omega_1 = 0{,}1392$ рад и $\omega_2 = 0{,}1851$ рад;
полосы частот $\Delta\omega_1 = \Delta\omega_2 = 0{,}0034$ рад.

Эти значения полос соответствуют указанному выше диапазону изменения зазора плюс запас в 1 мкм, взятый с учетом возможного смещения из-за методической погрешности (смещение оценивалось по данным на рис. 2, *b* – *d*). Параметры генетической оптимизации задавали следующими:

размер популяции – 500; количество точек в наборе $\{\omega_k\}$ $K/2 = 90$;
коэффициент $k = 2$.

На рис. 3 представлены графики синтезированного окна (весовой функции) $w^{synt}(i)$ и Фурье-образа $W^{synt}(\omega)$, полученного с этим окном. Видно, что удалось получить шесть глубоких провалов на уровне не менее $3\cdot10^{-8}$ относительно максимума главного лепестка. Вне области провалов зависимость $W^{synt}(\omega)$ близка к Фурье-образу прямоугольного окна $W(\omega)$, показанному на этом рисунке. При этом главный лепесток уширился незначительно. Значение ENBW для w^{synt} составило 1,0737, по сравнению с единичным ENBW (1,000) у прямоугольного.

Отметим, что такие же провалы боковых лепестков можно получить и при помощи стандартных окон. Например, удобно сравнить синтезированное окно с окном Дольфа – Чебышёва, поскольку последнее позволяет задавать произвольный уровень боковых лепестков и боковые лепестки находятся на одном уровне во всей полосе частот. Для получения провалов с уровнем около $3\cdot10^{-8}$, необходимо использовать окно Дольфа – Чебышёва с уровнем боковых лепестков –150дБ (обозначим его как $w^{\text{Cheb-150dB}}$, а его Фурье-образ – $W^{\text{Cheb-150dB}}$), значение ENBW которого равно 1,9814, что в 1,8 раз выше, чем у синтезированного окна $w^{synt}(\omega)$. Также отметим, что алгоритм оптимизации снизил уровень $K/2$ до 58 с начального значения 90, что говорит о правильном выборе последнего.

По набору функций $S(f)$ был рассчитан набор соответствующих зависимостей $V(\omega)$. Далее для каждой $V(\omega)$, с учетом выражения (4), были найдены положения L_{1m} и L_{2m} двух основных максимумов. Их находили путем интерполяции параболой по трем максимальным точкам $|V(\omega)|$ в области пика и определения ее вершины. Аналогичным образом были найдены положения двух основных максимумов $L_{1m}^{\ synt}$ и $L_{2m}^{\ synt}$ для всех $V(\omega)$. Максимумы были пересчитаны по набору STF и умножены на окно w^{synt}. Кроме того, так же были найдены положения максимумов $L_{1m}^{\ \text{Cheb-150dB}}$ и $L_{2m}^{\ \text{Cheb-150dB}}$ для $|V(\omega)|$, путем умножения STF на окно $w^{\text{Cheb-150dB}}$. Результаты представлены на рис. 4.

Графики на рис. 4, *a* и *c* ясно показывают, что методическая погрешность определения L_1 и L_2 с использованием прямоугольного окна имеет ярко выраженный осциллирующий характер. Период быстрых осцилляций связан с изменением L, приводящим к сдвигу фазы гармоники на 2π в последовательности $v(i)$. Период медленных осцилляций определяется смещением системы паразитных боковых лепестков относительно частоты целевого максимума $V(w)$.

Важно, что для выбранного диапазона изменения зазоров с использованием синтезированного окна, осцилляции удалось снизить на пять порядков, что видно при сравнении графиков на рис. 4, *a* и *b*, а также на рис. 4, *c* и *d*.

С использованием окна $w^{\text{Cheb-150dB}}$ достигается такое же снижение (см. рис. 4, *b* и *d*), но не проявляется недостаток стандартного окна, связанный с влиянием роста значения

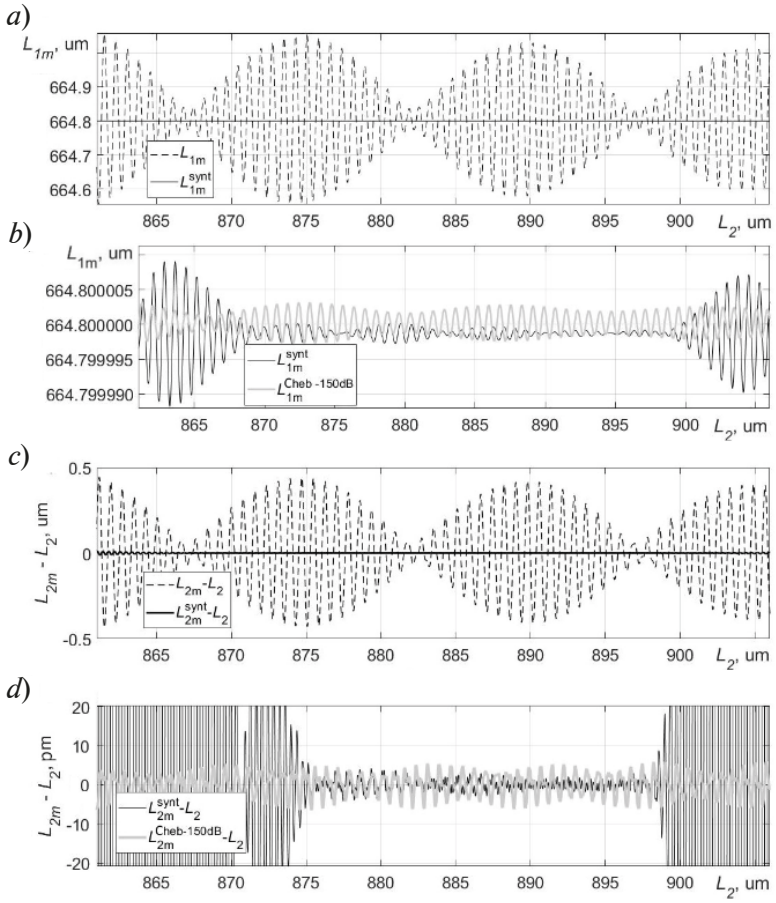


Рис. 4. Результаты определения позиций основных максимумов в зависимости от заданного значения L_2: L_{1m} и L_{1m}^{synt} (*a*), L_{1m}^{synt} и $L_{1m}^{\text{Cheb-150dB}}$ (*b*), $L_{2m} - L_2$ и $L_{2m}^{synt} - L_2$ (*c*), $L_{2m}^{synt} - L_2$ и $L_{1m}^{\text{Cheb-150dB}} - L_2$ (*d*)

ENBW, поскольку в данном моделировании не были введены шумы.

Экспериментальная демонстрация предложенного подхода

Для проверки предложенного подхода был проведен эксперимент с использованием схемы, рассмотренной выше (см. рис. 1). Каждый EFFPI формировали с применением двух патчкордов с волокном SMF-28, оконцованных вилками APC-типа (скошенные) с одной стороны и вилками UPC-типа (прямые) с другой. Прямые торцы патчкордов сводили с зазором в стандартной соединительной розетке. Таким образом, коэффициенты отражений на границе кварц/воздух составляли $R \approx 3{,}5$ %. Один из пачткордов подключали к разветвителю 50:50, а другой оставляли свободным, при этом паразитные отражения света от этого конца патчкорда были пренебрежимо малы (благодаря скошенному торцу). Первый порт разветвителя подключали к опросному устройству – оптическому интеррогатору NI-PXIe-4844, который позволял регистрировать STF в диапазоне 1510 – 1590 нм с равномерным шагом 4 пм по длине волны. Внешний вид экспериментальной установки представлен на рис. 5,*a*.

В ходе эксперимента значение зазора первого EFFPI было установлено равным примерно $L_1 = 664{,}8$ мкм, и далее его оставляли без изменения. Величину зазора второго EFFPI медленно уменьшали от 906 до 861 мкм. Зарегистрированные STF затем интерполировали из равномерной шкалы длин волн в равномерную шкалу оптических частот с диапазоном $\Delta f = 9{,}99$ ТГц, центром диапазона $f_0 = 193{,}54$ ТГц, шагом по частоте $\Delta = 5$ ГГц и количеством отсчетов $N = 2000$. На рис. 5, *b* представлен пример полученной $S(f)$ для значений $L_1 \approx 664{,}8$ мкм и $L_2 \approx 906$ мкм. По полученным отсчетам STF находили среднее значение, затем последовательность центрировали и далее находили ее Фурье-образ $V(\omega)$ посредством DTF. На рис. 5,*c* представлен пример полученной функции $|V(\omega)|$ для тех же значений L_1 и L_2.

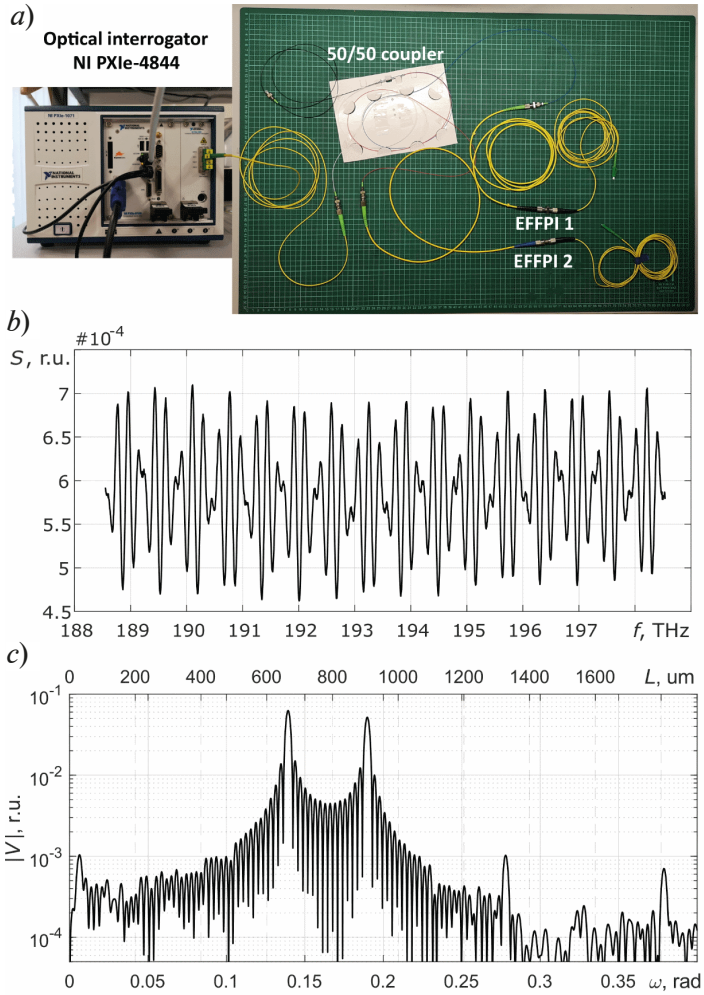


Рис. 5. Фотография экспериментальной установки (*a*) и примеры полученных экспериментальных данных: зависимости $S(f)$ (*b*) и $|V(\omega)|$ (*c*) для значений $L_1 \approx 664{,}8$ мкм и $L_2 \approx 906$ мкм

По каждой зависимости $V(\omega)$ были найдены положения L_{1m} и L_{2m} двух основных максимумов $|V(\omega)|$. Также определяли функцию $V(\omega)$ для STF, умноженных на синтезированное окно w^{synt} (такое же, как при моделировании), и находили позиции двух основных максимумов L_{1m}^{synt} и L_{2m}^{synt}. Результаты расчетов представлены на рис. 6, *a* и *b*.

На рис. 6, *a* видно, что величина L_{2m} снижается от одной STF к другой; неравномерность изменения L_{2m} связана с тем, что зазор L_2 уменьшали вручную. С этим уменьшением, как и предсказывали результаты моделирования, наблюдается осциллирующая ошибка при нахождении значения L_{1m}, что хорошо видно на рис. 6, *b*. Использование синтезированного окна позволило практически подавить осциллирующую ошибку, что следует из характера кривой L_{1m}^{synt} на том же рисунке. Также подавление осциллирующей ошибки отчетливо видно и при сравнении кривых L_{2m} и L_{2m}^{synt} (см. вставку на рис. 6, *a*).

В отличие от результатов моделирования, в эксперименте наблюдаются шумы, что позволяет продемонстрировать преимущество использования синтезированного окна перед применением стандартных окон.

Проанализируем полученные результаты подавления методической погрешности при наличии погрешности, вызванной шумами. Как уже отмечалось ранее, преимуществом синтезируемого окна является незначительный рост значения ENBW, по сравнению со стандартными окнами. Анализ был проведен для найденных значений L_{1m}. В случае использования прямоугольного окна среднеквадратичное отклонение (СКО, англ. Root-Mean Square error (RMS error)) значений L_{1m} при изменении L_2 (т. е. при наличии осцилляций из-за методической погрешности) составило $\sigma L_{1m} = 121$ нм. В случае применения синтезированного окна RMS error значений L_{1m}^{synt} составило $\sigma_{L1msynt} = 9$ нм. Таким обра-

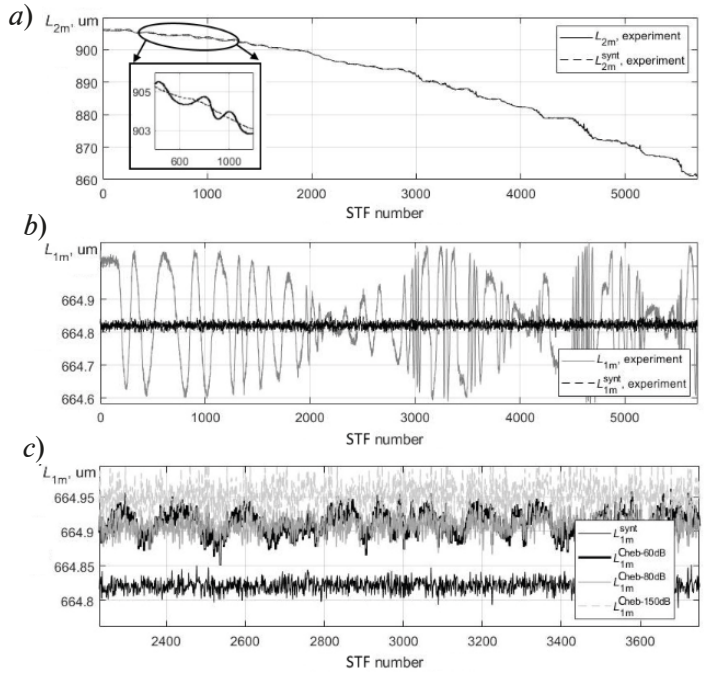


Рис. 6. Результаты обработки экспериментальных зависимостей от номера STF: позиции основных максимумов L_{2m} и L_{2m}^{synt} (*a*), L_{1m} и L_{1m}^{synt} (*b*), L_{1m}^{synt}, $L_{1m}^{\text{Cheb-60dB}}$, $L_{1m}^{\text{Cheb-80dB}}$, $L_{1m}^{\text{Cheb-150dB}}$ (*c*)

зом, RMS error найденных значений L_{1m} в условиях изменения L_2 снизилось в 13 раз и стало определяться преимущественно шумами измерительной аппаратуры.

Для участка, где значение L_2 оставалось неизменным (первые 100 зарегистрированных STF), существует возможность оценить только шумовую погрешность. В этом случае мы получаем значения $\sigma_{L1m_noise} = 8{,}2$ нм и $\sigma_{L1msynt} = 8{,}7$ нм, т. е. приращение шума оказывается незначительным (всего в 1,06 раз). Напомним, что значение ENBW у синтезированного окна в 1,07 раз выше, чем у прямоугольного. Эти результаты сведены в таблице.

Таблица

Сравнение результатов нахождения погрешности при наличии погрешности, вызванной шумами

Окно (весовая функция)	σ_{L1m}, нм	Значение ENBW
Прямоугольное	8,3 (только шум)	1,0000
	121	
Синтезированное	9,0	1,0737
Дольфа – Чебышёва:		
–60 дБ	17,0	1,5180
–70 дБ	13,4	1,6336
–80 дБ	14,0	1,7432
–90 дБ	15,0	1,8445
–100 дБ	16,1	1,9414

Помимо представленного анализа, сравним эффективность подхода, использующего синтезированное окно, со стандартным на примере окна Дольфа – Чебышёва. С этой целью мы дополнительно определили значения L_{1m}^{Cheb}, применяя окна Дольфа – Чебышёва с разным уровнем боковых лепестков (три таких зависимости показаны на рис. 6, *c*). На указанном графике видно, что на уровне –60 дБ методическая погрешность превалирует над шумовой, на уровне –80 дБ она становится менее заметной на фоне увеличившейся шумовой погрешности, а на уровне –150 дБ она не проявляется вовсе. Результаты этого анализа величины L_{1m}^{Cheb} также представлены в таблице. Полученные данные показывают, что минимальное значение RMS error (σ_{L1m}) среди найденных L_{1m}^{Cheb} наблюдается для уровня –70 дБ и составляет $\sigma_{L1m\text{Cheb}} = 13{,}4$ нм. Этот уровень отражает компромисс между методической и шумовой погрешностями. Отметим, что в данном конкретном случае применение синтезированного окна показало среднеквадратичные отклонения для проведенного измерения в 1,49 раз лучшие, чем со стандартным окном Дольфа – Чебышёва на уровне –70 дБ. Отметим, что и значение ENBW синтезированного окна оказалось меньше в 1,52 раза.

На рис. 6 видно, что экспериментально найденные значения L имеют различное постоянное смещение при использовании разных окон, чего не наблюдалось при численном моделировании и что, вообще говоря, является фактором постоянной ошибки демодуляции. Различие может быть связано с тем, что шум, присутствующий в регистрируемых STF, – не белый, либо с тем, что в сигнале могут присутствовать и оказывать некое влияние дополнительные паразитные гармоники, например, от паразитных интерферометров в волоконно-оптическом тракте. Однако поиск причин данного эффекта требует отдельного изучения и выходит за рамки настоящего исследования.

Заключение

Проведен анализ проблем демодуляции сигнала интерферометрических волоконно-оптическим систем с мультиплексированными чувствительными интерферометрами при спектральном опросе, когда регистрируемая STF обрабатывается посредством DTF. Как при помощи моделирования, так и экспериментально продемонстрировано наличие значительной методической погрешности измерения частот гармонических компонент STF. Для снижения методической погрешности без существенного увеличения шумовой погрешности предложено использовать специально синтезированное весовое окно. Численно и экспериментально на конкретном примере показана эффективность предлагаемого подхода, по сравнению с применением стандартного окна Дольфа – Чебышёва. Предложенная процедура может использоваться в любых задачах, связанных с оценкой частот и фаз полигармонических сигналов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Волоконно-оптические датчики. Вводный курс для инженеров и научных работников. Под ред. Э. Удда. Пер. с англ. М.: Техносфера, 2008. 520 с.

2. **Лиокумович Л. Б.** Волоконно-оптические интерферометрические измерения. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2007. 110 с.

3. **Ushakov N., Liokumovich L.** Resolution limits of extrinsic Fabry – Perot interferometric displacement sensors utilizing wavelength scanning interrogation // Applied Optics. 2014. Vol. 53. No. 23. Pp. 5092–5099.

4. **Ushakov N. A., Liokumovich L. B.** Multiplexed extrinsic fiber Fabry – Perot interferometric sensors: resolution limits // Journal of Lightwave Technology. 2015. Vol. 33. No. 9. Pp. 1683–1690.

5. **Ushakov N. A., Markvart A. A., Liokumovich L. B.** Pulse wave velocity measurement with multiplexed fiber optic Fabry – Pérot interferometric sensors // IEEE Sensors Journal. 2020. Vol. 20. No. 19. Pp. 11302–11312.

6. **Оппенгейм А., Шафер Р.** Цифровая обработка сигналов. 3-е изд. Пер. с англ. М.: Техносфера, 2007. 1048 с.

7. **Дворкович В. П., Дворкович А. В.** Оконные функции для гармонического анализа сигналов. 2-е изд. М.: Техносфера, 2016. 217 с.

8. **Баранов И. В., Езерский В. В.** Минимизация погрешности измерения расстояния при цифровой обработке сигналов частотных дальномеров промышленного применения // Вестник Рязанского государственного радиотехнического университета. 2008. № 24. С. 55–60.

9. **Давыдочкин В. М.** Весовые функции и алгоритмы для повышения точности оценки частоты и амплитуды выборки гармонического сигнала на фоне сигналоподобных помех. Автореф. дис. канд. техн. наук. Рязань: Академия права и управления ФСИН, 2008. 16 с.

10. **Давыдочкин В. М., Давыдочкина С. В.** Весовые функции для цифрового адаптивного гармонического анализа сигналов с многомодовым спектром // Радиотехника. 2009. № 9. С. 11–20.

11. **Маркварт А. А., Лиокумович Л. Б., Ушаков Н. А.** Соотношение Рао – Крамера для оценки разрешающей способности измерений с волоконно-оптическим интерферометром Фабри – Перо произвольной добротности // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2021. Т. 14. № 4. С. 172–189.

12. **Зелкин Е. Г., Соколов В. Г.** Методы синтеза антенн: фазированные антенные решетки и антенны с непрерывным раскрывом. М.: Советское радио, 1980. 294 с.

13. **Mangoud M. A.-A., Elragal H. M.** Antenna array pattern synthesis and wide null control using enhanced particle swarm optimization // Progress in Electromagnetics Research B. 2009. Vol. 17. Pp. 1–14.

14. **Вендик О. Г., Калинин С. А., Козлов Д. С.** Фазированная антенная решетка с управляемой формой диаграммы направленности // Журнал технической физики. 2013. Т. 83. № 10. С. 117–121.

15. **Козлов Д. С.** Интерференционное формирование диаграммы направленности фазированной антенной решетки с подавлением излучения в заданном направлении с учетом взаимного влияния излучателей. Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. СПб: ЛЭТИ, 2016. 16 с.

16. **Маркварт А. А., Ушаков Н. А., Лиокумович Л. Б.** Применение синтеза весовых окон в дискретном преобразовании Фурье для снижения ошибок демодуляции сигналов мультиплексированных волоконно-оптических датчиков // Сборник трудов 24-й Международной конференции «Цифровая обработка сигналов и ее применение» (DSPA-2022). Вып. 24. М.: Изд-во РНТОРЭС имени А. С. Попова, 2022. С. 177–182.

17. **Sivanandam S. N., Deepa S. N.** Introduction to genetic algorithms. Berlin, Heidelberg: Springer, 2008. 442 p.

18. MathWorks Help Center. Genetic Algorithm. Режим доступа: https://www.mathworks.com/help/gads/genetic-algorithm.html (Дата обращения: 01.06.2022).

REFERENCES

1. **Udd E., Spillman. Jr. W. B.** (Eds.), Fiber optic sensors: An introduction for engineers and scientists, 2nd ed., John Wiley & Sons Inc., New York, 2011.

2. **Liokumovich L. B.,** Volokonno-opticheskiye interferometricheskiye izmereniya [Fiber optic interferometric measurements], Polytech. University Press, St. Petersburg, 2007 (in Russian).

3. **Ushakov N., Liokumovich L.** Resolution limits of extrinsic Fabry – Perot interferometric displacement sensors utilizing wavelength scanning interrogation // Appl. Optics. 53 (23) (2014) 5092–5099.

4. **Ushakov N. A., Liokumovich L. B.,** Multiplexed extrinsic fiber Fabry –Pérot interferometric sensors: resolution limits, J. Lightwave Technol. 33 (9) (2015) 1683–1690.

5. **Ushakov N. A., Markvart A. A., Liokumovich L. B.,** Pulse wave velocity measurement with multiplexed fiber optic Fabry – Pérot interferometric sensors, IEEE Sens. J. 20 (19) (2020) 11302–11312.

6. **Oppenheim A. V., Schafer R. W.,** Discrete-time signal processing, 2nd ed., Pearson Education, London, 2007.

7. **Dvorkovich V. P., Dvorkovich A. V.,** Okonnyye funktsii dlya garmonicheskogo analiza signalov [Window functions for harmonic signal analysis, 2nd ed.], Tekhnosfera Publishing, Moscow, 2016 (in Russian).

8. **Baranov I. V., Ezerski V. V.,** Minimization to inaccuracy of the measurement of the distance under digital processing signal in FM radar for industrial application], Bulletin of Ryazan State Radioengineering University. (24) (2008) 55–60.

9. **Davydochkin V. M.,** Vesovyye funktsii i algoritmy dlya povysheniya tochnosti otsenki chastoty i amplitudy vyborki garmonicheskogo signala na fone signalopodobnykh pomekh, Avtoref. dis. kand. tekhn. nauk [Weighting functions and algorithms for improving the accuracy of estimating the frequency and amplitude of a harmonic signal sample against the background of signal-like noise], Synopsis of Thesis for Cand. Techn. Sci., Ryazan, 2008.

10. **Davydochkin V. M., Davydochkina S. V.,** Window functions for the digitial adaptive harmonic analysis of the signals with the miltimodal spectrum, J. Radioengineering. (9) (2009) 11–20 (in Russian).

11. **Markvart A. A., Liokumovich L. B., Ushakov N. A.,** Estimating the measurement resolution of an arbitrary finesse fiber-optic Fabry – Perot interferometer via Cramer – Rao bound, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 14 (4) (2021) 172–189.

12. **Zelkin E. G., Sokolov V. G.,** Metody sinteza antenn: Fazirovannyye antennyye reshetki i antenny s nepreryvnym raskryvom [Antenna synthesis methods: Phased antenna array and antennas with continuous aperture], Sovetskoye Radio Publishing, Moscow, 1980 (in Russian).

13. **Mangoud M. A.-A., Elragal H. M.,** Antenna array pattern synthesis and wide null control using enhanced particle swarm optimization, Progr. Electromagn. Res. B. 17 (2009) 1–14.

14. **Vendik O. G., Kalinin S. A., Kozlov D. S.,** Phased array with controlled directivity pattern, Techn. Phys. 58 (10) (2013) 1507–1511.

15. **Kozlov D. S.,** Interferentsionnoye formirovaniye diagrammy napravlennosti fazirovannoy antennoy reshetki s podavleniyem izlucheniya v zadannom napravlenii s uchetom vzaimnogo vliyaniya izluchateley. Avtoref. dis. kand. fiz.-mat. nauk [Interference beamforming of a phased antenna array with suppression of radiation in a given direction, taking into account the mutual influence of emitters], Synopsis of Thesis for Cand. Phys.-Math. Sci., St. Petersburg, 2016.

16. **Markvart A. A., Ushakov N. A., Liokumovich L. B.,** Application of weight window synthesis in a discrete Fourier transform to reduce demodulation errors of signals of multiplexed fiber-optic sensors, In book: Proc. 24-th Int. Conf. "Digital Signal Processing and its Applications" (DSPA-2022), Publ. by A. S. Popov Russian Scientific and Technical Society of Radio Engineering, Electronics and Communications Press. (24) (2022) 177–182.

17. **Sivanandam S. N., Deepa S. N.,** Introduction to genetic algorithms, Berlin, Heidelberg, Springer, 2008.

18. MathWorks Help Center. Genetic Algorithm, https://www.mathworks. com/help/gads/genetic-algorithm.html, Accessed June 01, 2022.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МАРКВАРТ Александр Александрович – *ассистент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
markvart_aa@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-8080-0830

ЛИОКУМОВИЧ Леонид Борисович – *доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
leonid@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5988-1429

УШАКОВ Николай Александрович – *кандидат физико-математических наук, доцент Высшей школы прикладной физики и космических технологий Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
n.ushakoff@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3480-2779

THE AUTHORS

MARKVART Aleksandr A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
markvart_aa@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-8080-0830

LIOKUMOVICH Leonid B.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
leonid@spbstu.ru
ORCID: 0000-0001-5988-1429

USHAKOV Nikolai A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
n.ushakoff@spbstu.ru
ORCID: 0000-0002-3480-2779

Статья поступила в редакцию 20.06.2022. Одобрена после рецензирования 16.08.2022. Принята 16.08.2022.
Received 20.06.2022. Approved after reviewing 16.08.2022. Accepted 16.08.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Механика

Научная статья
УДК 539.3
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15315

ФУНКЦИОНАЛЬНО-ГРАДИЕНТНЫЙ КЛИН, ОСЛАБЛЕННЫЙ ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ТРЕЩИНОЙ

В. В. Тихомиров ✉

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,

Санкт-Петербург, Россия

✉ victikh@mail.ru

Аннотация. Рассматривается задача о полубесконечной антиплоской интерфейсной трещине, находящейся между двумя функционально-градиентными клиновидными областями. Модули сдвига материалов областей являются квадратичными функциями полярного угла. Такой вид функциональной неоднородности позволяет выразить все компоненты упругого поля через одну гармоническую функцию. С помощью интегрального преобразования Меллина проблема сведена к скалярному уравнению Винера – Хопфа, для которого получено точное решение. Изучено влияние градиентов упругих свойств материалов на коэффициент интенсивности напряжений в вершине трещины и показатель сингулярности в угловой точке структуры.

Ключевые слова: функционально-градиентный клин, антиплоская интерфейсная трещина, сингулярность напряжений

Для цитирования: Тихомиров В. В. Функционально-градиентный клин, ослабленный полубесконечной трещиной // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2022. Т. 15. № 3. С. 201–213. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15315

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

Original article
DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15315

FUNCTIONALLY GRADED WEDGE WEAKENED BY A SEMI-INFINITE CRACK

V. V. Tikhomirov ✉

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russia

✉ victikh@mail.ru

Abstract. In the paper, the problem of a semi-infinite antiplane interface crack located between two functionally graded wedge-shaped regions has been considered. The shear modules of the materials' regions are quadratic functions of the polar angle. This kind of functional inhomogeneity made it possible to express all the components of the elastic field through a single harmonic function. Using the Mellin integral transform, the problem was reduced to the Wiener – Hopf scalar equation, for which an exact solution was obtained. The influence of gradients of elastic properties of materials on the stress intensity coefficient at the crack tip and the singularity value at the angular point of the structure was studied.

Keywords: functionally graded wedge, antiplane interface crack, stress singularity

© Тихомиров В. В., 2022. Издатель: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого.

For citation: Tikhomirov V. V., Functionally graded wedge weakened by a semi-infinite crack, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 15 (3) (2022) 201–213. DOI: https://doi.org/10.18721/JPM.15315

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

Введение

Функционально-градиентные материалы (ФГМ) представляют собой композиты, механические и физические свойства которых отражают характеристики их пространственно изменяющейся микроструктуры [1, 2]. Концепция ФГМ появилась в 1980-х годах в Японии, и с тех пор они находят широкое применение в аэрокосмической и ядерной отраслях промышленности, электронике, оптоэлектронике, строительстве и других областях как материалы для преобразования энергии и как биоматериалы [3]. При моделировании ФГМ рассматривают как неоднородные материалы, принимая изменение их свойств непрерывным, и при этом вообще не учитывают их микроструктуру.

Анализ сингулярности полей напряжений в таких материалах является одной из фундаментальных проблем линейной механики разрушения [4]. Вследствие градиента упругих свойств классическая природа сингулярности напряжений (корневая в случае трещин и простая степенная в случае острых вырезов) в ФГМ может модифицироваться [5, 6].

Исследованию разрушения ФГМ посвящено большое число работ в плоской и антиплоской постановках. Ограничиваясь только антиплоскими задачами, отметим, что одной из первых работ этого направления была статья [7], где было показано, что скачок производной модуля сдвига (при сохранении его непрерывности) не оказывает влияния на показатель сингулярности напряжений в вершине трещины.

Сингулярные поля в слоистых структурах с функционально-градиентными элементами, имеющих дефекты типа трещин, ориентированных вдоль или перпендикулярно градиенту модуля сдвига, рассматривались в работах [8 – 11]. Напряженно-деформированное состояние клиновидных областей с градиентными свойствами, включая многоматериальные клинья и острые вырезы, исследовались в статьях [5, 6, 12 – 14].

В аналитических моделях зависимость модуля сдвига ФГМ от координат выбирают из класса функций, для которых уравнения равновесия имеют аналитические решения. Как правило, для модуля сдвига используют линейную или экспоненциальную зависимость. При произвольном изменении упругого модуля можно применять кусочно-линейную и кусочно-экспоненциальную модели [15, 16]. В работе [13] для градиентного материала нами была предложена квадратичная зависимость модуля сдвига от полярного угла, которая в условиях антиплоской задачи позволяет выразить все компоненты упругого поля через одну гармоническую функцию. Данный подход был использован для анализа сингулярности в вершине многоматериального клина [14].

В настоящей работе на основе результатов статьи [13] исследовано напряженное состояние составного клина с градиентными свойствами, изменяющимися квадратичным образом в трансверсальном направлении, ослабленного полубесконечной антиплоской трещиной. Проанализированы эффекты увеличения и уменьшения коэффициента интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины, а также изменения показателя сингулярности в угловой точке клина, по сравнению с однородной структурой, вызванные наличием градиентов упругих свойств материалов.

Постановка задачи

Рассмотрим полубесконечную интерфейсную трещину моды III, расположенную между двумя клиновидными областями Ω_1 и Ω_2 с углами α_1 и α_2 (рис. 1):

$$\Omega_1 = \{(r,\theta): 0 < r < \infty, 0 < \theta < \alpha_1\},\ \Omega_2 = \{(r,\theta): 0 < r < \infty, -\alpha_2 < \theta < 0\},$$

где r, θ – полярные координаты.

© Tikhomirov V. V., 2022. Published by Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University.

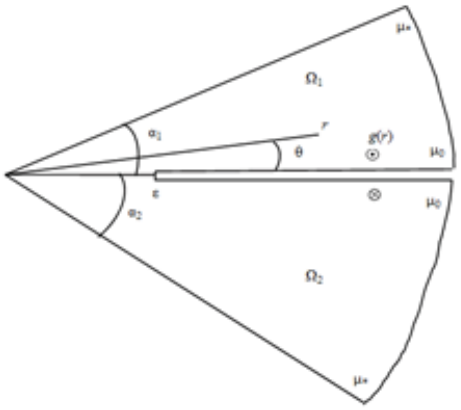


Рис. 1. Функционально-градиентный клин с полубесконечной интерфейсной трещиной продольного сдвига:

μ_1, μ_2 – модули сдвига на границах областей Ω_1 и Ω_2 с градиентными материалами; α_1, α_2, θ, r, ε – геометрические параметры; $g(r)$ – самоуравновешенная нагрузка, приложенная к берегам трещины

Материалы в этих областях будем считать функционально-градиентными, модули сдвига которых μ_1 и μ_2 являются функциями полярного угла. При этом функциональные зависимости $\mu_k(\theta)$ ($k = 1, 2$) таковы, что на луче $\theta = 0$ модули упругости одинаковы и равны μ_0, а на границах $\theta = \alpha_1$ и $\theta = -\alpha_2$ принимают значения μ_*.

Будем считать, что вершина трещины находится на расстоянии ε от вершины композитного клина. К берегам трещины приложена самоуравновешенная нагрузка $g(r)$. Контакт материалов вне трещины предполагается идеальным.

В областях Ω_k с модулями сдвига, изменяющимися в трансверсальном направлении, уравнения равновесия имеют вид

$$\frac{\partial^2 w_k}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 w_k}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial w_k}{\partial r} + \frac{1}{\mu_k(\theta) r^2}\frac{d\mu_k}{d\theta}\frac{\partial w_k}{\partial \theta} = 0, \tag{1}$$

а напряжения выражаются через перемещения $\tilde{w}_k$ по следующим формулам:

$$\tau_{\theta z k} = \frac{\mu_k}{r}\frac{\partial w_k}{\partial \theta}, \quad \tau_{rzk} = \mu_k \frac{\partial w_k}{\partial r} \ (k = 1, 2). \tag{2}$$

Рассмотрим квадратичный тип функциональной зависимости модуля сдвига ФГМ от полярного угла, предложенный и апробированный в работе [12]:

$$\mu_k(\theta) = (a_k \theta + b_k)^2, \tag{3}$$

где коэффициенты в данном случае имеют вид

$$a_k = \left(\sqrt{\mu_*} - \sqrt{\mu_0}\right)/\alpha_k, \ b_1 = -b_2 = \sqrt{\mu_0}.$$

Таким образом, на интерфейсе $\theta = 0$ модуль сдвига композита является непрерывным, а его производная по углу θ имеет разрыв.

Разыскивая перемещения в областях Ω_k в виде

$$w_k(r, \theta) = \frac{1}{a_k \theta + b_k}\tilde{w}_k(r, \theta), \tag{4}$$

из уравнений (1) получим, что функции $\tilde{w}_k(r, \theta)$ являются гармоническими:

$$\frac{\partial^2 \tilde{w}_k}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \tilde{w}_k}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \tilde{w}_k}{\partial r} = 0. \tag{5}$$

Используя формулы (2), приходим к следующим представлениям для напряжений:

$$\tau_{\theta zk} = -\frac{a_k}{r}\tilde{w}_k(r,\theta) + \frac{a_k\theta + b_k}{r}\frac{\partial \tilde{w}_k}{\partial \theta}, \qquad (6)$$

$$\tau_{rzk} = (a_k\theta + b_k)\frac{\partial \tilde{w}_k}{\partial r}.$$

Решения уравнений (1) на интерфейсе $\theta = 0$ должны удовлетворять смешанным условиям

$$\tau_{\theta z1}(r,+0) = \tau_{\theta z2}(r,-0),\ \ w_1(r,+0) = w_2(r,-0)\ \ (0 \le r \le 1), \qquad (7)$$

$$\tilde{\tau}_{\theta z1}(r,+0) = \tilde{\tau}_{\theta z2}(r,-0) = g(r)\ \ (1 \le r < \infty),$$

а также граничным условиям на гранях клина

$$\tau_{\theta z1}(r,\alpha_1) = 0,\ \ \tau_{\theta z1}(r,-\alpha_2) = 0,\ \ (0 \le r < \infty). \qquad (8)$$

Сведение задачи к уравнению Винера – Хопфа и его решение

Решение задачи (1) – (8) в областях Ω_k ищем в виде интегралов Меллина:

$$w_k(r,\theta) = \frac{1}{2\pi i}\int_L W_k(p,\theta) r^{-p}dp\ \ (k = 1,\ 2), \qquad (9)$$

$$W_k(p,\theta) = [A_k(p)\sin p\theta + B_k(p)\cos p\theta]/(a_k\theta + b_k).$$

Согласно формулам (6), напряжения определяются выражениями

$$\tau_{\theta zjk}(r,\theta) = \frac{1}{2\pi i}\int_L T_{\theta zjk}(p,\theta) r^{-p-1}dp, \qquad (10)$$

$$T_{\theta zjk}(p,\theta) = -a_k\left[A_k(p)\sin p\theta + B_k(p)\cos p\theta\right] + (a_k\theta + b_k)\,p\left[A_k(p)\cos p\theta - B_k(p)\sin p\theta\right].$$

В соответствии с условиями регулярности, контур интегрирования L расположен параллельно мнимой оси в полосе

$$-\delta_1 < \mathrm{Re}\, p < \delta_2\ (\delta_1, \delta_2 > 0).$$

Величины $A_k(p)$ и $B_k(p)$ находятся из граничных условий (7) и (8).

Следуя схеме, реализованной в работе [17], приходим к неоднородному уравнению Винера – Хопфа:

$$F(p)\left[T_+(p) + G_-(p)\right] + \mu_0\varepsilon^{-1}W_-(p) = 0\ \ (p \in L), \qquad (11)$$

где

$$T_+(p) = \int_0^1 \tau_{\theta z1}(\varepsilon\rho,+0)\rho^p d\rho,\ \ G_-(p) = \int_1^\infty g(\varepsilon\rho)\rho^p d\rho,$$

$$W_-(p) = \int_1^\infty \frac{\partial}{\partial\rho}\left[w_1(\varepsilon\rho,+0) - w_2(\varepsilon\rho,-0)\right]\rho^p d\rho.$$

Функции $G_-(p)$ и $W_-(p)$ регулярны и не имеют нулей в левой от контура L полуплоскости Ω_-, а $T_+(p)$ – в правой полуплоскости Ω_+ [18]. В качестве контура L можно выбрать мнимую ось.

Коэффициент уравнения (11) имеет вид

$$F(p)=\operatorname{ctg}(\alpha_1 p)\frac{v(\alpha_1 p)}{u(\alpha_1 p)}+\operatorname{ctg}(\alpha_2 p)\frac{v(\alpha_2 p)}{u(\alpha_2 p)}, \tag{12}$$

где

$$u(x)=1+m^{-1}(m-1)^2 x^{-2}[1-x\operatorname{ctg}(x)], \tag{13}$$
$$v(x)=1+(m-1)x^{-1}\operatorname{tg}(x),\ m=\sqrt{\mu_0/\mu_*}.$$

Параметр m характеризует относительную сдвиговую жесткость материала на линии трещины по отношению к материалу на сторонах клина. При $0 < m < 1$ трещина будет находиться в области локально мягкого материала композита, а при $1 < m < \infty$ – в области локально жесткого материала. Случай $m = 1$ отвечает однородному материалу в областях Ω_k. При этом из формул (12) и (13) для коэффициента задачи (11) получается выражение, приведенное в работе [17].

С целью факторизации функции (12), представим ее в следующей форме:

$$F(p)=\frac{2}{p}K(p), \tag{14}$$
$$K(p)=X(p)\Phi(p),\ X(p)=p\operatorname{ctg}(\alpha_1 p),$$
$$\Phi(p)=\frac{1}{2}F_1(p)F_2(p),\ F_1(p)=\frac{v(\alpha_1 p)}{u(\alpha_1 p)},$$
$$F_2(p)=1+\operatorname{tg}(\alpha_1 p)\operatorname{ctg}(\alpha_2 p)\frac{u(\alpha_1 p)v(\alpha_2 p)}{u(\alpha_2 p)v(\alpha_1 p)}.$$

Заметим, что при $\alpha_1 = \alpha_2$ функция $F_2(p) = 2$, а в случае однородной среды функция $F_1(p) = 1$.

Факторизация функции $X(p)$ осуществляется элементарно [18]:

$$X(p)=X_+(p)X_-^{-1}(p), \tag{15}$$
$$X_+(p)=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha_1}}\frac{\Gamma(1+p\alpha_1/\pi)}{\Gamma(1/2+p\alpha_1/\pi)},$$
$$X_-(p)=\sqrt{\frac{\alpha_1}{\pi}}\frac{\Gamma(1/2-\alpha_1 p/\pi)}{\Gamma(1-\alpha_1 p/\pi)}.$$

На мнимой оси функции, при $p = it$, функция $\Phi(it)$ непрерывна, не имеет нулей и полюсов, ее индекс равен нулю и при $t \to \infty$ экспоненциально стремится к единице. Поэтому, в соответствии с данными работы [18],

$$\Phi(p)=\frac{\Phi_+(p)}{\Phi_-(p)},\ \Phi_\pm(p)=\exp\left[-\frac{1}{2\pi i}\int_L\frac{\ln\Phi(t)}{t-p}dt\right]\ (p\notin L). \tag{16}$$

С учетом четности функции $\Phi(p)$ аналитические функции (16) в областях Ω_+ и Ω_- могут быть представлены в форме

$$\Phi_\pm(p)=\exp\left[\frac{p}{\pi}\int_0^\infty\frac{\ln\Phi(i\xi)}{\xi^2+p^2}d\xi\right].$$

В результате использования формул (14) – (16), перегруппировки слагаемых в уравнении (11) и применения теоремы Лиувилля [18], получаем:

$$\Phi_+(p)X_+(p)T_+(p)+Q_+(p)=-\frac{\mu_1 p}{2\varepsilon}W_-(p)\Phi_-(p)X_-(p)-Q_-(p)=J(p), \tag{17}$$

где

$$Q_\pm(p)=\mp\frac{1}{2\pi i}\int_L\frac{Q(t)}{t-p}dt,\ \ Q(t)=\frac{t}{2}\Phi_-(t)X_-(t)F(t)G_-(t). \tag{18}$$

Если оценить члены в равенстве (16) при $p\to\infty$, то можно заключить, что единая аналитическая функция $J(p)=const=C$. Эту постоянную определим из уравнения (17) при значении $p=0$. С учетом формулы (18) находим, что

$$C=C_*G_-(0)-\frac{1}{4\pi i}\int_L\Phi_-(t)X_-(p)F(t)G_-(t)dt, \tag{19}$$

$$C_*=\Phi_+(0)X_+(0)=\sqrt{\frac{3m^2(\alpha_1+\alpha_2)}{2\alpha_1\alpha_2(m^2+m+1)}}.$$

Для вычисления интеграла в формуле (19) воспользуемся теоремой Коши о вычетах. Полюсы подынтегральной функции в левой полуплоскости являются полюсами $F(t)$. Из представления (12) вытекает, что они определяются отрицательными корнями уравнения

$$mx^2\sin x+(m-1)^2(\sin x-x\cos x)=0,$$

расположенными в интервалах

$$-(n+0{,}5)\pi<-x_n<-n\pi\ (n=1,2,\ldots).$$

Существуют две группы полюсов: $t_{nj}=-x_n/\alpha_j$ $(j=1,2)$.

Будем считать, что к берегам трещины приложены сосредоточенные силы величиной T_0 на расстоянии r_0 от вершины клина. В этом случае

$$g(r)=-T_0\delta(r-r_0),$$

где $\delta(r-r_0)$ – дельта-функция Дирака, а

$$G_-(p)=-T_0/\varepsilon(r_0/\varepsilon)^p.$$

В результате из формулы (19) получаем, что

$$C=\frac{T_0}{\varepsilon}\left[C_*+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\alpha_1}{\pi}}\sum_{j=1}^{2}\sum_{n=1}^{\infty}a_{nj}\left(\frac{\varepsilon}{r_0}\right)^{x_n/\alpha_j}\right], \tag{20}$$

где

$$a_{nj}=\frac{1}{\alpha_j}\frac{\Gamma(1/2-\alpha_1 t_{nj}/\pi)}{\Gamma(1-\alpha_1 t_{nj}/\pi)}\Phi_-(t_{nj})b(x_n),$$

$$b(x_n)=\frac{x_n\cos x_n+(m-1)\sin x_n}{x_n\cos x_n+(m+m^{-1})\sin x_n}.$$

Применяя методику, основанную на теореме абелева типа [18] (использована в работе [17]), заключаем, что асимптотика напряжений на линии трещины при $r\to\varepsilon-0$ имеет вид

$$\tau_{\theta z1}(r)\sim C\sqrt{\frac{\varepsilon}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon-r}}. \tag{21}$$

Определим коэффициент интенсивности напряжений (КИН) в вершине трещины формулой

$$K_{\text{III}} = \lim_{r \to \varepsilon - 0} \sqrt{2\pi(\varepsilon - r)}\,\tau_{\theta z1}(r).$$

Тогда, используя асимптотику (21), получаем:

$$K_{\text{III}}(\alpha_1, \alpha_2, m, \varepsilon / r_0) = \sqrt{2\varepsilon}C. \tag{22}$$

С целью выявления эффекта, вносимого градиентом материала, введем в рассмотрение нормированный КИН вида

$$N = K_{\text{III}} / K_{\text{III}}^0,$$

где K_{III}^0 – КИН в вершине трещины, расположенной в однородном клине.

Такой КИН, согласно работе [17], в случае геометрической симметрии, т. е. при $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, имеет вид

$$K_{\text{III}}^0 = T_0 \sqrt{\frac{2}{\alpha\varepsilon}} \frac{r_0^{\pi/(2\alpha)}}{\sqrt{r_0^{\pi/\alpha} - \varepsilon^{\pi/\alpha}}}. \tag{23}$$

Из формул (20) – (23) следует, что при малых расстояниях между вершиной трещины и угловой точкой клина трещина ведет себя нестабильно как в однородной, так и градиентной среде, поскольку $K_{\text{III}} \to \infty$ при $\varepsilon \to 0$.

Зависимость нормированного КИН в вершине трещины, находящейся в составной функционально-градиентной полуплоскости при $\alpha_1 = \alpha_2 = \pi/2$, от относительного расстояния ε/r_0 для различных значений относительной сдвиговой жесткости приведена на рис. 2. В случае $m < 1$ наличие градиента упругих свойств приводит к существенному снижению величины КИН, по сравнению с однородным материалом. При этом уменьшение параметра m приводит к все более заметной разнице в величинах КИН для неоднородного и однородного случаев. Напротив, ужесточение материала на луче $\theta = 0$ ($m > 1$) вызывает возрастание КИН в вершине трещины. Указанные тенденции поведения нормированного КИН имеют место при всех других углах раствора клина (рис. 3).

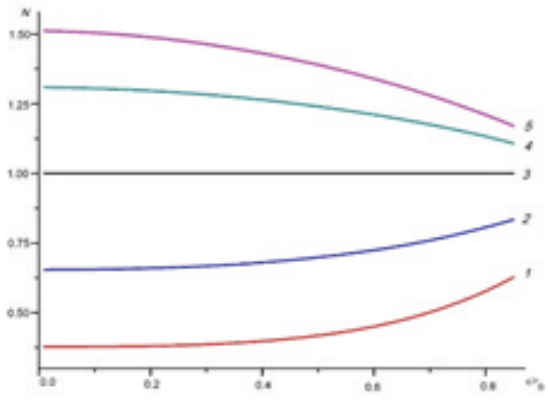


Рис. 2. Зависимости нормализованного КИН в вершине трещины, находящейся в градиентной полуплоскости при $\alpha_1 = \alpha_2 = 90°$, от параметра ε/r_0 для различных значений относительной сдвиговой жесткости m: 0,25 (*1*), 0,50 (*2*), 1,0 (*3*), 2,0 (*4*), 4,0 (*5*)

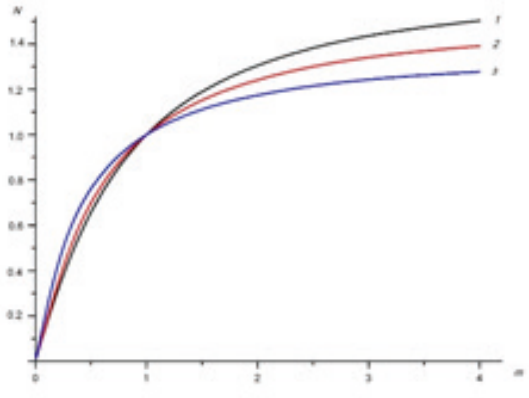


Рис. 3. Зависимости нормализованного КИН в вершине трещины от относительной сдвиговой жесткости m при $\varepsilon/r_0 = 0{,}5$ для различных значений угла $\alpha = \alpha_1 = \alpha_2$: 30° (*1*), 90° (*2*), 180° (*3*)

Сингулярность напряжений в вершине клина

Исследуем поля напряжений в вершине клина при $r \to 0$. На луче $\theta = 0$ касательные напряжения имеют вид

$$\tau_{\theta zj}(r,0) = \frac{1}{2\pi i}\int_L \left[T_+(p) + G_-(p)\right]\left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^{-p-1} dp. \tag{24}$$

Из уравнения (11) и равенств (14), (17) для подынтегральной функции получаем следующее представление:

$$T_+(p) + G_-(p) = \frac{2\left[C + Q_-(p)\right]}{pK_-(p)F(p)}.$$

Исходя из данного представления и используя формулы (12), (13) и (24), для напряжений на отрезке $0 < r < \varepsilon$, при $\theta = 0$, приходим к выражению

$$\tau_{\theta zj}(r,0) = \frac{1}{m\pi i}\int_L Y(p)\frac{u_*(\alpha_1 p)u_*(\alpha_2 p)}{\Delta(p)}\left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^{-p-1} dp, \tag{25}$$

где

$$Y(p) = \frac{C + Q_-(p)}{p^2 X_-(p)\Phi_-(p)},$$

$$u_*(x) = mx^2\sin x + (m-1)^2(\sin x - x\cos x),$$

$$v_*(x) = x\cos x + (m-1)\sin x.$$

Полюсы подынтегральной функции в формуле (25), лежащие в левой от контура L полуплоскости, определяются корнями уравнения

$$\Delta(p) = \alpha_1 u_*(\alpha_2 p)v_*(\alpha_1 p) + \alpha_2 u_*(\alpha_1 p)v_*(\alpha_2 p) = 0. \tag{26}$$

Функция $\Delta(p)$ является целой функцией, имеющей в точке $p = 0$ нуль четвертого порядка. Однако при $m > 0$ эта точка является устранимой особой точкой и в качестве контура L в равенстве (25) может быть взята мнимая ось. В силу четности функции $\Delta(p)$, каждому положительному корню p_k уравнения (26) отвечает отрицательный корень $p_{-k} = -p_k$. Поскольку при замене α_1 на α_2, а α_2 на α_1 эта функция не меняет своего вида, в дальнейшем достаточно рассмотреть случай, когда $\alpha_1 \geq \alpha_2$.

Применяя к интегралу (25) теорему о вычетах в отрицательных полюсах подынтегральной функции, придем к представлению напряжений при $r \to 0$ в виде

$$\tau_{\theta zj}(r,0) = D_1(p_1,\alpha_1,\alpha_2,m)\left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^{\gamma_1} + D_2(p_2,\alpha_1,\alpha_2,m)\left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^{\gamma_2} + \ \ldots\ , \qquad (27)$$

где $\gamma_k = -1 + p_k$ ($k = 1, 2, \ldots$).

Отсюда видно, что напряжения в вершине клина будут сингулярными, если при данных значениях параметров α_1, α_2 и m существуют корни $0 < p_k < 1$.

В случае геометрически симметричной структуры, когда $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, из формул (25) и (26) следует, что числа p_k являются корнями уравнения

$$v_*(x) = x\cos x + (m-1)\sin x = 0 \ (x = \alpha p,\ \alpha \le \pi). \qquad (28)$$

Комплексных корней это уравнение не имеет, и при любом $0 < m < \infty$ существует единственный корень на промежутке $(0, \pi)$, причем $0 < x_1 \le \pi/2$ для $m \le 1$ и $\pi/2 < x_1 < \pi$ для $m > 1$. При уменьшении параметра относительной сдвиговой жесткости m от единицы до нуля первый корень $p_1 = x_1/\alpha$ тоже уменьшается от $\pi/(2\alpha)$ до нуля. С изменением величины m от единицы до бесконечности (т. е. при ужесточении срединной области клина) этот корень возрастает от $\pi/(2\alpha)$ до π/α. Зависимость показателя особенности $\gamma = \gamma_1$ от угла α приведена на рис. 4. Он показывает, что при $m \ge 1$ особенность в вершине клина может быть только слабой ($0 < |\gamma| < 1/2$) и возникает только для углов α, превышающих 90°, как и в однородном материале. С возрастанием параметра m этот показатель, по сравнению с однородным случаем, становится меньше, а диапазон углов, при которых имеет место особенность, сужается. В отличие от однородного случая, в градиентном материале при $m < 1$ половинные углы раствора клина, при которых возникает сингулярность, становятся острыми, а сама сингулярность может быть как слабой, так и сильной ($1/2 < |\gamma| < 1$).

Анализируя общую ситуацию, когда $\alpha_1 > \alpha_2$ и $\alpha_1 + \alpha_2 \le 2\pi$, рассмотрим ряд предельных случаев.

В случае однородного клина ($m = 1$) из формул (25) и (26) следует, что характеристическое уравнение принимает вид $\sin(\alpha_1 + \alpha_2)p = 0$, первый корень которого определяет классическую особенность

$$\gamma_1 = -1 + \pi / (\alpha_1 + \alpha_2),$$

возникающую при условии $\alpha_1 + \alpha_2 > \pi$.

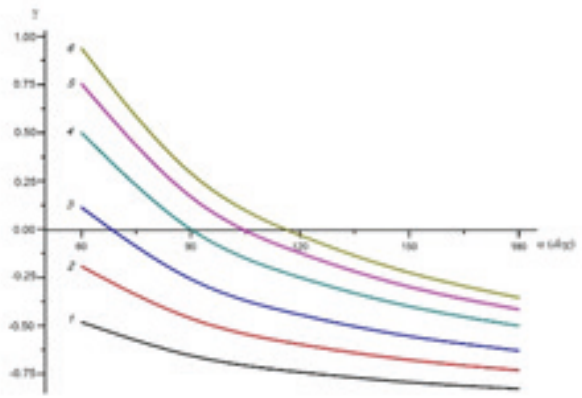


Рис. 4. Зависимости показателя особенности γ в вершине функционально-градиентного клина от угла $\alpha = \alpha_1 = \alpha_2$ для различных значений параметра относительной жесткости m: 0,10 (*1*), 0,25 (*2*), 0,50 (*3*), 1,0 (*4*), 2,0 (*5*), 4,0 (*6*)

При больших значениях параметра m уравнение (26) можно записать в виде

$$\alpha_1 f(\alpha_2 p)\sin\alpha_1 p + \alpha_1 f(\alpha_1 p)\sin\alpha_2 p = 0, \tag{29}$$

$$f(x) = \sin x - x\cos x. \tag{30}$$

Первый положительный нуль x_* функции (30) лежит в интервале $(\pi, 3\pi/2)$, причем $f(x) > 0$ для $0 < x < x_*$ и $f(x) < 0$ для $x_* < x < 2\pi$. Отсюда следует, что при $m >> 1$ и углах $0 < \alpha_2 < \alpha_1 \le \pi$ уравнение (29) на промежутке (0, 1) корней не имеет и, следовательно, сингулярность в угловой точке отсутствует. Для углов $x_* \le \alpha_1 < 2\pi$ и $0 < \alpha_2 < 2\pi - x_*$ ($x_* = 1{,}4302967\pi$) и больших значений m уравнение (29) имеет единственный корень $1/2 < p_1 < 1$, порождающий слабую особенность в угловой точке. Наличие корня $p_1 < 1$ при $\pi < \alpha_1 < x_*$ проверяется численно.

В случае, когда относительная жесткость $m \to 0$, уравнение (26) принимает вид

$$f(\alpha_1 p)\, f(\alpha_2 p) = 0, \tag{31}$$

а функция $u_*(\alpha_1 p)\, u_*(\alpha_2 p) / \Delta(p)$, входящая в интеграл (25), стремится к единице. Однако в действительности малые значения параметра $m = \sqrt{\mu_0/\mu_*}$ должны превышать некую величину $m_* > 0$. Вместе с тем, предельное уравнение (31) показывает, что при достаточно малых m первый корень располагается вблизи нуля. Кроме того, в случае острых вырезов, у которых углы удовлетворяют условиям $x_* \le \alpha_1 < 2\pi$, $0 < \alpha_2 < 2\pi - x_*$ существует еще второй корень уравнения (26), меньший единицы. Например, при $\alpha_1 = 3\pi/2$, $\alpha_2 = \pi/6$ и $m = 0{,}10$ существуют два корня: $p_1 = 0{,}3379652$ и $p_2 = 0{,}9599646$. Асимптотика (27) будет содержать два сингулярных слагаемых. Следует отметить, что сингулярность, порождаемая вторым корнем, является весьма слабой. Как показывает численный анализ, это свойство сохраняется и при других значениях параметров структуры.

Далее рассмотрим более детально два частных случая. Во-первых, случай функционально-градиентной полуплоскости с полубесконечным разрезом, когда $\alpha_1 + \alpha_2 = \pi$ ($\alpha_1 \ge \alpha_2$). Анализ показывает, что при $m \ge 1$сингулярность напряжений отсутствует, а при $m < 1$ асимптотика напряжений в точке $r = 0$ имеет одно сингулярное слагаемое. На рис. 5 показана зависимость величины $\gamma_1 = \gamma$ от параметра относительной сдвиговой жесткости для различных значений углов α_1 и α_2. Видно, что неоднородность материала при $m < 1$ приводит к возникновению на гладкой границе полуплоскости сингулярных напряжений в точке $r = 0$. При этом сингулярность может быть как слабой, так и сильной (для достаточно малых m). Асимметрия расположения трещины вызывает некоторое ослабление сингулярности.

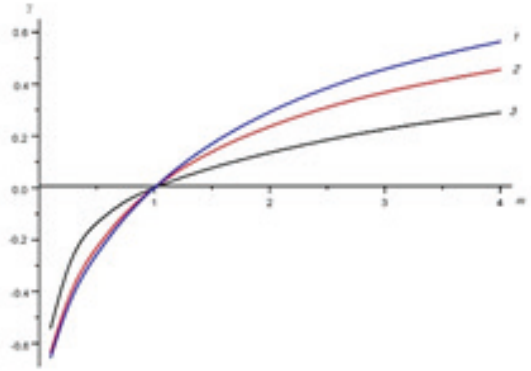


Рис. 5. Зависимости показателя особенности γ в точке $r = 0$ функционально-градиентной полуплоскости от относительной сдвиговой жесткости m для различных значений углов: $\alpha_1 = \alpha_2 = 90°$ (*1*); $\alpha_1 = 120°$, $\alpha_2 = 60°$ (*2*); $\alpha_1 = 150°$, $\alpha_2 = 30°$ (*3*)

В случае функционально-градиентной плоскости с двумя трещинами-разрезами ($\alpha_1 + \alpha_2 = \pi$, $\alpha_1 \geq \alpha_2$) уравнение (26) на промежутке (0, 1) может иметь один или два корня. Например, если трещины коллинеарны ($\alpha_1 = \alpha_2 = \pi$), то на этом промежутке существует только один корень, порождающий сильную сингулярность напряжений в вершине ненагруженной трещины при $m < 1$ и слабую сингулярность при $m > 1$. В случае ортогональных трещин, когда $\alpha_1 = 3\pi/2$, $\alpha_2 = \pi/2$, при $m > 1$ характеристическое уравнение имеет только один корень $1/2 < p_1 < 1$, а при $m < 1$ – два корня: $0 < p_1 < 1/2 < p_2 < 1$. При этом второй весьма близок к единице и определяет слабую сингулярность.

Заключение

В данной работе с помощью метода Винера – Хопфа получено точное решение задачи о равновесии составного функционально-градиентного клина, ослабленного полубесконечной интерфейсной трещиной продольного сдвига, берега которой нагружены самоуравновешенными силами. Предполагалось, что градиентные свойства материалов квадратичным образом зависят от угловой координаты. Проведен анализ влияния параметров структуры на КИН в вершине трещины. Показано, что при стремлении к нулю расстояния от вершины трещины до угловой точки клина трещина становится нестабильной. Градиентные свойства материалов могут существенно влиять на величину КИН. В случае, когда срединная область клина, где расположена трещина, является относительно более мягкой, по сравнению с областями вблизи его кромок, КИН значительно снижается по отношению к его значению в однородном материале. Наоборот, ужесточение данной области вызывает повышение КИН, по сравнению с однородным случаем.

Проблема сингулярности напряжений в вершине функционально-градиентного клина имеет ряд особенностей, по сравнению со случаем однородной структуры. В отличие от однородного материала, при достаточно больших значениях относительной сдвиговой жесткости, даже в случаях острых вырезов не возникает сингулярности напряжений в их вершине. С другой стороны, в функционально-градиентных клиньях с острыми углами раствора и мягкой срединной частью, напряжения в вершине могут иметь неограниченный рост. Кроме того, при значениях параметра относительной жесткости, меньших единицы, существуют такие величины углов раствора клиновидной области, при которых асимптотика напряжений вблизи ее вершины будет иметь два сингулярных слагаемых.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Jin Z.-H., Batra R.C.** Some basic fracture mechanics concepts in functionally graded materials // Journal of Mechanics and Physics of Solids. 1996. Vol. 44. No. 8. Pp. 1221–1235.

2. **Abotula A., Kidane A., Chalivendra V. B., Shukla A.** Dynamic curving cracks in functionally graded materials under thermomechanical loading // International Journal of Solids and Structures. 2012. Vol. 49. No. 4. Pp. 583–593.

3. **Mostefa A. H., Merdai S., Mahmoudi N.** An overview of functionally graded materials 'FGM' // Proceedings of the Third International Symposium on Materials and Sustainable Development. Edited by Abdelbaki B., Safi B., Saidi M. Springer Cham, 2018. Pp. 267–278.

4. **Carpinteri A., Paggi M.** Asymptotic analysis in linear elasticity: from the pioneering studies by Westerhardt and Irwin until today // Engineering Fracture Mechanics. 2009. Vol. 76. No. 12. Pp. 1771–1784.

5. **Carpinteri A., Paggi M.** On the asymptotic stress field in angularly nonhomogeneous materials // International Journal of Fracture. 2005. Vol. 135. No. 1–4. Pp. 267–283.

6. **Cheng C. Z., Ge S. Y., Yao S. I., Niu Z. R., Recho N.** Singularity analysis for a V-notch with angularly inhomogeneous elastic properties // International Journal of Solids and Structures. 2016. Vol. 78–79. No. 1. Pp. 138–148.

7. **Erdogan F.** Crack problems for bonded nonhomogeneous materials under antiplane shear loading // Journal of Applied Mechanics. 1985. Vol. 52. No. 4. Pp. 823–828.

8. **Erdogan F., Ozturk M.** Periodic cracking of functionally graded coatings // International Journal of Engineering Science. 1995. Vol. 33. No. 15. Pp. 2179–2195.

9. **Jin Z.-H., Batra R. C.** Interface cracking between functionally graded coatings and a substrate

under antiplane shear // International Journal of Engineering Science. 1996. Vol. 34. No. 15. Pp. 1705–1716.

10. **Li Y.-D., Lee K. Y.** An antiplane crack perpendicular to the weak/microdiscontinuos interface in a bi-FGM structure with exponential and linear nonhomogeneities // International Journal of Fracture. 2007. Vol. 146. No. 4. Pp. 203–211.

11. **Pan H., Song T., Wang Z.** An analytical model for collinear cracks in functionally graded materials with general mechanical properties // Composite Structures. 2015. Vol. 132. No. 15. Pp. 359–371.

12. **Linkov A., Rybarska-Rusinek L.** Evaluation of stress concentration in multiwedge systems with functionally graded wedges // International Journal of Engineering Science. 2012. Vol. 61. No. 1. Pp. 87–93.

13. **Тихомиров В. В.** Сингулярность напряжений в вершине композитного клина с внутренним функционально-градиентным материалом // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2015. № 3 (225). С. 96–106.

14. **Makhorkin M. I., Skrypochka T. A., Torskyy A. R.** The stress singularity order in a composite wedge of functionally graded materials under antiplane deformation // Mathematical Modelling and Computing. 2020. Vol. 7. No. 1. Pp. 39–47.

15. **Wang Y.-S., Huang G.-Y., Dross D.** On the mechanical modeling of functionally graded interfacial zone with Griffith crack: antiplane deformation // Journal of Applied Mechanics. 2003. Vol. 70. No. 5. Pp. 676–680.

16. **Guo L.-C., Noda N.** Modeling method for a crack problem of functionally graded materials with arbitrary properties – piecewise-exponential model // International Journal of Solids and Structures. 2007. Vol. 44. No. 15. Pp. 6768–6790.

17. **Тихомиров В. В.** Полубесконечная трещина моды III в биматериальном клине // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2016. № 2 (242). С. 126–135.

18. **Noble B.** Method based on the Wiener – Hopf technique for solution of partial differential equations. New York, London: Pergamon Press, 1958. 246 p.

REFERENCES

1. **Jin Z.-H., Batra R. C.,** Some basic fracture mechanics concepts in functionally graded materials, J. Mech. Phys. Sol. 44 (8) (1996) 1221–1235.

2. **Abotula A., Kidane A., Chalivendra V. B., Shukla A.,** Dynamic curving cracks in functionally graded materials under thermomechanical loading, Int. J. Solids Struct. 49 (4) (2012) 583–593.

3. **Mostefa A. H., Merdai S., Mahmoudi N.,** An overview of functionally graded materials 'FGM', In book: Proceedings of the Third International Symposium on Materials and Sustainable Development, Ed. by Abdelbaki B., Safi B., Saidi M. Springer Cham (2018) 267–278.

4. **Carpinteri A., Paggi M.,** Asymptotic analysis in linear elasticity: from the pioneering studies by Westerhardt and Irwin until today, Eng. Fract. Mech. 76 (12) (2009) 1771–1784.

5. **Carpinteri A., Paggi M.,** On the asymptotic stress field in angularly nonhomogeneous materials, Int. J. Fract. 135 (1–4) (2005) 267–283.

6. **Cheng C. Z., Ge S. Y., Yao S. I., et al.,** Singularity analysis for a V-notch with angularly inhomogeneous elastic properties, Int. J. Solids Struct. 78–79 (1) (2016) 138–148.

7. **Erdogan F.,** Crack problems for bonded nonhomogeneous materials under antiplane shear loading, J. Appl. Mech. 52 (4) (1985) 823–828.

8. **Erdogan F., Ozturk M.,** Periodic cracking of functionally graded coatings, Int. J. Eng. Sci. 33 (15) (1995) 2179–2195.

9. **Jin Z.-H., Batra R. C.,** Interface cracking between functionally graded coatings and a substrate under antiplane shear, Int. J. Eng. Sci. 34 (15) (1996) 1705–1716.

10. **Li Y.-D., Lee K. Y.,** An antiplane crack perpendicular to the weak/microdiscontinuos interface in a bi-FGM structure with exponential and linear nonhomogeneities, Int. J. Fract. 146 (4) (2007) 203–211.

11. **Pan H., Song T., Wang Z.,** An analytical model for collinear cracks in functionally graded materials with general mechanical properties, Compos. Struct. 132 (15) (2015) 359–371.

12. **Linkov A., Rybarska-Rusinek L.,** Evaluation of stress concentration in multi-wedge systems with functionally graded wedges, Int. J. Eng. Sci. 61 (1) (2012) 87–93.

13. **Tikhomirov V. V.,** Stress singularity in a top of the composite wedge with internal functionally graded material, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (3 (225)) (2015) 96–106.

14. **Makhorkin M. I., Skrypochka T. A., Torskyy A. R.,** The stress singularity in a composite wedge of functionally graded materials under antiplane deformation, Math. Model. Comput. 7 (1) (2020) 39–47.

15. **Wang Y.-S., Huang G.-Y., Dross D.,** On the mechanical modeling of functionally graded interfacial zone with Griffith crack: antiplane deformation, J. Appl. Mech. 70 (5) (2003) 676–680.

16. **Guo L.-C., Noda N.,** Modeling method for a crack problem of functionally graded materials with arbitrary properties – piecewise-exponential model, Int. J. Solids Struct. 44 (15) (2007) 6768–6790.

17. **Tikhomirov V. V.,** A semi-infinite crack of mode III in the bimaterial wedge, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. (2 (242)) (2016) 126–135.

18. **Noble B.,** Method based on the Wiener – Hopf technique for solution of partial differential equations, Pergamon Press, New York, London, 1958.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ТИХОМИРОВ Виктор Васильевич – *кандидат физико-математических наук, заместитель директора по образовательной деятельности Института прикладной математики и механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия.*

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
victikh@mail.ru
ORCID: 0000-0001-9655-5817

THE AUTHOR

TIKHOMIROV Victor V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
victikh@mail.ru
ORCID: 0000-0001-9655-5817

Статья поступила в редакцию 29.04.2022. Одобрена после рецензирования 30.08.2022. Принята 30.08.2022.

Received 29.04.2022. Approved after reviewing 30.08.2022. Accepted 30.08.2022.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2022

Научное издание

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

«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS»
ТОМ 15, № 3, 2022

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
д-р физ.-мат. наук, профессор *В. В. Дубов*
д-р физ.-мат. наук, профессор *П. А. Карасёв*
канд. физ.-мат. наук, доцент *В. М. Капралова*
канд. физ.-мат. наук *О. А. Ящуржинская* – научный редактор, корректор
А. С. Колгатина – переводчик
Н. А. Бушманова – ответственный секретарь

Телефон редакции 8 (812) 294-22-85

Сайт https://physmath.spbstu.ru/

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *Н. А. Бушмановой*

Подписано в печать 30.09.2022. Формат 60x84/8. Печать цифровая.
Усл. печ. л. Тираж 1000. Заказ .

Отпечатано с готового оригинал-макета, предоставленного ИЦ "ИКИ",
в Издательско-полиграфическом центре
Санкт-Петербургского политехнического университета.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
Тел.: (812) 552-77-17; 550-40-14.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
Физико-математические науки»

1.ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 года журнал издавался в составе сериального издания "Научно-технические ведомости СПбГПУ". **Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», журнал издавали под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354 (сериальный) 2304-9782.** В 2012 году он зарегистрирован как самостоятельное периодическое издание **ISSN 2304-9782** (Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.). С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика**, включая следующие шифры научных специальностей: 1.1.8., 1.1.9., 1.3.2., 1.3.3., 1.3.4., 1.3.5., 1.3.6., 1.3.7., 1.3.8., 1.3.11., 1.3.19.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базах данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), Web of Science (Emerging Sources Citation Index).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

В списки литературы **рекомендуется** включать ссылки на научные статьи, монографии, сборники статей, сборники конференций, электронные ресурсы с указанием даты обращения, патенты.

Как правило, **нежелательны** ссылки на диссертации и авторефераты диссертаций (такие ссылки допускаются, если результаты исследований еще не опубликованы, или не представлены достаточно подробно).

В списки литературы **не рекомендуется** включать ссылки на учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, ГОСТы и др. нормативные документы, на законы и постановления, а также на архивные документы (если все же необходимо указать такие источники, то они оформляются в виде сносок).

Рекомендуемый объем списка литературы для обзорных статей – не менее 50 источников, для остальных статей – не менее 10.

Доля источников давностью менее 5 лет должна составлять не менее половины. Допустимый процент самоцитирования – не выше 10 – 20. Объем ссылок на зарубежные источники должен быть не менее 20%.

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор **текста** осуществляется в редакторе **MS Word.**

6. **Формулы** набираются в редакторе MathType (не во встроенном редакторе Word) (мелкие формулы, символы и обозначения набираются без использования редактора формул). **Таблицы** набираются в том же формате, что и основной текст. В тексте буква «ё» заменяется на букву «е» и оставляется только в фамилиях.

7. **Рисунки** (в формате .tiff, .bmp, .jpeg) и **таблицы** оформляются в виде отдельных файлов. Рисунки представляются только в черно-белом варианте. Шрифт – **Times New Roman**, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (http://journals.spbstu.ru). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончится **ДОСРОЧНО**.

E-mail: physics@spbstu.ru,
Сайт журнала: https://physmath.spbstu.ru/