МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

2(218) 2015

Издательство Политехнического университета
Санкт-Петербург
2015

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

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Алферов Ж.И., академик РАН – председатель;
Боровков А.И., проректор по перспективным проектам;
Варшалович Д.А., академик РАН;
Глухих В.А., академик РАН;
Жуков А.Е., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор;
Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН;
Рудской А.И., чл.-кор. РАН – зам. председателя;
Рутберг Ф.Г., 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;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Кожевников Н.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук,профессор,СПбПУ, СПб., Россия;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Самойлов В.О., чл.-кор. РАМН, профессор, СПбПУ, СПб., Россия;
Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Франкфуртский ун-т им. И.В. Гёте, 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.

Журнал с 1995 года издается под научно-методическим руководством Российской академии наук.

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» ISSN 1994-2354.

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

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

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

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства: Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.
Тел. редакции (812) 294-22-85.

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics and Mathematics

2(218) 2015

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2015

ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

Zh.I. Alferov – full member of RAS, head of the editorial council;
A.I. Borovkov – vice-rector for perspective projects;
D.A. Varshalovich – full member of RAS; *V.A. Glukhikh* – full member of RAS;
A.Ye. Zhukov – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
V.K. Ivanov – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *D.A. Indeitsev* – corresponding member of RAS;
A.I. Rudskoy – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council;
Ph.G. Rutberg – full member of RAS;
R.A. Suris – full member of RAS.

JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Blinov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
D.A. Firsov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
N.M. Kozhevnikov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
V.V. Kozlovsky – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
V.M. Ostryakov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
V.O. Samoilov – corresponding member of RAMS, prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Solovyev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Johann Wolfgang Goethe University Frankfurt am Main, Germany;
A.K. Tagantsev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;
I.N. Toptygin – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia;
E.A. Tropp – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbPU, St. Petersburg, Russia

The journal is published under the scientific and methodical guidance of RAS since 1995.

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 SPbGPU' (ISSN 1994-2354).

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

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

The journal is in the Russian Science Citation Index (RSCI) database.

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

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.

© Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 2015

Содержание

Жоресу Ивановичу Алфёрову – 85 лет 9

Физика конденсированного состояния

Сокура Л.А., Неведомский В.Н., Берт Н.А. *Структурные особенности квантовых точек антимонида индия на подложке арсенида индия* 11

Математическое моделирование физических процессов

Пастухов А.А. *Применение нейронных сетей для прогнозирования параметров энергетических установок с лазерным зажиганием* 19

Михайловский Е.А., Новицкий Н.Н. *Модифицированный метод узловых давлений для расчета потокораспределения в гидравлических цепях при нетрадиционных замыкающих соотношениях* 30

Математическая физика

Петриченко М.Р. *Приближенные оценки постоянной Блазиуса* 43

Приборы и техника физического эксперимента

Железняк А.Г., Сидоров В.Г. *Планшетный сканер как прибор для физических исследований* 49

Купцов В.Д., Валюхов В.П. *Фотоинтегратор детектора молекулярных ядер конденсации* 61

Аладов А.В., Булашевич К.А., Черняков А.Е., Карпов С.Ю., Валюхов В.П., Закгейм А.Л. *Тепловое сопротивление и неоднородность распределения электролюминесценции и температуры в мощных AlGaInN-светодиодах (статья на английском языке)* 74

Физическая оптика

Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. *Влияние на спектр генерации YAG:Nd-лазера безызлучательных переходов между подуровнями нижнего рабочего мультиплета* 84

Биофизика и медицинская физика

Скворцов Н.В., Власова О.Л., Болдырев А.Г., Ларионов И.В. *Оценка эффективности сорбента сфероцелл C80 в динамическом режиме* 91

Ядерная физика

Малаев М.В., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Бердников Я.А., Самсонов В.М. *Факторы ядерной модификации φ-мезонов при столкновениях ядер свинца в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере* 99

Малаев М.В., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Бердников Я.А., Самсонов В.М. *Определение факторов ядерной модификации φ-мезонов во взаимодействиях протонов с ядрами свинца в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере* 110

Математика

Алексеева Т.А. *Математическое моделирование случайных дорожных возмущений при исследовании динамики мобильных машин* 118

Пичугин Ю.А. *Геометрические аспекты проверки сложных статистических гипотез в математическом моделировании* 123

Лазовская Т.В., Тархов Д.А. *Новые подходы к построению параметризованного нейросетевого решения жесткого дифференциального уравнения* 138

Астрофизика

Чариков Ю.Е., Глобина В.И., Шабалин А.Н., Елфимова Е.П. *Моделирование временных задержек жесткого рентгеновского излучения в солнечных вспышках* 148

Теоретическая физика

Горобей Н.Н., Лукьяненко А.С. *О начальном состоянии Вселенной в квантовой космологии* 160

Полозков Р.Г., Иванов В.К., Сушко Г.Б., Король А.В., Соловьев А.В. *Каналирование ультрарелятивистских позитронов в изогнутых кристаллах алмаза* 167

Авторский указатель 179

Contents

Nobel Prize winner Zh. I. Alferov celebrates his 85th birthday 9

Condensed Matter Physics

Sokura L.A., Nevedomskiy V.N., Bert N.A. *Structural features of indium antimonide quantum dots on the indium arsenide substrate* 11

Simulation of Physical Processes

Pastukhov A.A. *Predicting the parameters of energy installations with laser ignition: neural network models* 19

Mikhailovsky E.A., Novitsky N.N. *A modified nodal pressure method for calculation of the flow distribution in hydraulic circuits for the case of unconventional closing relations* 30

Mathematical Physics

Petritchenko M.R. *Rough estimates of the Blasius constant* 43

Experimental Technique and Devices

Zheleznyak A.G., Sidorov V.G. *Flatbed scanner as an instrument for physical studies* 49

Kuptsov V.D., Valyukhov V.P. *A photointegrator of the molecular condensation nuclei detector* 61

Aladov A.V., Bulashevich K.A., Chernyakov A.E., Karpov S.Yu., Valyukhov V.P., Zakgeym A.L. *Thermal resistanse and non-uniform distribution of electroluminescence and temperature in high-power AlGaInN light-emitting diodes* 74

Physical Optics

Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. *Nonradiative transitions between the sublevels of the working lower multiplet of the YAG:Nd laser: effects on the generation spectrum* 84

Biophysics and Medical Physics

Skvortsov N.S., Vlasova O.L., Boldyrev A.G., Larionov I.V. *Performance evaluation of Sferocell S80 sorbent in the dynamic mode* 91

Nuclear Physics

Malaev M.V., Riabov V.G., Ryabov Yu.G., Berdnikov Ya.A., Samsonov V.M. *Phi meson nuclear modification factors at the lead nuclei collisions in the ALICE experiment at the LHC* 99

Malaev M.V., Riabov V.G., Ryabov Yu.G., Berdnikov Ya.A., Samsonov V.M. *Determination of phi meson nuclear modification factors in the proton – lead nucleous interactions in the ALICE experiment at the LHC* 110

Mathematics

Alexeeva T.A. *Simulation of occasional road disturbances for mobile vehicles dynamic studies*..... 118

Pichugin Yu.A. *Geometrical aspects of testing the complex statistical hypotheses in mathematical simulation* 123

Lazovskaya T.V., Tarkhov D.A. *Fresh approaches to the construction of the parameterized neural network solution of a stiff differential equation* 138

Astrophysics

Charikov Yu.E., Globina V.I., Shabalin A.N., Elfimova E.P. *Simulation of hard X-ray time delays in solar flares* 148

Theoretical Physics

Gorobey N.N., Lukyanenko A.S. *On the Universe initial state in quantum cosmology*..... 160

Polozkov R.G., Ivanov V.K., Sushko G.B., Korol A.N., Solov'yov A.N. *Channeling of ultrarelativistic positrons in bent diamond crystals* 167

Author index..... 179

ЖОРЕСУ ИВАНОВИЧУ АЛФЁРОВУ – 85 ЛЕТ

15 марта 2015 года исполнилось восемьдесят пять лет со дня рождения нашего выдающегося соотечественника Жореса Ивановича Алфёрова. В кратком очерке невозможно изложить его богатую биографию и колоссальные достижения. Они отражены в многочисленных изданиях. Отметим лишь, что вся жизнь Ж.И. Алфёрова как ученого неразрывно связана с Академией наук с момента прихода в 1953 году на работу в Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе. Он автор более 500 научных работ, в том числе 3 монографий и более 50 изобретений. Ныне Ж.И. Алфёров – академик, вице-президент РАН; многие годы он являлся председателем Президиума Санкт-Петербургского научного центра РАН.

С 1988 года научно-педагогическая деятельность академика Ж.И. Алфёрова неразрывно связана с нашим университетом. Он был деканом созданного по его инициативе физико-технического факультета, является заведующим кафедрой физики и технологии наноструктур. В 2000 году Жорес Иванович был избран почетным доктором нашего вуза. Ныне он является членом наблюдательного совета СПбПУ Петра Великого, профессором и научным руководителем Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций нашего университета. Кроме того, Ж.И. Алфёров – создатель и ректор Санкт-Петербургского национального исследовательского академического университета Российской академии наук.

Заслуги академика Ж.И. Алфёрова перед российской и мировой наукой отмечены многочисленными премиями и наградами. Среди них главная международная награда – это Нобелевская премия по физике 2000 года «За основополагающие работы в области информационных и коммуникационных технологий» и, в частности, «За развитие полупроводниковых гетероструктур для высокоскоростной и оптоэлектроники».

Когда пройден такой длинный и плодотворный путь, казалось бы, можно себе позволить изменить жизненный ритм, но Жорес Иванович, как и раньше, полон новых идей и планов. Свой славный юбилей Ж.И. Алфёров встречает на пути к новым свершениям и достижениям на благо науке, которой он посвятил свою жизнь.

Редакционный совет и редакционная коллегия журнала «Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки» сердечно поздравляют лауреата

Нобелевской премии, академика Жореса Ивановича Алфёрова со знаменательной датой – 85-летием со дня рождения!

Нам, как и всему научному сообществу, хорошо известны Ваши выдающиеся научные достижения, Ваш неоценимый вклад в организацию отечественных научных исследований. Мы бесконечно благодарны Вам за постоянную защиту интересов российских ученых в вопросах развития науки и ее роли в нашем обществе.

Помимо Ваших блестящих научных и научно-организационных результатов, нельзя не отметить Ваши большие заслуги на ниве российского образования, а также в деле воспитания научных кадров высшей квалификации как в нашем, так и в Академическом университете.

Мы гордимся тем, что Вы член редакционного совета нашего журнала, а в настоящее время – и член наблюдательного совета Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

Желаем Вам крепкого здоровья, неиссякаемой энергии, больших успехов и новых побед во всех сферах Вашей неутомимой деятельности!

DOI: 10.5862/JPM.218.1
УДК 538.951

Л.А. Сокура, В.Н. Неведомский, Н.А. Берт
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК АНТИМОНИДА ИНДИЯ НА ПОДЛОЖКЕ АРСЕНИДА ИНДИЯ

Проведены электронно-микроскопические (ЭМ) исследования структур на основе квантовых точек InSb/InAs. На ЭМ-изображениях больших квантовых точек (высота 9 – 10 нм, диаметр 38 – 50 нм) в планарной геометрии наблюдался сложный дифракционный контраст. По ЭМ-изображениям высокого разрешения обнаружено наличие дислокаций несоответствия в квантовых точках. Для системы квантовых точек антимонида индия InSb на подложке арсенида индия InAs впервые было проведено моделирование изображений контраста от квантовой точки, содержащей частичную дислокацию Франка. Методом конечных элементов вычислялись поля смещений и рассчитывались ЭМ-изображения. Сравнение результатов моделирования с экспериментом позволило объяснить наблюдаемые особенности муарового узора от большой квантовой точки антимонида индия InSb присутствием в ней дислокации несоответствия на границе квантовая точка – подложка.

КВАНТОВАЯ ТОЧКА, ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ, ПОЛУПРОВОДНИК, ДИСЛОКАЦИЯ НЕСООТВЕТСТВИЯ.

Введение

Гетероструктуры на основе квантовых точек (КТ) антимонида индия InSb, полученных на подложках антимонида галлия GaSb и арсенида индия InAs, являются перспективными материалами для создания оптоэлектронных приборов, работающих в среднем ИК-диапазоне (3 – 5 мкм). Например, лазеры среднего ИК-диапазона находят применение в самых разнообразных областях деятельности: контроля химических процессов, экологического мониторинга, контроля утечек, бесконтактной медицинской диагностики и лазерной хирургии.

Система антимонид индия – арсенид индия (InSb/InAs) по своим структурным свойствам аналогична хорошо изученной системе InAs/GaAs. Ее кристаллическая структура также формирует гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку. Система InSb/InAs имеет значение рассогласования решеток, равное 6,9 % и очень близкое к таковому для InAs/GaAs (7,2 %). Однако вследствие того, что условия получения квантовых точек InSb на подложке InAs еще не оптимизированы, при выращивании КТ InSb/InAs наряду с малыми КТ на подложке образуются крупные островки, содержащие структурные дефекты.

Основная цель данной работы – определение природы дефектов несоответствия в больших некогерентных квантовых точках антимонида индия – арсенида индия. Для этого проводилось исследование структуры КТ InSb/InAs методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Исходя из экспериментальных результатов, была построена модель структуры таких КТ для проведения вычислений поля смещений и дифракционного контраста методом конечных элементов.

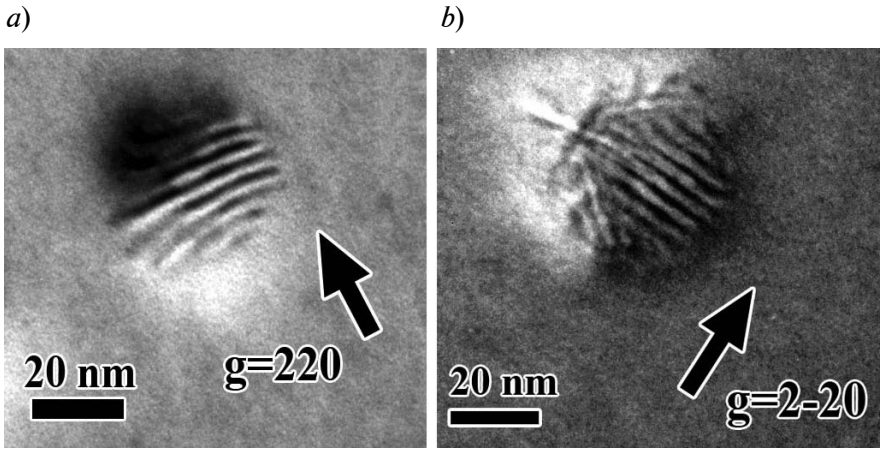


Рис. 1. ПЭМ-изображения малой (*a*) и большой (*b*) КТ InSb/InAs в планарной геометрии с картиной муара.
Стрелки указывают направления вектора дифракции

Экспериментальная часть

Экспериментальные образцы были получены с помощью жидкофазной эпитаксии (ЖФЭ) и газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (МОГФЭ). Эпитаксиальный рост КТ на подложке InAs(001) выполнялся в установке ЖФЭ горизонтального типа со стандартной графитовой кассетой под потоком водорода в широком диапазоне температур 420 – 445 °С, при времени формирования КТ, равном 2 с, и скорости охлаждения системы 0,3 – 0,6 °С/мин. Также эпитаксиальный рост КТ InSb/InAs выполнялся в стандартном горизонтальном реакторе МОГФЭ при атмосферном давлении, при температуре 420 – 440 °С и при скорости подачи атомарного индия в реактор 5,6 – 8,0 мкмоль/мин. Выращивание КТ данными методами подробно описано в работах [1 – 5].

Для исследования КТ InSb/InAs методом ПЭМ образцы были подготовлены в соответствии со стандартной процедурой, с предварительным механическим утоньшением и последующей полировкой ионным пучком (энергия пучка ионов аргона – 4 кэВ). Исследование выполнялось на просвечивающем электронном микроскопе JEOL JEM 2100F с ускоряющим напряжением 200 кВ в режимах дифракции и высокого разрешения в планарной геометрии и в поперечном сечении.

Экспериментальные результаты

При исследовании квантовых точек методом ПЭМ наблюдалась бимодальность в распределении размеров объектов. Присутствовали малые КТ высотой 5 нм и диаметром 18 – 22 нм, а также большие, с соответствующими размерами 9 – 10 нм и 38 – 50 нм. При изучении поперечного сечения КТ было установлено, что большинство КТ имеют сферическую форму, однако присутствовали квантовые точки трапециевидной формы.

При исследовании объектов в планарной геометрии в двулучевых дифракционных условиях для малых квантовых точек наблюдалась картина классического муара. В работах [6, 7] было показано, что такой муаровый узор появляется вследствие значительного рассогласования периодов решеток подложки и пластически релаксированного, незаращенного островка. Пример такого муара, полученного для малой КТ, приведен на рис. 1, *a*. Как и в классическом случае, полосы муара расположены перпендикулярно дифракционному вектору, а с поворотом этого вектора они вращаются вместе с ним. Видно, что в отличие от малых, от больших КТ наблюдается муар со сложным узором (рис. 1, *b*). При изменении направления вектора дифракции **g** контраст от большой КТ не поворачивался вместе с ним, а изменялся сам узор (рис. 2). Появ-

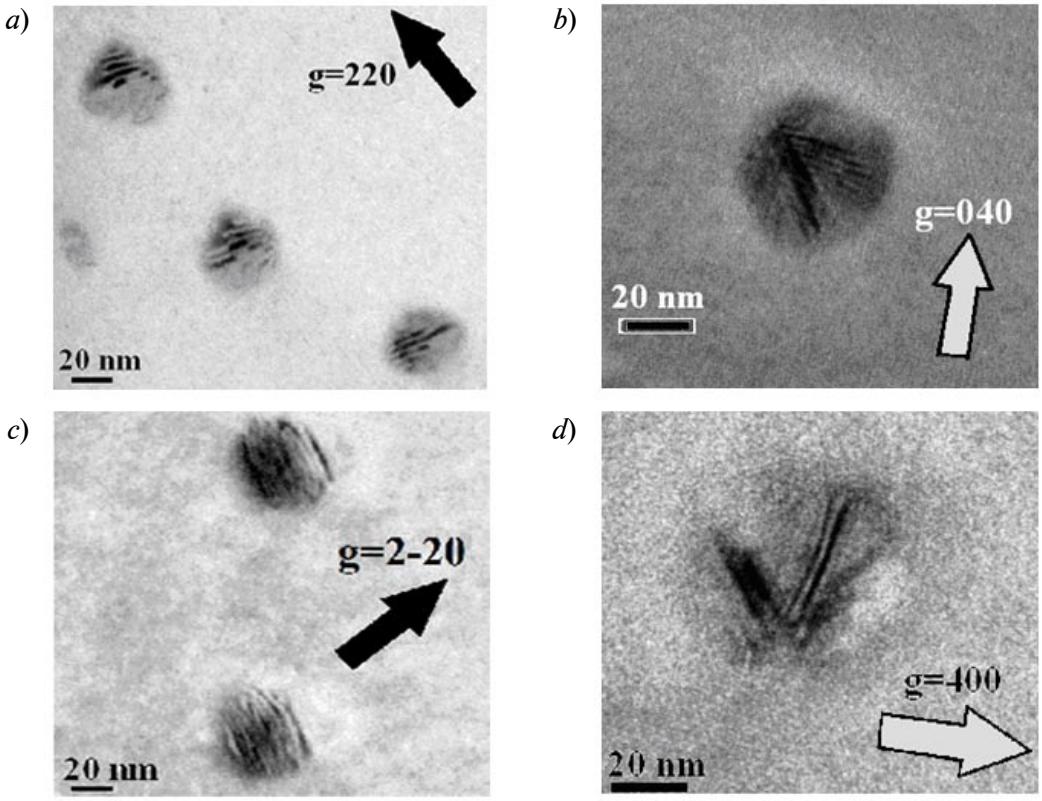


Рис. 2. ПЭМ-изображения больших КТ InSb/InAs в двулучевых дифракционных условиях

ление «галочек» не находит объяснения, если исходить из простых соображений о формировании муара. Однако наблюдаемая картина позволяет сделать заключение об отсутствии оси аксиальной симметрии (001) в КТ и наличии выделенного направления в планарной плоскости.

По электронно-микроскопическим изображениям высокого разрешения было обнаружено присутствие дислокации вблизи границы квантовая точка – подложка. Эта дислокация продемонстрирована на изображениях поперечного сечения КТ, где она видна внутри кристаллической решетки (рис. 3). Данный структурный дефект может возникнуть в результате несоответствия параметров решетки КТ и подложки.

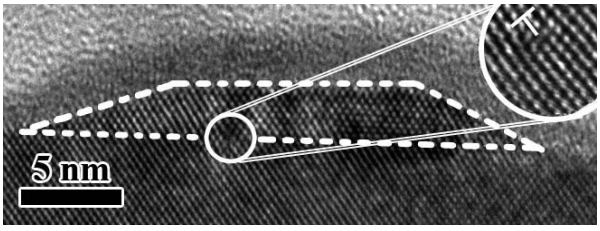


Рис. 3. Электронно-микроскопическое изображение высокого разрешения КТ InSb/InAs (выделена пунктиром) с дислокацией несоответствия (вынесена в увеличенном масштабе)

Моделирование дифракционного контраста

Для выяснения причин появления сложного муара мы моделировали дифракционный контраст от КТ, содержащий дислокацию несоответствия. Для расчета изображений контраста от одиночной квантовой точки InSb на поверхности подложки InAs была построена механическая модель системы и рассчитаны поля смещений.

Из опубликованных данных известно, что в ГЦК-решетке в плоскостях $\langle 111 \rangle$ на границе квантовая точка – подложка чаще всего встречаются дислокации двух типов: 60-градусная и частичная Франка (ДФ). В хорошо изученной системе InGaAs/GaAs

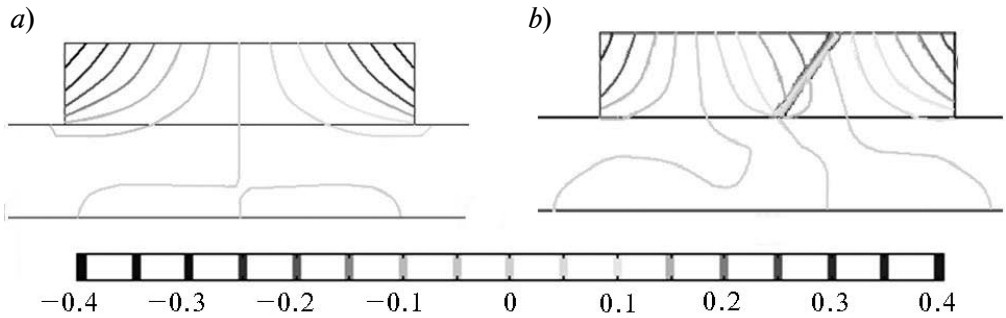


Рис. 4. Расчетная карта равных смещений в КТ цилиндрической формы в отсутствие (*a*) и при наличии (*b*) частичной дислокации Франка

на границе некогерентной КТ с подложкой наблюдалась частичная дислокация Франка [8], поэтому именно она была выбрана для построения нашей модели. Дислокация лежит на границе квантовая точка – подложка вдоль направления [110] и характеризуется вектором Бюргерса **b** = 1/ 3 [111]. Поле смещений внутри и снаружи КТ вычислялось относительно ненапряженного состояния подложки.

Мы рассмотрели квантовые точки цилиндрической, трапециевидной и сферической форм. Последние две наблюдались на эксперименте.

Результаты вычисления поля смещений внутри КТ для построенных моделей показали, что форма КТ слабо влияет на величину и распределение этого поля. Однако независимо от формы КТ, введение ДФ в КТ сильно меняет распределение поля смещений в окружающей ее области и уменьшает величину смещений по краям КТ (почти на 30 %).

В качестве примера на рис. 4 показаны результаты расчета поля смещений для КТ цилиндрической формы. Они позволяют сравнить положение линий равных смещений для КТ для двух рассмотренных случаев: отсутствия и наличия частичной дислокации Франка.

Вычисленные поля смещений использовались для моделирования дифракционного контраста ПЭМ-изображений. Динамическое приближение Хови – Уэлана использовалось для расчета изображений в планарной геометрии КТ, содержащих ДФ. Этот подход применяется для решения задач о дифракции электронов в кристаллах, содержащих дефекты, и содержит два дифференциальных уравнения для амплитуд прошедшей (Φ_0) и дифрагированной (Φ_g) электронных волн:

$$\frac{d\Phi_0(z)}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_g}\Phi_g(z)\exp(2\pi i\vec{g}\vec{u});$$

$$\frac{d\Phi_g(z)}{dz} = \frac{\pi i}{\xi_g}\Phi_0(z)\exp(-2\pi i\vec{g}\vec{u}) + 2\pi i\vec{s}\Phi_g(z),$$

где $\vec{g}$ – вектор дифракции, ξ_g – длина экстинкции, s – параметр отклонения (в наших вычислениях $s = 0$) [9, 10].

Обсуждение результатов

Результаты расчета контраста показали, что форма островков практически не влияет на получаемый дифракционный контраст. Однако вид дифракционного контраста зависит от величины рассогласования параметров решеток КТ и подложки (рис. 5). Также можно заметить, что картина муара значительно изменяется с поворотом вектора дифракции.

Введение ДФ в КТ также приводит к различным изменениям муара. Как видно из рис. 5, это приводит к появлению дополнительных муаровых полос на контрасте с действующим дифракционным вектором g = 220. На изображениях контраста со значениями g = 400 и 0-40 введение ДФ нарушает симметрию картины. Также видно, что наличие дислокации внутри КТ не отражается на дифракционном контрасте с вектором g = 2-20.

Увеличение рассогласования параме-

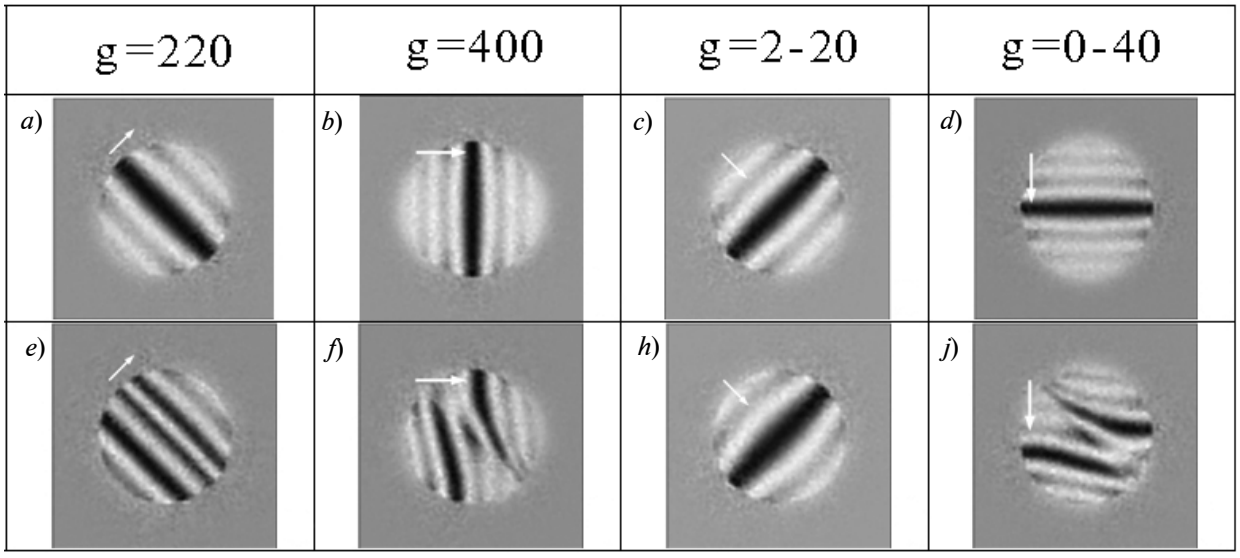


Рис. 5. Результаты моделирования дифракционного контраста от квантовых точек в отсутствие (*a* – *d*) и при наличии (*e* – *j*) частичной дислокации Франка; рассогласование периодов решеток подложки и КТ составляет 3 %; белыми стрелками показано направление вектора дифракции

тров решеток КТ и подложки приводит к уменьшению периода муара и, следовательно, к увеличению количества полос.

Сравнение моделированных и экспериментальных изображений (рис. 6) показало, что экспериментальные изображения для малых КТ в отражении $g = 220$ (см. рис. 6, *d*) по периоду муара и количеству муаровых

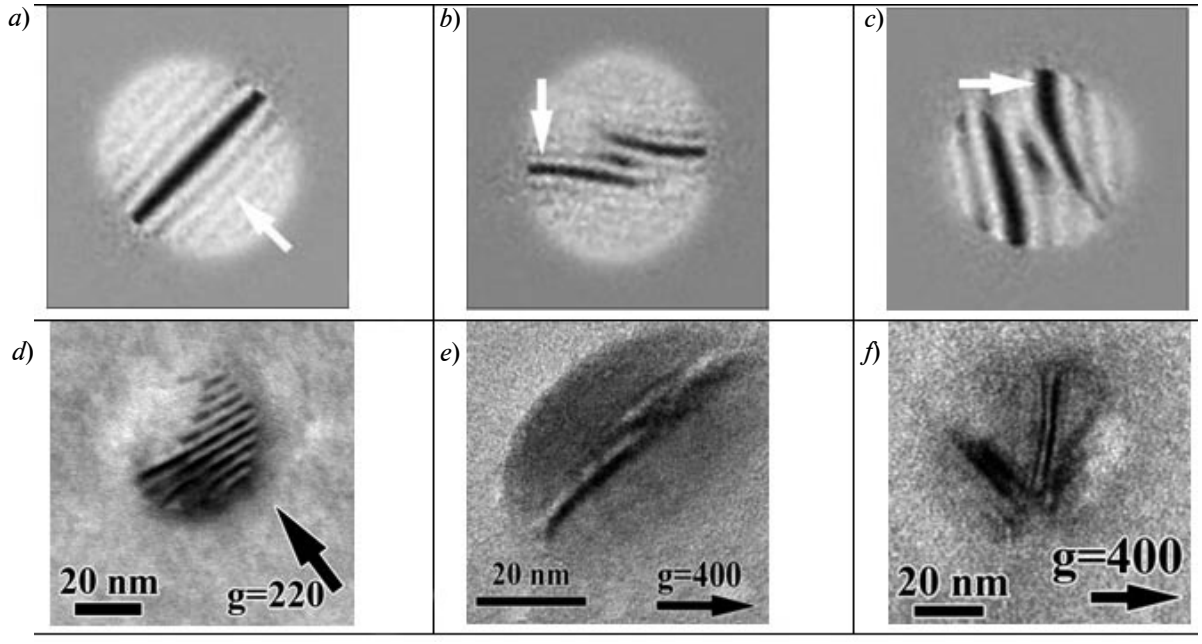


Рис. 6. Сравнение моделированных (*a* – *c*) и экспериментальных (*d* – *f*) изображений контраста от КТ InSb в отсутствие (*a*) и при наличии (*b* – *c*) частичной дислокации Франка; рассогласования периодов решеток подложки и КТ составляют 3 % (*c*, *f*) и 6 % (*a*, *b*, *d*, *e*); значения дифракционного вектора *g*: 2-20 и 220 (*a, d*), 0-40 и 400 (*b*, *c, e, f*)

полос соответствуют расчетным с 6 %-м рассогласованием решеток (рис. 6, *a*). Это означает, что малые КТ состоят из чистого антимонида индия и не содержат включений мышьяка (или содержат его незначительное количество).

Для 3-х и 6%-го рассогласования на моделированных изображениях контраста с действующим дифракционным вектором g = 400 и 0-40 можно наблюдать характерные «галочки» (рис. 6, *b*, *c*), которые наблюдаются на экспериментальных ПЭМ-изображениях больших КТ (рис. 6, *e*, *f*). Наличие «галочек» подтверждает факт присутствия дефектов несоответствия на границе квантовая точка – подложка для более крупных КТ.

Заключение

Проведено исследование структуры незаращенной квантовой точки антимонида индия на подложке из арсенида индия с использованием просвечивающей электронной микроскопии и компьютерного моделирования ЭМ-изображений. При изучении дифракционного контраста больших КТ (высота 9 – 10 нм, диаметр 38 – 50 нм) в планарной геометрии были обнаружены особенности муарового узора. С целью выяснения причин появления сложного муара на ПЭМ-изображениях была впервые построена модель КТ антимонида индия на подложке арсенида индия, которая использовалась для вычисления полей смещений и моделирования дифракционного контраста.

Было установлено, что форма КТ лишь незначительно влияет на величину радиальных смещений в системе. Введение же дислокации несоответствия (частичной дислокации Франка) в КТ при моделировании структуры уменьшает напряжения на краях КТ почти на 30 %.

Моделированные изображения КТ с дислокациями Франка на границе квантовая точка – подложка хорошо коррелируют с экспериментальными ЭМ-изображениями. Таким образом, получены весомые доказательства присутствия в квантовой точке дислокации Франка, позволяющие объяснить экспериментально наблюдаемые особенности муарового узора от квантовой точки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Романов В.В., Дементьев П.А., Моисеев К.Д.** Особенности формирования наноразмерных объектов в системе InSb/InAs методом газофазной эпитаксии из металлорганических соединений // ФТП. 2013. Т. 47. С. 420–425.

[2] **Моисеев К.Д., Пархоменко Я.А., Гущина Е.В. и др.** Особенности эпитаксиального роста узкозонных квантовых точек InSb на подложке InAs // ФТП. 2009. Т. 43. С. 1142–1150.

[3] **Моисеев К.Д., Пархоменко Я.А., Анкудинов А.В. и др.** Квантовые точки InSb/InAs, полученные методом жидкофазной эпитаксии // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. С. 50–57.

[4] **Mikhailova M., Stoyanov N., Andreev I., et al.** Optoelectronic sensors on GaSb- and InAs-based heterostructures for ecological monitoring and medical diagnostics // Proc. SPIE. Optical Sensing Technology and Applications. 2007. 6585. 658526-9.

[5] **Bert N.A., Nevedomsky V.N., Dement'ev P.A., et al.** TEM-study of free-standing self-assembled InSb quantum dots grown on InAs surface // Appl. Surf. Sci. 2013. Vol. 267. Pp. 77–80.

[6] **Bert N.A., Freidin A.B., Kolesnikova A.L., et al.** On strain state and pseudo-moire TEM contrast of InSb quantum dots coherently grown on InAs surface // Phys. Status Solidi A. Appl. Mat. 2010. Vol. 207. Pp. 2323–2326.

[7] **Androussi Y., Benabbas T., Lefebvre A.** Moiré-like fringes in transmission electron microscopy images of coherently strained semiconductor islands // Ultramicroscopy. 2002. Vol. 93. Pp. 161–167.

[8] **Chen Y., Lin X.W., Z. Liliental Z., et al.** Dislocation formation mechanism in strained In*x*Ga*1–x*As islands grown on GaAs(001) substrates // Appl. Phys. Lett. 1996. Vol. 68. Pp. 111–113.

[9] **Хирш П., Хови А., Николсон Р. и др.** Электронная микроскопия тонких кристаллов. М: Мир, 1968. 575 с.

[10] **Williams D.B., Carter C.B.** Transmission electron microscopy. A textbook for materials science. P. 2. New York: Plenum Press, 2009.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СОКУРА Лилия Александровна – *аспирантка и старший лаборант с высшим профессиональным образованием лаборатории диагностики материалов и структур твердотельной электроники Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
sokura@mail.ioffe.ru

НЕВЕДОМСКИЙ Владимир Николаевич – *научный сотрудник лаборатории диагностики материалов и структур твердотельной электроники Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
nevedom@mail.ioffe.ru

БЕРТ Николай Алексеевич – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории диагностики материалов и структур твердотельной электроники Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*
194021, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Nikolay.Bert@mail.ioffe.ru

Sokura L.A., Nevedomskiy V.N., Bert N.A. STRUCTURAL FEATURES OF INDIUM ANTIMONIDE QUANTUM DOTS ON THE INDIUM ARSENIDE SUBSTRATE.

The properties of InSb/InAs quantum dots (QDs) have been investigated by transmission electron microscopy (TEM). Specific features of diffraction contrast were discovered in plan-view TEM images of big (9–10 nm in height and 38–50 nm in diameter) InSb QDs. To understand the origin of such distortions in the TEM image the model of InSb QD on InAs substrate containing a partial Frank dislocation (FD) was developed and used for calculations of the displacement field and the subsequent diffraction image simulation of InSb QD for the first time. The shape of QD was established to influence insignificantly on the magnitude of radial displacements. The insertion of a misfit defect (a partial Frank dislocation) into QD reduces the strain at the edges of QD almost by 30%. The comparison of experimental and simulated data allowed us to explain the observed features of the moiré pattern in the image of big InSb QD by the presence of a misfit defect (FD) at the QD-substrate interface.

QUANTUM DOT, ELECTRON MICROSCOPY, SEMICONDUCTOR, MISFIT DISLOCATION.

REFERENCES

[1] **V.V. Romanov, P.A. Dementyev, K.D. Moiseyev,** Specific features of nanosize object formation in an InSb/InAs system by metal-organic vapor-phase epitaxy, Semiconductors. 47 (2013) 443–448.

[2] **K.D. Moiseyev, Ya.A. Parkhomenko, Gushchina Ye.V., A.V. Ankudinov, M.P. Mikhaylova, N.A. Bert, Yu.P. Yakovlev,** Specific features of the epitaxial growth of narrow-gap InSb quantum dots on an InAs substrate, Semiconductors. 43 (2009) 1102–1109.

[3] **K.D. Moiseyev, Ya.A. Parkhomenko, A.V. Ankudinov, Ye.V. Gushchina, M.P. Mikhaylova, A.N. Titkov, Yu.P. Yakovlev,** InSb/InAs quantum dots grown by liquid phase epitaxy, Tech. Phys. Lett. 33 (2007) 295–298.

[4] **M. Mikhailova, N. Stoyanov, I. Andreev, B. Zhurtanov, S. Kizhaev, E. Kunitsyna, K. Salikhov, Yu. Yakovlev,** Optoelectronic sensors on GaSb- and InAs- based heterostructures for ecological monitoring and medical diagnostics, Proc. SPIE, Optical Sensing Technology and Applications. 6585 (2007) 658526–9.

[5] **N.A. Bert, V.N. Nevedomsky, P.A. Dement'ev, K.D. Moiseev,** TEM-study of free-standing self-assembled InSb quantum dots grown on InAs surface, Appl. Surf. Sci. 267 (2013) 77–80.

[6] **N.A. Bert, A.B. Freidin, A.L. Kolesnikova, I.K. Korolev, A.E. Romanov,** On strain state and pseudo-moire TEM contrast of InSb quantum dots coherently grown on InAs surface, Phys. Status Solidi A-Appl. Mat. 207 (2010) 2323–2326.

[7] **Y. Androussi, T. Benabbas, A. Lefebvre,** Moiré-like fringes in transmission electron microscopy images of coherently strained semiconductor islands, Ultramicroscopy. 93 (2002) 161–167.

[8] **Y. Chen, X.W. Lin, Z. Liliental-Weber, J. Washburn, J.F. Klem, J.Y. Tsao,** Dislocation

formation mechanism in strained InxGa1–xAs islands grown on GaAs(001) substrates, Appl. Phys. Lett. 68 (1996) 111–113.

[9] **P. Hirsch, A. Howie, R.B. Nicholson, D.W. Pashley, M.J. Whelan,** Electron Microscopy of Thin Crystals. New York: Robert E. Krieger Publishing, 1968.

[10] **D.B. Williams, C.B. Carter,** Trans-mission Electron Microscopy, A Textbook for Materials Science, Part 2, New York, Plenum Press, 2009.

THE AUTHORS

SOKURA Liliya A.
Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
sokura@mail.ioffe.ru

NEVEDOMSKIY Vladimir N.
Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
nevedom@mail.ioffe.ru

BERT Nikolay A.
Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26, Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
Nikolay.Bert@mail.ioffe.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.2
УДК: 004.032.26

А.А. Пастухов

Национальный исследовательский университет
«Московский институт электронной техники»

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК С ЛАЗЕРНЫМ ЗАЖИГАНИЕМ

В статье рассмотрена возможность применения искусственных нейронных сетей в задачах прогнозирования значений параметров модельной установки с лазерным зажиганием. Представлены основные этапы построения нейросетевой прогностической модели. Приведен пример синтеза нейронной сети с целью указанного прогнозирования. Показаны эффективность рассматриваемого подхода и возможность его применения для построения прогноза значений параметров различных элементов ракетных двигателей.

ИСКУССТВЕННАЯ НЕЙРОННАЯ СЕТЬ, РАКЕТНЫЙ ДВИГАТЕЛЬ, ЛАЗЕРНОЕ ЗАЖИГАТЕЛЬНОЕ УСТРОЙСТВО, ПРОГНОСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ.

Введение

Стремительные темпы развития современных лазерных установок (высокая мощность и малый вес) диктуют и новый спектр их применения в самых разных областях науки и техники. В частности, представляется возможным осуществлять поджиг компонентов топлива с помощью специального лазерного устройства. Такое использование лазера является альтернативой традиционному способу инициации горения топлива в ракетном двигателе.

Это приспособление, называемое лазерным зажигательным устройством (ЛЗУ), было разработано в Государственном научном центре (ГНЦ) Федерального государственного унитарного предприятия (ФГУП) «Центр Келдыша» совместно с научно-производственным объединением (НПО) «Энергомаш». С 2011 года в НПО «Энергомаш» начались работы по стендовой отработке ЛЗУ [1].

Процесс разработки и принятия решения об использовании новых элементов ракетных двигателей, таких как ЛЗУ, требует проведения большого количества стендовых натурных испытаний, связанных с существенными финансовыми и временными затратами. Ситуация также усугубляется сложностью испытываемой системы, в которой настраиваемых параметров установки более пятнадцати, наблюдаемых – порядка десяти; кроме того, требуется выполнение около сотни попутных измерений. С преодолением всех вышеперечисленных трудностей, за период с 2011 по 2013 год было проведено всего 34 испытания.

Для сокращения материальных и временных затрат представляется актуальным применение математических методов и алгоритмов для прогнозирования отклика на входное воздействие как системы в целом, так и отдельных ее элементов, позволяющее сократить количество натурных испытаний.

Целью настоящего исследования является синтез обучаемой нейронной сети для

прогнозирования значений параметров модельной энергетической установки с лазерным зажиганием.

Преимущества обучаемой нейронной сети

В представленной работе прогностическая модель работы системы построена на использовании обучаемой нейронной сети [2], которая обладает следующими преимуществами.

Во-первых, сеть отличается простотой каждого вычислительного элемента (нейрона). Нейрон представляет собой взвешенный сумматор, выход которого определяется как

$$y = f(u),\ u = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + w_0 x_0,$$

где x_i — i-й вход нейрона, w_i — синаптический вес связи i-го входа нейрона, f — активационная функция.

Вход x_0, представляющий собой фиксированный входной сигнал +1 и соответствующий ему вес w_0, называют смещением нейрона.

Возможна индивидуальная настройка каждого нейрона, позволяющая строить компактные математические модели для решения задач прогнозирования и выявления нелинейных функциональных связей. Наличие большого числа связей между нейронами, с одной стороны, требует увеличения количества вычислений, но с другой стороны, позволяет довольно точно аппроксимировать функции любой сложности.

Во-вторых, для сети характерна гибкость. Нейронная сеть — совокупность нейронов, соединенных взвешенными связями. Существует множество видов нейронных сетей, которые различаются между собой топологией связей, видом нейронов и т. п. Кроме того, возможно построение новых типов нейронных сетей путем, например, создания гибридов из уже существующих типов. Это позволяет решать разнообразные задачи, в том числе задачу прогнозирования.

В-третьих, имеется возможность уточнения модели при поступлении новых данных. Существует модульный принцип обучения искусственной нейронной сети, при котором не происходит переобучения всей системы при поступлении новых данных, а изменению подвергаются лишь отдельные нейроны и связи. Это важно, так как обучение является сложным процессом и при полном переобучении существует вероятность потери сетью обобщающих способностей.

В настоящей работе в качестве прогнозируемого параметра была выбрана температура газа в замерной шайбе модельной установки с лазерным зажигательным устройством. Выбор этого параметра обусловлен тем, что его значение определяет результат (исход) эксперимента в целом (успех либо неуспех). Кроме того, данные по указанной температуре газа имеются для всех испытаний (датчик ни разу не выходил из строя).

Этапы построения нейросетевой прогностической модели

Приведем перечень этапов построения этой модели.

1. Подготовка исходных данных.
2. Анализ факторного пространства и выбор переменных.
3. Подготовка факторного пространства.
4. Построение модели нейронной сети.
5. Обучение нейронной сети.

Подготовка исходных данных. Этот этап во многом определяет адекватность построенной модели. По данным, полученным в ходе испытаний, строится факторное пространство, включающее в себя измеряемые параметры модельной установки. Факторное пространство представляется в реляционном виде и разбивается на три группы.

Первая группа включает признаки и параметры, значения которых известны до проведения эксперимента. Цель формирования этой группы — обеспечение модели входными параметрами, позволяющими надежно различать условия разных экспериментов. В первую группу включены четыре параметра; обозначим ее как

$$A = \{A_1, A_2, A_3, A_4\},$$

где A_j — вектор-столбцы $A_j = (a_i^j)$, при этом i — порядковый номер эксперимента,

$i = 1, 2, ..., n$ (n – общее количество экспериментов);

$a_i^1 \in [15,18;\ 24,91]$ – температура горючего до мерного участка (измерялась в градусах Цельсия);

$a_i^2 \in [74,11;\ 198,60]$ – давление горючего перед мерным участком (кгс/см^2);

$a_i^3 \in [0,1016;\ 2,1500]$ – расход окислителя (кг/с);

$a_i^4 \in [0,1065;\ 0,3200]$ – расход горючего (кг/с).

Вторая группа включает значения параметров, измеряемых в ходе испытания, которые не являются критичными для получения результата (например, температура в служебных отсеках установки). Эти параметры обеспечивают избыточность исходных данных и используются для отработки и настройки модели. В эту группу включено четыре параметра, обозначим ее

$$B = \{B_1, B_2, B_3, B_4\},$$

где B_j – вектор-столбцы $B_j = (b_i^j)$, при этом i – порядковый номер эксперимента, $i = 1, 2, ..., n$ (n – общее количество экспериментов);

$b_i^1 \in [0,325;\ 58,51]$ – соотношение расходов компонентов (кг/с);

$b_i^2 \in [226,71;\ 322,60]$ – давление в емкости окислителя (кгс/см^2);

$b_i^3 \in [74,82;\ 203,14]$ – давление в емкости горючего (кгс/см^2);

$b_i^4 \in [117,46;\ 161,66]$ – давление в емкостях охлаждающей жидкости (кгс/см^2).

Назовем $X = A \cup B$ множеством входных параметров. Его можно задать матрицей

$$X = \begin{pmatrix} a_1^1 & ... & a_1^k & b_1^1 & ... & b_1^l \\ ... & ... & ... & ... & ... & ... \\ a_n^1 & ... & a_n^k & b_n^1 & ... & b_n^l \end{pmatrix},$$

где k – число параметров первой группы факторного пространства, l – число параметров второй группы. Число строк матрицы равно n, число столбцов $m = k + l$. В данном случае $n = 29$, $m = 8$.

Третья группа параметров включает экспериментальные значения величин, измерение которых определяет результат. Они служат выходными данными в модели эксперимента. В данной работе был выбран единственный прогнозируемый выходной параметр – температура газа в замерной шайбе. Группу $Y = \{y_i\}$ назовем множеством выходных параметров. Здесь i – порядковый номер эксперимента, $i = 1, 2, ..., n$ (n – общее количество экспериментов); $y_i \in [-64,02;\ 993,52]$ – температура газа в замерной шайбе, °С.

Множество выходных параметров представляется в виде

$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ ... \\ y_n \end{pmatrix},$$

где $n = 29$.

Таким образом, факторным пространством модели является множество $V = X \cup Y$.

Анализ факторного пространства и выбор переменных. Для построения нейронной сети факторное пространство можно преобразовать таким образом, чтобы оно было представлено сокращенным количеством «эффективных» признаков. В результате должна остаться только часть данных, несущая максимальное количество информации. Это позволяет сократить количество входных признаков факторного пространства с минимальными потерями информации, что в свою очередь впоследствии может способствовать упрощению архитектуры нейронной сети. Кроме того, сокращение количества признаков позволяет спроецировать многомерное факторное пространство на пространство меньшей размерности, что значительно упрощает процедуру его анализа.

Возникает вопрос о существовании оптимального обратимого линейного преобразования пространства исходных данных, позволяющего сократить его размерность. Простое сокращение некоторого количества параметров факторного пространства приведет к тому, что среднеквадратичная ошибка такого преобразования будет равна сумме дисперсий исключенных элементов. Следовательно, преобразование должно иметь малую дисперсию своих отдельных компонентов.

Анализ главных компонент (в теории информации он называется преобразованием Карунена – Лоэва) [2] позволяет максимизировать скорость уменьшения дисперсии и таким образом максимизировать вероятность правильного выбора исключаемых параметров.

Математическое содержание метода главных компонент – это спектральное разложение ковариационной матрицы, которое совпадает с сингулярным разложением матрицы исходных данных [3].

Сингулярным разложением матрицы исходных данных X называется ее представление в виде произведения:

$$X = S \cdot \Sigma \cdot C^T, \qquad (1)$$

где S – ортогональная матрица, образованная собственными векторами s_i матрицы $X \cdot X^T$, соответствующими собственным значениям λ_i, то есть $X \cdot X^T s_i = \lambda_i s_i$; C – ортогональная матрица, образованная собственными векторами c_i матрицы $X^T \cdot X$, соответствующими собственным числам λ_i, то есть $X^T \cdot X c_i = \lambda_i c_i$; Σ – положительно определенная диагональная матрица с элементами

$$\sigma_1 \geq ... \geq \sigma_i \geq ... \geq \sigma_r \geq 0,$$

где $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$; $i = 1, 2, ..., r = \mathrm{rank}(X)$. В данном случае $r = 8$.

Столбцы матрицы S называются левыми сингулярными векторами. Строки матрицы C называются правыми сингулярными векторами.

Возвращаясь к разложению (1) с учетом того, что элементы матрицы Σ упорядочены по убыванию, получаем, что наибольший вклад в матрицу X вносят первые столбцы матрицы S и первые строки матрицы C, так как им соответствуют наибольшие значения матрицы Σ.

Связь между сингулярным разложением и методом главных компонент определяется формулами:

$$T = S \cdot \Sigma, \qquad (2)$$

где T – матрица счетов, содержащая проекции исходных данных на подпространство главных компонент;

$$P = C, \qquad (3)$$

где P – матрица нагрузок, она есть матрица перехода из исходного пространства переменных X в пространство главных компонент.

Количество экспериментальных реализаций – малое (всего 29), а это критично для обучения нейронных сетей с большим количеством настраиваемых параметров, поэтому представляется целесообразным сокращение количества параметров факторного пространства.

Факторное пространство, включающее данные по 29 испытаниям, проецируется на пространство главных компонент. Ре-

Таблица 1

Результаты анализа вклада собственных значений величин, полученных при 29 испытаниях

N	V	Доля в общей дисперсии, %	Совокупное собственное значение	Совокупная доля в дисперсии, %
1	3,324898	41,56122	3,324898	41,5612
2	1,906212	23,82764	5,231109	65,3889
3	1,258792	15,73490	6,489902	81,1238
4	0,978690	12,23363	7,468592	93,3574
5	0,344825	4,31031	7,813417	97,6677
6	0,183848	2,29810	7,997265	99,9658
7	0,002400	0,03000	7,999666	99,9958
8	0,000334	0,00418	8,000000	100,0000

Обозначения: N – количество собственных значений (совпадает с номером компоненты), V – собственное значение величины.

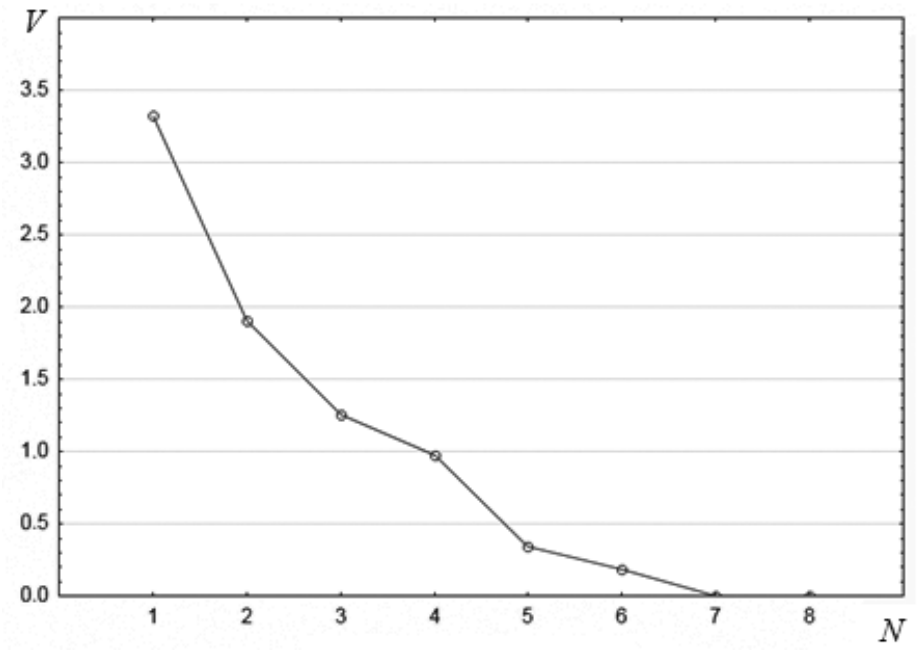


Рис. 1. Результаты проецирования пространства факторов на пространство главных компонент: N – количество собственных значений, V – собственное значение величины

зультаты представлены в табл. 1 и на рис. 1. Видно, что 81,12 % общей дисперсии обеспечивается первыми тремя главными компонентами. Компоненты 7 и 8 практически не вносят никакого вклада. Более 90 % от общей дисперсии обеспечивается первыми четырьмя главными компонентами, но в данном случае цель применения метода состоит в максимально возможном сокращении числа признаков факторного пространства.

Таким образом, целесообразно рассматривать только первые три главные компоненты.

Для того чтобы понять, какие факторы следует оставить в пространстве признаков, анализируется матрица факторных нагрузок (табл. 2). Видно, что первый фактор имеет

Таблица 2

Матрица факторных нагрузок для трех главных компонент

	F_1	F_2	F_3
X_1	0,360048	0,044197	0,161626
X_2	0,655228	**0,703099**	–0,227213
X_3	**–0,841152**	0,440810	–0,257437
X_4	0,558408	–0,181547	**–0,713014**
X_5	**–0,839159**	0,424273	–0,241175
X_6	–0,597731	–0,345838	–0,633068
X_7	0,661975	0,694228	–0,242636
X_8	0,496894	–0,633303	–0,297604

Обозначения: X_1, X_2, ..., X_8 – столбцы множества входных параметров X; F_1, F_2, F_3 – соответственно первая, вторая и третья главные компоненты.

Таблица 3

Корреляционная матрица факторного пространства

	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_6	X_7	X_8
X_1	1,000000	0,149644	–0,231507	0,204460	–0,301840	–0,173092	0,153268	–0,056537
X_2	0,149644	1,000000	–0,198955	0,342744	–0,198955	**–0,483203**	**0,999401**	–0,001569
X_3	–0,231507	–0,198955	1,000000	–0,342020	**0,983270**	**0,488857**	–0,203656	**–0,601238**
X_4	0,204460	0,342744	–0,342020	1,000000	**–0,405599**	0,160197	0,364045	**0,456364**
X_5	–0,301840	–0,198955	**0,983270**	**–0,405599**	1,000000	**0,463971**	–0,198496	**–0,511579**
X_6	–0,173092	**–0,483203**	**0,488857**	0,160197	**0,463971**	1,000000	**–0,475425**	0,030348
X_7	0,153268	**0,999401**	–0,203656	0,364045	–0,198496	**–0,475425**	1,000000	0,007380
X_8	–0,056537	–0,01569	**–0,601238**	**0,456364**	**–0,511579**	0,030348	0,007380	1,000000

Обозначения: X_1, X_2, ..., X_8 – столбцы множества входных параметров X. Жирным шрифтом выделены значения, превышающие по модулю 0,4.

высокие корреляции с элементами 3 и 5 матрицы исходных данных X, второй фактор – с элементом 2, третий – с элементом 4 (значения выделены жирным шрифтом).

Здесь следует отметить, что переменная 5 (соотношение расходов компонентов) имеет достаточно высокие корреляции с элементами 3 и 4. Это демонстрирует корреляционная матрица факторного пространства, представленная в табл. 3.

Такой результат не удивителен, так как переменная 5 представляет собой отношение переменной 3 к переменной 4.

Таким образом, в конечное факторное пространство для модели включены три переменные: 2, 3 и 4. Переменная 5 исключена из рассмотрения, так как равна отношению переменной 3 к переменной 4.

Подготовка факторного пространства. Прежде чем использовать факторное пространство в качестве данных для построения нейронной сети, необходимо произвести его подготовку, которая состоит в решении проблемы насыщения нейронов. При достижении насыщения значение, вычисляемое нейроном, становится близким к краю области значений функции активации, что приводит к замедлению обучения и параличу нейронной сети.

Данные, используемые при обучении нейронной сети, нормируются таким образом, чтобы вход нейрона не попал в область малой производной функции активации [5], в качестве которой используется сигмоидальная функция. В данном случае входные параметры принимают как положительные, так и отрицательные значения, поэтому в качестве функции активации выбран гиперболический тангенс

$$f(x) = \mathrm{th}(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}.$$

Эта функция непрерывно дифференцируема на всей числовой оси

$$f'(x) = 1 - \mathrm{th}^2(x)$$

и позволяет решать проблему шумового насыщения, что необходимо для корректного функционирования алгоритмов обучения.

Кроме того, желаемый отклик нейрона выходного слоя должен быть смещен на некоторую величину от границы области значений функции активации внутрь. Это достигается путем инициализации смещения нейрона ненулевыми значениями.

Последний этап подготовки данных включает начальную инициализацию свободных параметров (весов) нейронной сети. Инициализация проводилась методом Нгуен – Видроу [6].

Далее можно приступать к непосредственному построению модели нейронной сети.

Построение модели нейронной сети. В работе [7] был проведен анализ нейронных сетей нескольких типов применительно к решению различных задач. Для решения задачи прогнозирования подходят два типа сетей: многослойный персептрон (MLP – multilayer perceptron) и сеть радиально-базисных функций (RBF – radial basis function). В общем случае сети RBF дают более точный результат, но требуют большого количества экспериментальных данных. При относительно малой размерности обучающей выборки (что имеет место в данном исследовании) предпочтение следует отдать сетям типа MLP.

Главная задача при построении модели нейронной сети – это определение количества нейронов скрытого слоя.

Оценка количества связей сети определяется по формуле, которая следует из теорем Арнольда – Колмогорова – Хехт-Нильсена [8]:

$$\frac{mN}{1+\log_2 N} \le L_w \le m\left(\frac{N}{m}+1\right)(n+m+1)+m, \quad (4)$$

где n, m – размерности входного и выходного сигнала соответственно; N – число элементов обучающей выборки; L_w – общее количество связей нейронной сети.

Если учесть, что все нейроны каждого слоя соединены со всеми нейронами следующего слоя и связи между нейронами внутри одного слоя отсутствуют, а также принять во внимание выражение (4), то тогда число нейронов в скрытом слое определяется следующими формулами [9]:

$$L = \frac{L_w}{n+m}; \quad (5)$$

$$\frac{22}{1+\log_2 22} \le L_w \le 116; \quad (6)$$

$$\frac{22}{1+\log_2 22} \approx 4. \quad (7)$$

Таким образом, число связей сети L_w лежит в диапазоне $4 \le L_w \le 116$. С помощью формулы (6) получим, что число L скрытых нейронов сети лежит в диапазоне $1 \le L \le 29$ (округлены до целого значения).

В работе [2] отмечено, что для хорошего обобщения достаточно, чтобы размер обучающего множества удовлетворял соотношению:

$$N = O(W / \varepsilon), \quad (8)$$

где W – общее количество свободных параметров, ε – допустимая точность ошибки классификации, N – размер обучающего множества.

К сожалению, как отмечалось выше, в нашем исследовании имеется всего 29 экспериментальных реализаций. Поэтому для достижения хотя бы значения $\varepsilon \approx 0{,}35$ при трех входных параметрах, количество нейронов скрытого слоя должно быть не более двух. В связи с этим примем количество нейронов скрытого слоя L равным двум. Топология полученной нейронной сети показана на рис. 2.

После формирования топологии нейронной сети можно приступать к послед-

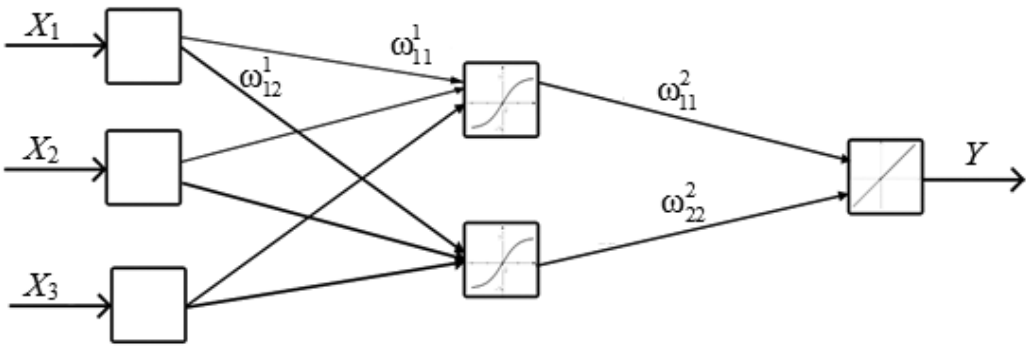


Рис. 2. Топология нейронной сети для прогнозирования температуры газа в замерной шайбе установки с лазерным зажигательным устройством; X_i – i-й вход сети, Y – выход сети, ω_{ij}^k – вес связи i-го нейрона k-го слоя с j-м нейроном (k + 1)-го слоя

нему этапу построения нейросетевой прогностической модели – обучению.

Обучение нейронной сети. В математической интерпретации задача обучения нейронной сети сводится к нахождению функциональной зависимости

$$F : F(X_i) \to y_i, \ \mathrm{i} = 1, 2, ..., 29,$$

где X_i – i-я строка матрицы входных параметров X; y_i – i-я строка матрицы выходных параметров (в данном случае i-й элемент вектор-столбца) Y.

Достигается это минимизацией целевой функции ошибки нейронной сети, вычисляемой методом наименьших квадратов:

$$E(\{\omega_{ij}\}) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n}(r_k - y_k)^2, \qquad (9)$$

где r_k – значение k-го выхода нейронной сети, y_k – целевое значение k-го выхода нейронной сети, n – число нейронов в выходном слое, ω_{ij} – вес связи, соединяющий нейрон i с нейроном j.

Построение прогноза температуры газа в замерной шайбе

Для создания прогностической модели использовалось 22 набора данных из имеющихся 29, полученных в результате испытаний ЛЗУ, 3 набора использовались для независимого тестирования сети, а оставшиеся 4 – для валидации обучения.

Каждый набор включает в себя пару: входной вектор (строка из матрицы входных параметров X) и выходное значение

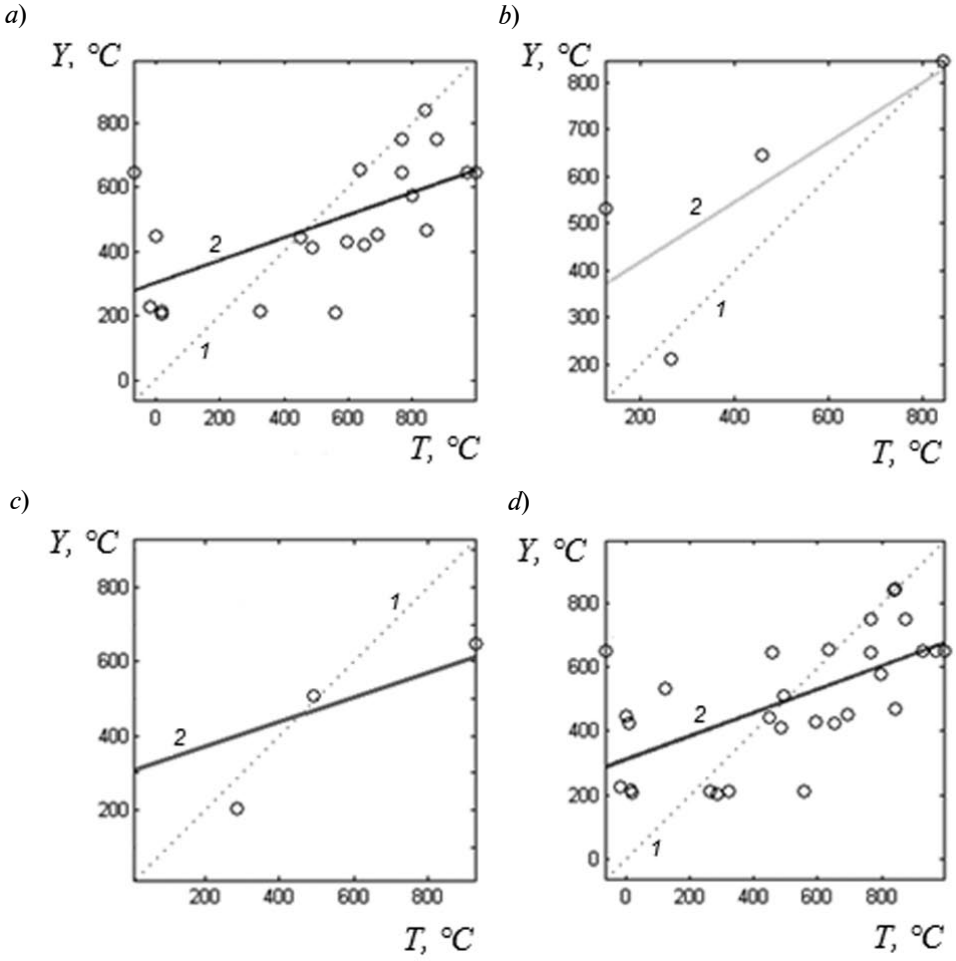


Рис. 3. Графики регрессии обучения нейронной сети (зависимости фактических величин Y от целевых T): результаты обучения (*a*), проверки на переобучение (*b*) и проверки на тестовом множестве (*c*), а также общий результат (*d*); *1* – прямая $Y = T$, *2* – прямая, проходящая через центр облака данных; символы – данные испытаний

Таблица 4

Результаты обучения нейронной сети

График на рис. 3	R	$Y(T)$, °C
a)	0,62102	$0{,}35T + 3{,}0 \cdot 10^2$
b)	0,75051	$0{,}64T + 2{,}9 \cdot 10^2$
c)	0,68722	$0{,}33T + 3{,}0 \cdot 10^2$
d)	0,62025	$0{,}36T + 3{,}1 \cdot 10^2$

Обозначения: R – показатель отношения «значение выхода нейронной сети / целевое значение», $Y(T)$ – приближенная линейная зависимость фактических величин от целевых величин T.

(соответствующее значение из вектора выходных параметров Y).

Обучение проводилось с использованием алгоритма обратного распространения ошибки, который представляет собой модификацию метода градиентного спуска [2]; приращение значений весовых коэффициентов на каждой итерации определялось по формуле

$$\Delta\omega_{ij} = -\eta \frac{dE}{d\omega_{ij}}, \qquad (10)$$

где ω_{ij} – весовой коэффициент связи, соединяющей i-й нейрон слоя $k-1$ с j-м нейроном слоя k; $0 < \eta < 1$ – коэффициент скорости обучения.

В соответствии с алгоритмом, процедура обучения завершается либо по достижении ошибки заданного значения, либо по окончании пятидесяти эпох обучения.

На рис. 3 представлены графики регрессии обучения нейронной сети, построенные с помощью инструментального средства NNtool пакета MATLAB.

В табл. 4 приведены результаты анализа графиков *2* на рис. 3 для синтезированной нейронной сети, в том числе соотношения фактических и целевых значений.

При $R = 1$ существует точная линейная зависимость между выходом нейронной сети и целевым значением, если же R близко к нулю, то между этими значениями линейной зависимости нет [10].

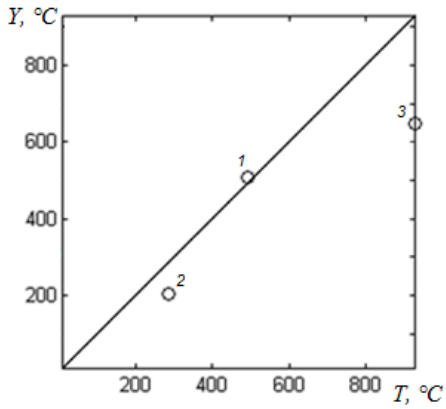


Рис. 4. Графическая оценка результата прогнозирования температуры для тестового множества:
T – целевое значение, Y – фактическое значение, спрогнозированное сетью, линия – тренд; точки *1* – *3* – элементы тестового множества

Таблица 5

Проверка прогноза температуры газа для реализаций, которые не участвовали в обучении нейронной сети

Точка на рис. 4	Значение, °C		Отклонение от значения	
	T	Y	$T - Y$, °C	$2 \cdot 10^2 \lvert T - Y \rvert / (T + Y)$, %
1	506,3	492,7	13,6	3
2	285,6	202,3	83,3	34
3	651,2	929,3	−278,1	35

Для тестового множества (три экспериментальные реализации, которые не участвовали в обучении) был получен результат, представленный на рис. 4 и в табл. 5.

Заключение

Следует констатировать, что полученная модель малопригодна для точного предсказания значения параметра, поскольку, как и ожидалось, относительные отклонения значений из тестового и обучающего множеств от целевого значения составили в среднем около 35 %. Такая высокая величина связана с малым количеством обучающих примеров.

Однако целью данного исследования являлась только демонстрация применимости аппарата искусственных нейронных сетей в данной предметной области, а не создание точной модели. Выполнение последней задачи невозможно, если мы располагаем таким малым количеством экспериментальных реализаций.

Следует особо отметить, что с увеличением числа проведенных натурных испытаний (в том числе с отрицательным исходом) появляется возможность расширить факторное пространство и, как следствие, улучшить построенную модель.

Таким образом, в настоящей работе представлено построение нейросетевой прогностической модели на базе экспериментальных данных, способной выделять функциональные связи между параметрами без какой-либо информации об их предыстории. Построенная модель позволяет прогнозировать выходной параметр, соответствующий результатам испытания модельной установки с лазерным зажиганием, причем с заранее оцененной точностью.

Полученные результаты указывает на принципиальную возможность создания прогностических моделей узлов и агрегатов испытываемых ракетных двигателей. Модель можно создать с помощью аппарата искусственных нейронных сетей и использования довольно обширной базы данных проведенных испытаний.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Хромцова А.** Лазеры зажигают двигатели // Российский космос. Август. 2013. № 8(92). С. 2–4.

[2] **Хайкин С.** Нейронные сети: полный курс. 2-е изд. Пер. с англ. М.: ИД «Вильямс», 2008. 1104 с.

[3] **Айвазян С.А., Бухштабер В.М., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д.** Прикладная статистика. Классификация и снижение размерности. М.: Финансы и статистика, 1989. 607 с.

[4] **Богачев К.Ю.** Практикум на ЭВМ. Методы приближения функций. М.: Изд-во ЦПИ при механико-математическом ф-те МГУ, 2002. 192 с.

[5] **Медведев В.С., Потемкин В.Г.** Нейронные сети. М.: Диалог МИФИ, 2001.496 с.

[6] **LeCun Y.** Efficient learning and second-order methods. MA: MIT Press, 1993. 71 p.

[7] **Родионов П.Е.** Методика извлечения знаний в задачах анализа рядов динамики с использованием нейронных сетей: дис. ... канд. техн. наук: 05.13.17: Москва, 2003. 169 с.

[8] **Hecht-Nielsen R.** Counterpropagation networks// Appl. Optics. 1987. Vol. 26. No. 23. Pp. 4979 –4984.

[9] **Девятых Д.В., Гергет О.М., Михаленко И.В.** Применение искусственных нейронных сетей для прогнозирования развития перинатального поражения нервной системы // Известия ВолгГТУ. 2013. Вып. 16. № 8 (111). С. 77–80.

[10] **Beale M.H., Hagan M.T., Demuth H.B.** Neural Network Toolbox User's Guide [http://www.mathworks.com/help/pdf_doc/nnet/nnet_ug.pdf] // MathWorks, Inc. 2014. Pp. 2-27–28.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ПАСТУХОВ Алексей Андреевич – *аспирант кафедры высшей математики № 1 Национального исследовательского университета «МИЭТ».*

124498, Российская Федерация, г. Москва, Зеленоград, пр. 4806, д. 5

pastuhov1992@gmail.com

Pastukhov A.A. PREDICTING THE PARAMETERS OF ENERGY INSTALLATIONS WITH LASER IGNITION: NEURAL NETWORK MODELS.

The article considers the possibility of using artificial neural networks for prediction of the parameters of the model energy installation with laser ignition. The main stages of creating a prognostic model based on artificial neural network have been presented. Input data were analyzed by principal component method. The synthesized neural network was built up to predict the parameter value of the model in question. The artificial neural network was trained by back-propagation algorithm. The efficiency of the artificial neural networks and their applicability to prediction of the parameter values of the various elements of rocket engines were demonstrated.

ARTIFICIAL NEURAL NETWORK, ROCKET ENGINE, LASER IGNITION DEVICE, PROGNOSTIC MODEL.

REFERENCES

[1] **A. Khromtsova**, Lasers ignite the engines, Ross. Cosmos. 8(92) (2013) 2–4.

[2] **S. Khajkin**, Nejronnye seti: polnyj kurs [Neural networks: a complete course,], 2nd Ed., ID «Vil'yams», Moscow, 2008.

[3] **S.A. Ajvazyan, V.M. Bukhshtaber, I.S. Enyukov, L.D. Meshalkin**, Prikladnaya statistika. Klassifikatsiya i snizhenie razmernosti [Applied statistics. Classification and dimension reduction], Finansy i statistika, Moscow, 1989.

[4] **K.Yu. Bogachev**, Praktikum na EVM. Metody priblizheniya funktsij [Computer workshop. Methods of function approximation]. Izd-vo TsPI pri mekhaniko-matematicheskom f-te MGU, Moscow, 2002.

[5] **V.S. Medvedev, V.G. Potemkin**, Nejronnye seti [Neural networks]. Dialog MIFI, Moscow, 2001.

[6] **Y. LeCun**, Efficient learning and second-order methods. MIT Press,Cambridge, MA, 1993.

[7] **P.E. Rodionov**, Metodika izvlecheniya znanij v zadachakh analiza ryadov dinamiki s ispol'zovaniem nejronnykh setej: dis. ... kand. tekhn. nauk: 05.13.17 [Methods of extraction of knowledge for the analysis of time series using neural networks], Moscow, 2003.

[8] **R. Hecht-Nielsen**, Counterpropagation networks, Appl. Optics. 26 (23) (1987) 4979–4984.

[9] **D.V. Devyatykh, O.M. Gerget, I.V. Mikhalenko**, Primenenie iskusstvennykh nejronnykh setej dlya prognozirovaniya razvitiya perinatal'nogo porazheniya nervnoj sistemy [Aartificial neural network implementation for newborn nervous system perinatal damage diagnosing], Izvestiya VolgGTU. 16 (8) (111) (2013) 77–80.

[10] **M.H. Beale, M.T. Hagan, H.B. Demuth**, Neural Network Toolbox User's Guide, MathWorks, Inc., available at: http://www.mathworks.com/help/pdf_doc/nnet/nnet_ug.pdf, 2014, pp. 2-27–28.

THE AUTHOR

PASTUKHOV Alexey A.
National Research University of Electronic Technology
5 Pass. 4806, Zelenograd, Moscow, 124498, Russian Federation
pastuhov1992@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.3
УДК: [519.6+004.942]:621.643

Е.А. Михайловский, Н.Н. Новицкий

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ МЕТОД УЗЛОВЫХ ДАВЛЕНИЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ПОТОКОРАСПРЕДЕЛЕНИЯ В ГИДРАВЛИЧЕСКИХ ЦЕПЯХ ПРИ НЕТРАДИЦИОННЫХ ЗАМЫКАЮЩИХ СООТНОШЕНИЯХ

В статье предлагается методика численного решения задачи потокораспределения в гидравлических цепях с сосредоточенными параметрами при произвольных замыкающих соотношениях. Представлены основные типы соотношений для законов изотермического установившегося течения среды по отдельным элементам гидравлической цепи, включая традиционные, неявно заданные по расходу и зависимые от давления рабочей среды. К нетрадиционным соотношениям введены формальные условия применимости, обеспечивающие единственность решения в задачах потокораспределения. Для расчета потокораспределения предложен новый модифицированный метод узловых давлений, имеющий большую универсальность в отношении вида замыкающих соотношений, по сравнению с традиционным, и требующий меньших вычислительных затрат, по сравнению с известной методикой двойных циклов итераций. Приведены анализ и алгоритмизация нового метода, численный пример газотранспортной сети и результаты расчета.

ГИДРАВЛИЧЕСКАЯ ЦЕПЬ, ТРУБОПРОВОДНАЯ СИСТЕМА, ЗАДАЧА ПОТОКОРАСПРЕДЕЛЕНИЯ, МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, МОДЕЛЬ ПОТОКОРАСПРЕДЕЛЕНИЯ.

Введение

Трубопроводные системы энергетики тепло-, водо-, нефте-, газо-снабжения и т. п. представлены весьма широким спектром развивающихся во времени и пространстве объектов, которые различны по назначению, масштабам, принципам построения и условиям функционирования. Эффективное решение задач управления их развитием и функционированием имеет важное социально-экономическое значение и непосредственно связано с уровнем применения современных методов математического и компьютерного моделирования.

В Институте систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН разработан в рамках развиваемого здесь научного направления — теории гидравлических цепей [1—3] уникальный арсенал методов математического моделирования, расчета и оптимизации, которые потенциально применимы для трубопроводных систем различного типа и назначения. Вместе с тем, при создании конечных программно-вычислительных комплексов в разных организациях наблюдается дублирование работ по реализации этих методов. Это связано с необходимостью адаптации методов к прикладной специфике и сфере применения. Неизбежно затрачивается много времени и сил на отладку, развитие и сопровождение таких программно-вычислительных комплексов.

Для преодоления этих проблем мы предлагаем два взаимосвязанных пути:

1) переход на концепцию объектно-ориентированного моделирования трубопроводных систем [4, 5], что даст возможность отделить программные компоненты, реализующие общие методы расчета, от отвечающих за специфику трубопроводных систем или решаемой задачи;

2) развитие методов теории гидравлических цепей с ориентацией на эту концепцию.

Это позволит многократно применять однажды реализованные общие методы теории гидравлических цепей в разных

программно-вычислительных комплексах, развивать расчетные компоненты без их перепрограммирования и, в конечном итоге, — повысить оперативность внедрения методов теории гидравлических цепей для разных типов трубопроводных систем, классов решаемых задач и сфер применения.

В рамках изложенной выше концепции в данной статье рассматриваются вопросы унификации методов расчета потокораспределения в гидравлических цепях (ГЦ) с сосредоточенными параметрами для обеспечения независимости методов расчета от вида соотношений для законов течения среды по отдельным элементам трубопроводных систем.

В связи с этим излагаются следующие результаты исследований:

структуризация основных типов замыкающих соотношений (законов течения) для элементов ГЦ;

алгоритмизация нового метода расчета потокораспределения в ГЦ при произвольных замыкающих соотношениях;

численный анализ эффективности указанного нового метода.

Традиционная модель и задача потокораспределения

Традиционная модель установившегося изотермического потокораспределения в ГЦ включает законы Кирхгофа и замыкающие соотношения

$$Ax = Q, \quad A^T P = y, \quad y = f(x), \qquad (1)$$

где A — $[(m-1)\times n]$-матрица инциденций узлов и ветвей расчетной схемы с элементами $a_{ji} = 1(-1)$, если узел j является начальным (конечным) для ветви i, и $a_{ji} = 0$, если ветвь i не инцидентна узлу j; x, y — n-мерные векторы расходов и перепадов давления на ветвях расчетной схемы; $f(x)$ — n-мерная вектор-функция с элементами $f_i(x_i)$, $i = \overline{1,n}$, отражающими законы падения давления от расхода (законы течения) на ветвях ГЦ; Q — $(m-1)$-мерный вектор узловых расходов с элементами $Q_j > 0$ для притока в узел j, $Q_j < 0$ для отбора в узле j и $Q_j = 0$, если узел j — простая точка соединения ветвей; P — $(m-1)$-мерный вектор узловых давлений.

Задача состоит в определении векторов x, y, P при заданных матрице A, векторе Q, известном виде $f_i(x_i)$ для $i = \overline{1,n}$ и заданном давлении в одном из узлов (P_m), которое для простоты изложения полагается равным нулю.

Известны многочисленные методы и алгоритмы решения данной задачи, однако, как показано в монографии [1], базовыми являются два метода: контурных расходов и узловых давлений. Оба основаны на методе Ньютона, но с предварительным понижением порядка линеаризованных систем уравнений (1).

Так, классический метод узловых давлений (МД) [1] предполагает поиск решения (1) в пространстве узловых давлений и сводится к организации процесса

$$P^{k+1} = P^k + \Delta P^k,$$

на каждой k-й итерации которого поправка ΔP^k отыскивается из решения системы

$$A(f'_x)^{-1} A^T \Delta P^k = -u_1^k,$$

где $u_1^k = Ax^k - Q$; $x^k = \psi(y^k)$; $y^k = A^T P^k$; f'_x — диагональная матрица частных производных $\partial f_i / \partial x_i$, $i = \overline{1,n}$, в точке x^k; ψ — вектор-функция, обратная к f с элементами $\psi_i(y_i)$.

Отсюда видно, что вычислительная схема МД не зависит от вида функций $f_i(x_i)$, к которым предъявляются только требования монотонного возрастания для обеспечения единственности решения задачи потокорас пределения [1]. Однако особенности реализации МД связаны со спецификой вида $f_i(x_i)$ и соответственно $\partial f_i / \partial x_i$ и $\psi_i(y_i)$.

В традиционном случае

$$f_i(x_i) = s_i x_i \mid x_i \mid - Y_i,$$

где s_i — гидравлическое сопротивление ветви; $Y_i > 0$ — приращение давления на активных ветвях (например, с насосными станциями) и $Y_i = 0$ на пассивных (например, для трубопроводных участков).

Здесь мы имеем явные выражения

$$\partial f_i / \partial x_i = 2 s_i \mid x_i \mid,$$

$$\psi_i(y_i) = \sqrt{\mid y_i + Y_i \mid / s_i} \cdot \mathrm{sign}(y_i + Y_i).$$

Ниже рассматриваются два основных случая нетрадиционных замыкающих со-

отношений, начиная со случая неявных функций $\psi_i(y_i)$..

Замыкающие соотношения, неявные по расходу

Для иллюстрации причин разнообразия замыкающих соотношений рассмотрим известную формулу Дарси – Вейсбаха [6] для потери напора в трубопроводе:

$$h = \lambda(V)\frac{l}{d}\frac{V^2}{2g},$$

где d, l – диаметр и длина трубопровода; g – ускорение свободного падения; $V = V(x)$ – скорость течения жидкости, x – массовый расход.

Здесь коэффициент гидравлического сопротивления λ зависит от числа Рейнольдса $\mathrm{Re}(V) = Vd / \nu$, где ν – коэффициент кинематической вязкости жидкости, который для изотермического течения полагается константой.

Для вычисления λ, в свою очередь, имеется множество формул, отражающих назначение трубопровода, его тип, материал внутреннего покрытия, срок службы, режим течения среды (ламинарный, переходный, турбулентный) и т. п. В качестве примера в табл. 1 приведены некоторые распространенные в России и за рубежом формулы для коэффициента λ и его производной по скорости.

Потеря напора на местных сопротивлениях определяется по формуле Вейсбаха [6]:

$$h = \frac{\zeta}{2g}V^2,$$

где в случае регулирующих элементов для определения коэффициента местного сопротивления ζ могут потребоваться аппроксимирующие зависимости. Например, для задвижки приемлема следующая зависимость:

$$\zeta = a(1-r)^{-C} - b,$$

где r – степень прикрытия задвижки; a, b, c – коэффициенты, полученные путем аппроксимации (в том числе «кусочной») таблично заданной характеристики.

Обобщая случаи наличия местных сопротивлений (включая регулируемые) на трубопроводе произвольного типа, для i-й пассивной ветви ГЦ можно записать, что

$$f_i(x_i) = s_i(x_i) \mid x_i \mid x_i, \qquad (2)$$

где

Таблица 1

Формулы и производные для коэффициента гидравлического сопротивления

Наименование формулы	λ	λ'_V
Шифринсона [7]	$0,11\left(\frac{k_e}{d}\right)^{0,25}$	0
Прандтля – Никурадзе [8, 9]	$\left(1,14 + 2\lg\frac{d}{k_e}\right)^{-2}$	0
Кольбрука–Уайта [6]	$\left[-2\lg\left(\frac{k_e}{3,7d} + \frac{2,51}{\mathrm{Re}(V)\sqrt{\lambda}}\right)\right]^{-2}$	$-\frac{10,04\lambda}{V\left[\left(\frac{k_eV}{3,7\nu} + \frac{2,51}{\sqrt{\lambda}}\right)\ln(10) + 5,02\right]}$
Альтшуля [6, 8]	$0,11\left(\frac{k_e}{d} + \frac{68}{\mathrm{Re}(V)}\right)^{0,25}$	$-1,87\left(\frac{k_e}{d} + \frac{68\nu}{\mid V \mid d}\right)^{-0,75}\frac{\nu}{d \mid V \mid V}$
Шевелева [10]	$A_1\left(\frac{A_0}{d} + \frac{C}{Vd}\right)^m$	$-\frac{A_1mC}{(A_0V + C)^{1-m}d^mV^{1+m}}$

Обозначения: k_e – коэффициент эквивалентной шероховатости; A_0, A_1, C, m – коэффициенты, зависящие от материала трубы и режима течения.

$$s_i(x_i) = \left(\lambda_i(x_i) + \zeta_i^{\Sigma}\frac{d_i}{l_i}\right)\frac{8l_i}{\rho\pi^2 d_i^5}$$

– сопротивление ветви, так как

$$V_i = 4|x_i| / (\pi d_i^2 \rho), \quad y_i = \rho g h_i;$$

здесь ρ – плотность транспортируемой среды; ζ_i^{Σ} – сумма коэффициентов местных сопротивлений.

При этом

$$f'_{x,i} = \frac{df_i}{dx_i} = (2s_i + s'_{x,i}x_i)\,|\,x_i\,|,$$

где

$$s'_{x,i} = \frac{ds_i}{dx_i} = \frac{ds_i}{d\lambda_i}\frac{dV_i}{dx_i}\frac{d\lambda_i}{dV_i},$$

$$\frac{ds_i}{d\lambda_i} = \frac{8l_i}{\rho\pi^2 d_i^5}, \quad \frac{dV_i}{dx_i} = \frac{4}{\pi d_i^2 \rho}.$$

Таким образом, получение $f'_{x,i}$ для трубопровода произвольного типа и назначения требует лишь конкретизации $\lambda'_{V,i}$ (см. табл. 1).

Гидравлические характеристики активных ветвей, в общем случае, задаются алгебраическими полиномами вида

$$f_i(x_i) = \sum_{q=0}^{K_i} a_{q,i}\,|\,x_i\,|^{(b_{q,i}-1)}\,x_i,$$

когда

$$f'_{x,i} = \sum_{q=0}^{K_i}(b_{q,i}-1)a_{q,i}\,|\,x_i\,|^{(b_{q,i}-2)}.$$

Однако они могут различаться показателями степеней $b_{q,i}$, числом K_i и составом слагаемых (при принудительном назначении $a_{q,i} = 0$ для некоторых q). Также может применяться «кусочная» аппроксимация одной характеристики различными полиномами.

Ранее случаи типа (2) относились к классу ГЦ с переменными параметрами, для которых при расчете потокораспределения применима методика двойных циклов итераций [1]. Согласно этой методике, функции $s_i(x_i)$ пересчитываются на внешнем цикле, а на внутреннем применяются базовые методы узловых давлений или контурных расходов при фиксированных значениях s_i.

Изложенная выше техника работы с производными неявных по расходу зависимостей $y_i = f_i(x_i)$ позволяет избежать внешнего итерационного цикла, что резко сокращает вычислительные затраты [4].

Вычисление расхода x_i^k по заданному перепаду давлений y_i^k в случае неявных функций типа (2) может быть выполнено итерационно, например, с помощью методов простой итерации, где

$$x_i^{t+1} = \sqrt{\frac{|\,y_i^k\,|}{s(x_i^t)}}\cdot \mathrm{sign}(y_i^k),$$

или Ньютона, согласно которому

$$x_i^{t+1} = x_i^t + \frac{u_i^t}{(f'_{x,i})^t},$$

где k – индекс итерации расчета потокораспределения, t – индекс итерации отыскания x_i^k, $u_i^t = y_i^k - f_i(x_i^t)$ – невязка.

При $t = 0$ принимается, что $x_i^t := x_i^{k-1}$.

Как известно, высокая скорость сходимости метода Ньютона имеет место при наличии «удачного» начального приближения. Сходимость метода простой итерации в данном случае, наоборот, выше вдали от решения. Поэтому оказался эффективным комбинированный метод, состоящий в однократном применении метода простой итерации перед применением метода Ньютона.

Рис. 1 иллюстрирует процессы сходимости трех предложенных вариантов на примере трубопровода при y_i^k = 5,3085 м вод.ст., d = 300 мм, l = 1000 м; коэффициент λ определен по формуле Шевелева для новых стальных труб (A_1 = 0,0159; A_0 = 1; C = 0,684; m = 0,226), при начальном приближении x_i^0 = 800 кг/с и решении x_i^k = 71 кг/с. Видно, что применение комбинированного метода дает ощутимый выигрыш, а само решение с приемлемой точностью ($u_i^t < 10^{-4}$ м вод.ст.) получено всего за три итерации.

Таким образом, в случае неявных функций $\psi_i(y_i)$ вычислительная схема МД остается без изменений, за исключением применения специальной техники на этапах расчета f'_k и x^k.

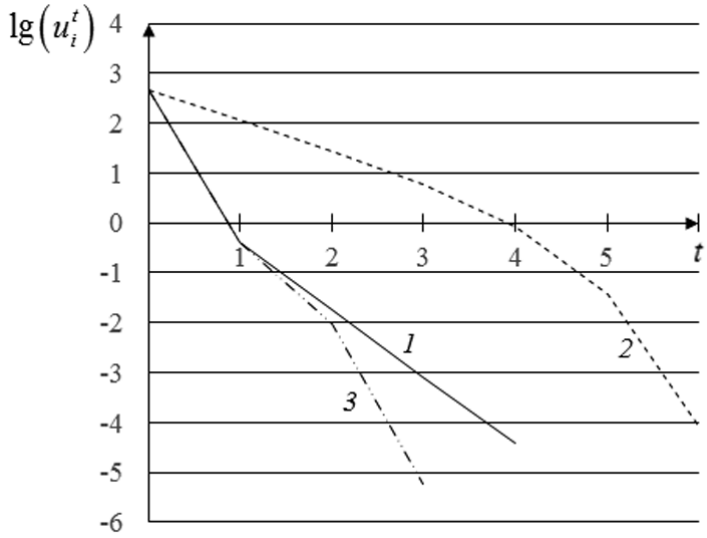


Рис. 1. Иллюстрация процесса сходимости разных методов:
1 – простой итерации, *2* – Ньютона, *3* – комбинированного

Замыкающие соотношения, зависимые от давления

Данный случай возникает при невозможности сведения гидравлических характеристик элементов трубопроводных систем к традиционному виду $y = f(x)$. Например, паспортная характеристика газоперекачивающего агрегата (ГПА) связывает не разность, а отношение давлений (степень сжатия) $\varepsilon = p_F / p_L$ (p_F, p_L – величины давления до и после ГПА) с объемным расходом. Наиболее простой аналитический вид этой характеристики [11] –

$$\varphi(p_F, p_L, x) = \beta_0 p_F |p_F| - p_L |p_L| - \beta_2 x |x| = 0, \quad (3)$$

где β_t – коэффициенты, полученные путем аппроксимации $\varepsilon^2(x)$ паспортной характеристики ГПА; x – производительность, отнесенная к условиям входа.

Также в литературе встречаются другие типы зависимостей $\varepsilon(x)$ или $\varepsilon^2(x)$ для ГПА, полученные при разных степенях аппроксимирующих полиномов. Например, в работе [12] предложена зависимость

$$\varphi(p_F, p_L, x) = \left(\beta_0 + \frac{\beta_1^2}{4\beta_2}\right) p_F |p_F| - p_L |p_L| - \\ - \beta_2 \left(x - \frac{\beta_1}{2\beta_2} p_F\right) \left| x - \frac{\beta_1}{2\beta_2} p_F \right| = 0. \quad (4)$$

В процессе исследования также рассматривались зависимости

$$\varphi(p_F, p_L, x) = \frac{p_L}{p_F} - \alpha_0 - \frac{\alpha_1}{p_F} x - \\ - \frac{\alpha_2}{p_F |p_F|} x |x| = 0, \quad (5)$$

$$\varphi(p_F, p_L, x) = \beta_0 p_F |p_F| - p_L |p_L| - \\ - \beta_1 |p_F| x - \beta_2 x |x| = 0, \quad (6)$$

где α_t – коэффициенты аппроксимирующих полиномов для $\varepsilon(x)$.

С целью обобщения рассмотренных случаев гидравлических характеристик (включая традиционные и неявные по расходу) введем в рассмотрение замыкающее соотношение следующего функционального вида:

$$\varphi(p_F, p_L, x) = 0, \quad (7)$$

где p_F, p_L – n-мерные векторы давлений, соответственно, в начале и конце ветвей ГЦ. Действительно, так как $y = p_F - p_L$, то вместо $y = f(x)$, имеем

$$p_F - p_L - f(x) = \varphi(p_F, p_L, x) = 0.$$

На рис. 2, *а* показаны примеры классических замыкающих соотношений

$$y = sx|x|, \; y = sx|x| - Y$$

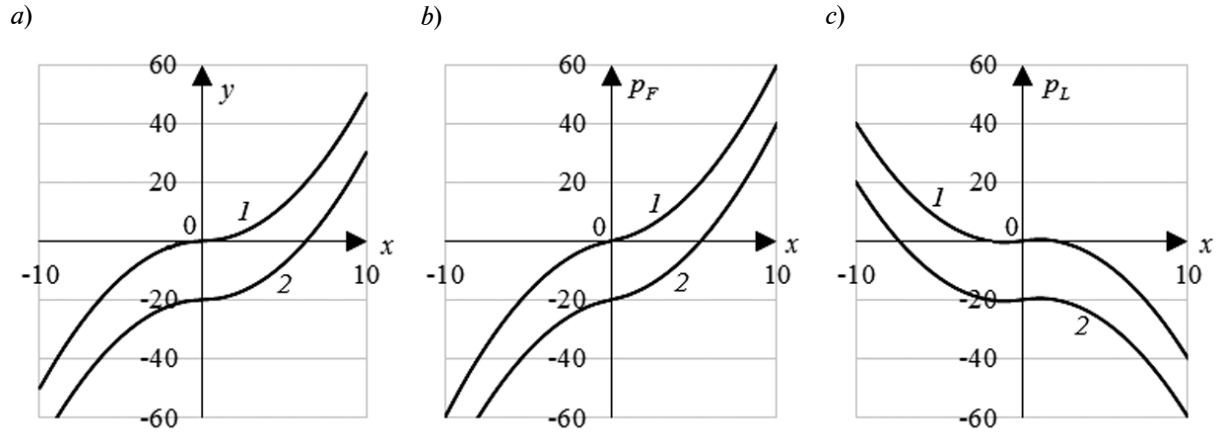


Рис. 2. Графики традиционных замыкающих соотношений для пассивной (*1*) и активной (*2*) ветвей в координатах *x, y* (*a*); *x*, p_F (*b*); *x*, p_L (*c*)

в координатах *x*, *y*. Как отмечалось, для гарантированного получения единственного решения задачи потокораспределения необходимо соблюдение требования монотонности замыкающих соотношений [1], которое можно распространить на рассматриваемый случай (7), представив классические соотношения в координатах x, p_F и x, p_L (рис. 2, *b* и *c*).

Как видно из рис. 2, *a*, требованию монотонного возрастания $y(x)$ эквивалентно одновременное соблюдение требований монотонного возрастания $p_F(x)$ (рис. 2, *b*) и монотонного убывания по $p_L(x)$ (рис. 2, *c*), что эквивалентно соблюдению условий

$$\frac{\partial x}{\partial p_F} > 0, \quad \frac{\partial x}{\partial p_L} < 0$$

на всей области определения функций (7).

На рис. 3 приведены графики зависимостей (3) – (6) для ГПА. Уравнение (5), в отличие от остальных, не удовлетворяет требованию монотонности. Уравнение (3) является более простым, но менее точным. Уравнение (4) имеет более сложную конструкцию для обеспечения монотонности, однако, и для уравнения (6) монотонность можно обеспечить путем введения фиктивной точки в начале характеристики.

Таким образом, уравнение (6) представ-

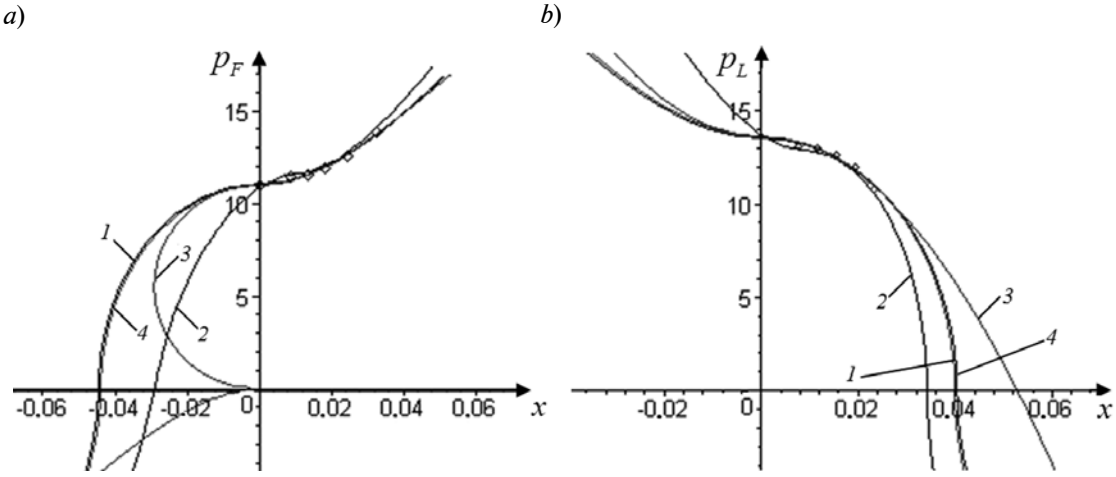


Рис. 3. Зависимости давлений на входе (*a*) и выходе (*b*) газоперекачивающего аппарата от расхода жидкости, выраженные различными соотношениями:
1 – формулой (3); *2* – (4); *3* – (5); *4* – (6)

Таблица 2

Аналитический вид функций для расчета x по заданным p_F, p_L

Используемое соотношение	Выражение для $x(p_F, p_L)$
(3)	$\sqrt{\lvert a\rvert}\cdot \mathrm{sign}(a)$, где $a = \dfrac{\beta_0 p_F \lvert p_F\rvert - p_L \lvert p_L\rvert}{\beta_2}$.
(4)	$\sqrt{\left\lvert \dfrac{a}{\beta_2}\right\rvert}\cdot \mathrm{sign}\left(\dfrac{a}{\beta_2}\right) + b,$ где $a = \left(\beta_0 + \dfrac{\beta_1^2}{4\beta_2}\right) p_F \lvert p_F\rvert - p_L \lvert p_L\rvert$, $b = \dfrac{\beta_1}{2\beta_2} p_F$.
(6)	$(-b - \sqrt{\lvert D\rvert}\cdot \mathrm{sign}(D)) / 2a,$ где $a = -\beta_2$, $b = -\beta_1 \lvert p_F\rvert$, $c = \beta_0 p_F \lvert p_F\rvert - p_L \lvert p_L\rvert$, $D = b^2 - 4ac$.

ляется наиболее приемлемым как по сложности, так и по точности.

Отметим, что для нахождения x_i^k по заданным давлениям в соотношениях (3) – (6) применимы конечные формулы, приведенные в табл. 2.

Модифицированный метод узловых давлений

Традиционная вычислительная схема метода контурных расходов обеспечивает более быструю сходимость, чем метод узловых давлений. Однако в случае (7) возникают трудности исключения узловых давлений при сведении системы уравнений к контурным расходам. Для газопроводных систем применяют специальные методы [13, 14], например, предполагающие решение систем линеаризованных уравнений относительно поправок к неизвестным давлениям и контурным расходам одновременно, которые из-за этого уступают по эффективности стандартному методу контурных расходов [12].

Здесь излагается новый модифицированный метод узловых давлений (ММД), который представляет собой обобщение МД на случай соотношений (7). Как и МД, он обеспечивает поиск решения в пространстве только узловых давлений и базируется на следующей модификации исходной модели потокораспределения (1):

$$Ax = Q,\quad p_F = A_F^T P,\quad p_L = -A_L^T P,\qquad \varphi(p_F, p_L, x) = 0, \tag{8}$$

где A_F, A_L – $[(m-1)\times n]$-матрицы инциденций, фиксирующие отдельно начальные и конечные узлы ветвей так, что $A_F + A_L = A$; $\varphi(p_F, p_L, x)$ – вектор-функция с элементами $\varphi_i(p_{F,i}, p_{L,i}, x_i)$, $i = \overline{1,n}$, отражающими произвольные законы течения, включая зависимые от давления.

Пусть на k-й итерации имеется определенное значение P^k, которому можно поставить в соответствие значения $p_F^k = A_F^T P^k$, $p_L^k = -A_L^T P^k$, а также значение x^k, удовлетворяющее уравнению

$$\varphi(p_F^k, p_L^k, x^k) = 0.$$

Линеаризация уравнений (8) дает

$$A\Delta x^k = -u_1^k, \tag{9}$$

$$\Delta p_F^k = A_F^T \Delta P^k,\quad \Delta p_L^k = -A_L^T \Delta P^k, \tag{10}$$

$$\varphi'_{PF}\Delta p_F^k + \varphi'_{PL}\Delta p_L^k + \varphi'_x \Delta x^k = 0. \tag{11}$$

где

$$u_1^k = Ax^k - Q;\ \varphi'_{PF} = \frac{\partial\varphi}{\partial p_F};\ \varphi'_{PL} = \frac{\partial\varphi}{\partial p_L};\ \varphi'_x = \frac{\partial\varphi}{\partial x}$$

– диагональные матрицы частных производных порядка n.

Выразим Δx^k из уравнения (11):

$$-\Delta x^k = -(\varphi'_x)^{-1}(\varphi'_{PF}\Delta p_F^k + \varphi'_{PL}\Delta p_L^k).$$

С учетом соотношений (10) получим:

$$\Delta x^k = -(\varphi'_x)^{-1}(\varphi'_{PF}A_F^T - \varphi'_{PL}A_L^T)\Delta P^k. \quad (12)$$

Подстановка формулы (12) в равенство (9) дает следующее выражение:

$$A(\varphi'_x)^{-1}(\varphi'_{PF}A_F^T - \varphi'_{PL}A_L^T)\Delta P^k = u_1^k. \quad (13)$$

По правилам дифференцирования неявных функций,

$$(x'_{PF})_i = \frac{\partial x_i}{(\partial p_F)_i} = -\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_i}\right)^{-1}\frac{\partial \varphi_i}{(\partial p_F)_i};$$

$$(x'_{PL})_i = \frac{\partial x_i}{(\partial p_L)_i} = -\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_i}\right)^{-1}\frac{\partial \varphi_i}{(\partial p_L)_i}, \ i = \overline{1,n}.$$

Отсюда

$$x'_{PF} = -(\varphi'_x)^{-1}\varphi'_{PF}; \ x'_{PL} = -(\varphi'_x)^{-1}\varphi'_{PL}$$

– диагональные матрицы соответствующих частных производных порядка n.

Тогда систему (13) можно представить в виде

$$\tilde{M}\Delta P^k = -u_1^k,$$

где $\tilde{M} = Ax'_{PF}A_F^T - Ax'_{PL}A_L^T$ – модифицированная матрица Максвелла.

Обозначим

$$\eta_i = (x'_{PF})_i, \ \kappa_i = -(x'_{PL})_i, \ i = \overline{1,n}.$$

Тогда диагональные элементы $\tilde{M}$ определяются по соотношению

$$\tilde{M}_{jj} = \sum_{i\in I_j^-}\eta_i + \sum_{i\in I_j^+}\kappa_i,$$

где $I_j^-(I_j^+)$ – множество ветвей, исходящих из узла (заходящих в узел) j.

Внедиагональные элементы $\tilde{M}$ определятся следующим образом:

если узлы j и t соединены единственной ветвью i, то $\tilde{M}_{jt} = -\kappa_i$, когда узел t является конечным для ветви i; $\tilde{M}_{jt} = -\eta_i$, когда узел t является начальным для ветви i;

если узлы j и t не соединены, то $\tilde{M}_{jt} = 0$;

если узлы j и t соединены параллельными ветвями, образующими множество I_{jt}, то

$$\tilde{M}_{jt} = -\sum_{i\in I_{jt}}\eta_i - \sum_{i\in I_{jt}}\kappa_i.$$

При соблюдении условий

$$(x'_{PF})_i > 0, \ (x'_{PL})_i < 0, \ i = \overline{1,n},$$

вытекающих из сформулированных ранее требований к монотонности функций

$$\varphi_i(p_{F,i}, p_{L,i}, x_i), \ i = \overline{1,n},$$

имеем неравенства

$$\eta_i > 0, \ \kappa_i > 0, \ i = \overline{1,n}.$$

Отсюда $\tilde{M}_{jt} > 0$ при $j = t$ и $\tilde{M}_{jt} \le 0$ при $j \ne t$ для всех $j,t = \overline{1,m-1}$. При этом

$$M_{jj} \ge \sum_{t=1,t\ne j}^{m-1}\left|M_{jt}\right|, \ j = \overline{1,m-1},$$

где строгое неравенство имеет место, когда узел j (или t) инцидентен ветви, имеющей другим концевым узлом узел m с заданным давлением.

Покажем также, что введенная модель (8), а также рассмотренная модификация МД накрывают канонический случай замыкающего соотношения $y = f(x)$, когда

$$\varphi(p_F, p_L, x) = p_F - p_L - f(x) = 0.$$

В этом случае

$$\varphi'_{PF} = E_n, \ \varphi'_{PL} = -E_n,$$

где E_n – единичная матрица порядка n.

При этом

$$(\varphi'_{PF}A_F^T - \varphi'_{PL}A_L^T) = (E_nA_F^T + E_nA_L^T) = \\ = A_F^T + A_L^T = A^T.$$

С учетом того, что $\varphi'_x = -f'_x$, вместо выражения (13) имеем равенство

$$A(f'_x)^{-1}A^T\Delta P^k = -u_1^k,$$

что совпадает с основной формулой для расчета направления шага в классическом МД [1].

Алгоритмизация метода

Приведем сопоставление вычислительных схем ММД и МД (табл. 3).

В приведенных алгоритмах подчеркнуты те составляющие выражений, которые зависят от специфики замыкающих соотношений.

Таким образом, при объектно-ориентированном подходе компоненты, которые реализуют общий метод решения задачи потокораспределения, обращаются к компонентам, отвечающим за модели элементов. Это обращение дает возможность

Таблица 3

Этапы одной итерации работы алгоритмов метода узловых давлений и его модифицированного аналога

№	Шаг	Формула по алгоритму	
		базовому	модифицированному
1	Задано некоторое приближение к решению по давлениям $\overline{P}^k$	–	–
2	Вычисление вектора расходов (x^k) из формулы	$\overline{A}^T \overline{P}^k - \underline{f(x^k)} = 0$	$\underline{\varphi(\overline{P}^k, x^k)} = 0$
3	Вычисление вектора невязок	$u_1^k = Ax^k - Q$; если $\left\|u_1^k\right\| < \sigma$, то расчет закончен.	
4	Вычисление направления шага	$A(\underline{f'_x})^{-1} A^T \Delta P^k = -u_1^k$	$[A\underline{x'_{PF}}^k A_F^T - A\underline{x'_{PL}}^k A_L^T]\Delta P^k = -u_1^k$
5	Вычисление нового приближения	$P^{k+1} = P^k + \Delta P^k$	$P^{k+1} = P^k + \delta^k \Delta P^k$

Обозначение: σ – заданная точность соблюдения небалансов расходов в узлах.

получать значения производных и расходов на ветвях с конкретными законами течения в точке текущего приближения.

Компоненты диагональных матриц x'_{PF}, x'_{PL}, которые необходимы для расчета направления шага по ММД, могут быть получены на основе аналитических выражений для

$$\frac{\partial\varphi_i}{\partial x_i}, \frac{\partial\varphi_i}{(\partial p_F)_i}, \frac{\partial\varphi_i}{(\partial p_L)_i}.$$

Примеры таких выражений для разных

Таблица 4

Примеры функции φ и ее производные

Вариант функции φ	$\frac{\partial\varphi}{\partial p_F}$	$\frac{\partial\varphi}{\partial p_L}$	$\frac{\partial\varphi}{\partial x}$
Классический тип замыкающих соотношений			
$p_F - p_L - sx\|x\| + Y$	1	–1	$-2s\|x\|$
Тип, неявно заданный по расходу			
$p_F - p_L - s(x)x\|x\|$	1	–1	$-(2s + s'_x x)\|x\|$
$\|p_F\| p_F - \|p_L\| p_L - s(x)x\|x\|$	$2\|p_F\|$	$-2\|p_L\|$	$-(2s + s'_x x)\|x\|$
Тип, зависимый от давления (на примере ГПА)			
Формула (3)	$2\beta_0\|p_F\|$	$-2\|p_F\|$	$-2\beta_2\|x\|$
Формула (4)	$2\|p_F\|\left(\beta_0 + \frac{\beta_1^2}{4\beta_2}\right) - \beta_1\left\|x - \frac{\beta_1 p_F}{2\beta_2}\right\|$	$-2\|p_F\|$	$-2\beta_2\left\|x - \frac{\beta_1 p_F}{2\beta_2}\right\|$
Формула (6)	$2\beta_0\|p_F\| - \beta_1 x$	$-2\|p_F\|$	$-\beta_1\|p_F\| - 2\beta_2\|x\|$

типов замыкающих соотношений (традиционных, неявных по расходу и зависимых от давления) представлены в табл. 4, где индекс ветви опущен.

Классический МД основан на итерационной формуле

$$P^{k+1} = P^k + \Delta P^k,$$

которая не предполагает регулировку длины шага. При этом процесс сходимости часто имеет пилообразную форму и не всегда позволяет найти решение за приемлемое число итераций.

В связи с этим были проведены исследования методов регулировки длины шага δ^k в соотношении

$$P^{k+1} = P^k + \delta^k \Delta P^k.$$

В случае строго выпуклой функции невязки $\| u^k(\delta^k) \|_2^2$ оказалось эффективным применение длины шага, определенной как

$$\delta^k = \| u^{k-1} \|_2^2 \, (\| u^{k-1} \|_2^2 + \| u^k(1) \|_2^2)^{-1},$$

где $\| u^k \|_2^2$ – квадрат евклидовой нормы вектора невязок.

В общем случае более надежным для поиска длины шага оказалось применение метода золотого сечения.

Численные исследования

Для апробации ММД взят пример газотранспортной системы [12] (рис. 4), состоящей из девяти узлов, четырех ГПА и шести пассивных ветвей (трубопроводов). Все ГПА описаны соотношением (4), трубопроводы – соотношением

$$|p_F| \, p_F - |p_L| \, p_L = sx|x|.$$

Отборы в узлах (млн. м^3/сут): $Q_1 = 19{,}1$; $Q_4 = 14{,}8$; $Q_5 = 0{,}632$; $Q_6 = 0{,}32$. Фиксированное давление $P_9 = 33{,}778$ ат.

Коэффициенты s_i для трубопроводов: $s_1 = 0{,}349$; $s_2 = 1{,}332$; $s_4 = 0{,}436$; $s_5 = 4{,}757$; $s_6 = 0{,}253$; $s_{10} = 0{,}006$.

Обозначим $\beta_i = \{\beta_{0,i}, \beta_{1,i}, \beta_{2,i}\}$. Тогда в данном примере для ГПА:

$$\beta_3 = \{1{,}040975262;\ 0{,}4520492230;\ 0{,}1660378943\};$$

$$\beta_7 = \{1{,}049124727;\ 0{,}3668417249;\ 0{,}1867004063\};$$

$$\beta_8 = \{1{,}056105913;\ 0{,}4352722015;\ 0{,}2396158372\};$$

$$\beta_9 = \{1{,}040975262;\ 0{,}4520492230;\ 0{,}1660378943\}.$$

Начальные приближения по давлениям генерировались датчиком случайных равномерно распределенных чисел в диапазоне 0 – 100. Выполнялось 100 таких генераций, и для каждой из них применялся предлагаемый алгоритм. Точность решения проверялась по условиям

$$\|u^k\| < 0{,}01 \text{ и } \|\Delta P^k\| < 0{,}01.$$

На рис. 5 представлены результаты такого тестирования в форме процента расчетов, в которых задача была решена за конкретное число итераций k. Результатом вычислений являются расходы

$$x = \{19{,}1;\ 21{,}6;\ 10{,}8;\ 14{,}8;\ 12{,}93;\ 13{,}25;\ 13{,}25;\ 13{,}25;\ 10{,}8;\ 2{,}5\}$$

и давления

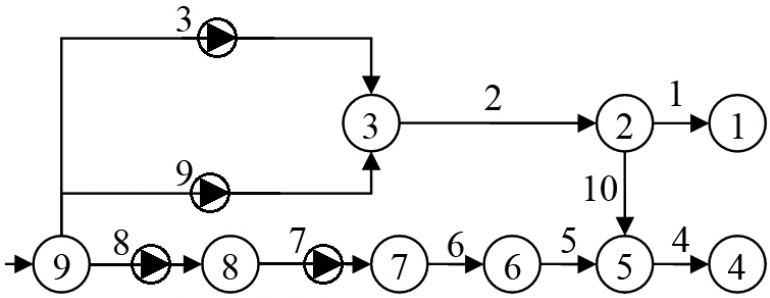


Рис. 4. Схема газотранспортной системы:
узлы – окружности с номерами, ветви – линии со стрелками,
ГПА – окружности со стрелками на ветвях

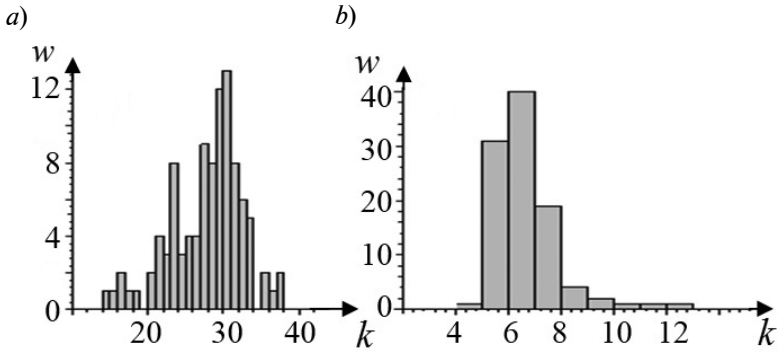


Рис. 5. Количество расчетных условий, при которых задача решена за k итераций без регулировки шага (a) и с его регулировкой(b)

$$P = \{31{,}55;\ 33{,}51;\ 41{,}76;\ 32{,}05;\ 33{,}50;\ 43{,}80;\ 44{,}30;\ 38{,}77\}.$$

Проведенные численные исследования на широком диапазоне начальных приближений показали, что ММД сходится во всех случаях. Вычисление оптимальной длины шага позволяет резко (в 4 – 5 раз) сократить среднее число итераций (до 7 ± 1) (см. рис. 5, b), что сопоставимо по показателям со сходимостью традиционных методов расчета потокораспределения при классических замыкающих соотношениях.

Заключение

Сформулирована проблема обеспечения общности методов теории гидравлических цепей в сфере реальных информационно-вычислительных технологий для моделирования установившихся изотермических режимов трубопроводных и гидравлических систем различного типа и назначения. Предложено два взаимосвязанных пути ее решения:

1) переход на концепцию объектно-ориентированного моделирования трубопроводных систем, которая обеспечивает независимость расчетных методов от специфики законов течения среды по отдельным элементам системы;

2) разработка новых методов расчета потокораспределения при произвольных законах течения.

Выделены основные типы соотношений для законов изотермического установившегося течения среды по отдельным элементам гидравлических цепей, включая традиционные, неявные по расходу, зависимые от давления. Для нетрадиционных соотношений введены формальные условия применимости, которые обеспечивают единственность решения задачи потокораспределения.

Предложен новый модифицированный метод узловых давлений, который обладает универсальностью в отношении вида замыкающих соотношений, требует меньших вычислительных затрат, по сравнению с известной методикой двойных циклов итераций, может выступать в роли базового метода в рамках концепции объектно-ориентированного моделирования гидравлических цепей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Меренков А.П., Хасилев В.Я.** Теория гидравлических цепей. М: Наука, 1985. 278 с.

[2] **Меренков А.П., Сеннова Е.В., Сумароков С.В. и др.** Математическое моделирование и оптимизация систем тепло-, водо-, нефте- и газоснабжения. Новосибирск: ВО «Наука», Сибирская издательская фирма, 1992. 407 с.

[3] **Новицкий Н.Н., Сеннова Е.В., Сухарев М.Г. и др.** Гидравлические цепи. Развитие теории и приложения. Новосибирск: Наука, Сибирская издательская фирма РАН, 2000. 273 с.

[4] **Новицкий Н.Н., Михайловский Е.А.** Объектно-ориентированное моделирование гидравлических цепей // Вестник ИРГТУ. 2012. № 7. С. 170–176.

[5] **Рамбо Дж., Блаха М.** UML 2.0. Объектно-

ориентированное моделирование и разработка. 2-е изд. СПб.: Питер, 2007. 544 с.

[6] **Альтшуль А.Д.** Гидравлические сопротивления. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Недра, 1982. 224 с.

[7] **Шифринсон Б.Л.** Основной расчет тепловых сетей. Теория и методы расчета. М.; Л.: Госэнергоиздат, 1940. 188 с.

[8] СНиП 41-02-2003. Тепловые сети. Госстрой России. Введ. с 1 сентября 2001 г.

[9] **Манюк В.И., Каплинский Я.И., Хиж Э.Б. и др.** Наладка и эксплуатация водяных тепловых сетей. 3-е изд. М.: Стройиздат, 1988. С. 432.

[10] Актуализированная редакция СНиП 2.04.02-84*. Водоснабжение. Наружные сети и сооружения. Издание официальное. М.: Изд. Министерства регионального развития Российской Федерации, 2012.

[11] **Немудров А.Г., Черникин В.И.** Расчет режимов работы газопроводов методом определения оптимальных характеристик турбонагнетателей // Газовая промышленность. 1966. № 3. С. 31–34.

[12] **Евдокимов А.Г., Тевяшев А.Д.** Оперативное управление потокораспределением в инженерных сетях. Харьков: Вища школа, 1980. 144 с.

[13] **Левин А.А., Таиров Э.А., Чистяков В.Ф.** Расчет потокораспределения в энергоустановках как гидравлических цепях с регулируемыми параметрами // Трубопроводные системы энергетики: математическое моделирование и оптимизация; под. ред. Н.Н. Новицкого. Новосибирск: Наука, 2010. С. 115–124.

[14] **Корельштейн Л.Б., Пашенкова Е.С.** Опыт использования методов глобального градиента и декомпозиции при расчете установившегося неизотермического течения жидкостей и газов в трубопроводах // Трубопроводные системы энергетики: математическое моделирование и оптимизация; под. ред. Н.Н. Новицкого. Новосибирск: Наука, 2010. С. 103–115.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МИХАЙЛОВСКИЙ Егор Анатольевич – *младший научный сотрудник лаборатории трубопроводных и гидравлических систем Института систем энергетики им. Л.А. Мелентьева Сибирского отделения Российской академии наук.*

664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 130
egor.isem@mail.ru

НОВИЦКИЙ Николай Николаевич – *доктор технических наук, главный научный сотрудник Института систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН, зав. лабораторией трубопроводных и гидравлических систем.*

664033, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 130
pipenet@isem.sei.irk.ru

Mikhailovsky E.A., Novitsky N.N. A MODIFIED NODAL PRESSURE METHOD FOR CALCULATION OF THE FLOW DISTRIBUTION IN HYDRAULIC CIRCUITS FOR THE CASE OF UNCONVENTIONAL CLOSING RELATIONS.

In the paper, we propose a method for numerical solving the problem of the flow distribution in hydraulic circuits with lumped parameters for the case of random closing relations. The conventional and unconventional types of relations for the laws of isothermal steady motion of fluid in the individual hydraulic circuit components are considered. The unconventional relations are represented by those implicitly given by the flow rate and dependent on the pressure of the working fluid. In addition to the unconventional relations, the formal conditions of applicability were introduced. These conditions provide a unique solution to the flow distribution problem. A new modified nodal pressure method is suggested. The method is more universal in terms of the closing relation form as compared to the unmodified one, and has a lower computational cost as compared to the known technique of double iteration cycles. The paper presents an analysis of the new method and its algorithm, gives a calculated example of the gas transportation network, and its results.

HYDRAULIC CIRCUIT, PIPELINE SYSTEM, FLOW DISTRIBUTION, MATHEMATICAL AND COMPUTER SIMULATION, FLOW DISTRIBUTION MODEL.

REFERENCES

[1] **A.P. Merenkov, V.Ya. Khasilev,** Teoriya gidravlicheskikh tsepej [Theory of hydraulic circuits]. Nauka, Moscow, 1985.

[2] **A.P. Merenkov, E.V. Sennova, S.V. Sumarokov, et al.,** Matematicheskoe modelirovanie i optimizatsiya sistem teplo-, vodo-, nefte- i gazosnabzheniya [Mathematical modeling and optimization of heat, water, oil and gas supply systems]. VO «Nauka», Sibirskaya izdatel'skaya firma, Novosibirsk, 1992.

[3] **N.N. Novitsky, E.V. Sennova, M.G. Sukharev, et al.,** Gidravlicheskie tsepi. Razvitie teorii i prilozheniya [Hydraulic circuit. Development of the theory and applications]. Nauka, Sibirskaya izdatel'skaya firma RAN, Novosibirsk, 2000.

[4] **N.N. Novitsky, E.A. Mikhailovsky,** Ob'ektno-orientirovannoe modelirovanie gidravlicheskikh tsepej [Object-oriented modeling of hydraulic circuits], Vestnik IRGTU. 7 (2012) 170–176.

[5] **J. Rumbaugh, M. Blakha,** UML 2.0. Ob'ektno-orientirovannoe modelirovanie i razrabotka [UML 2.0. Object-oriented modeling and development]. 2nd ed. Piter, St. Petersburg, 2007.

[6] **A.D. Al'tshul',** Gidravlicheskie soprotivleniya [Hydraulic Resistances]. 2nd ed. Nedra, Moscow, 1982. 224 s.

[7] **B.L. Shifrinson,** Osnovnoj raschet teplovykh setej. Teoriya i metody rascheta [The basic calculation of heat networks. Theory and methods of calculation]. Gosenergoizdat, Moscow, Leningrad, 1940.

[8] SNiP 41-02-2003. Teplovye seti [The thermal networks]. Gosstroj Rossii. Since September 1, 2001.

[9] **V.I. Manyuk, Ya.I. Kaplinskij, E.B. Khizh, et al.,** Naladka i ekspluatatsiya vodyanykh teplovykh setej [Commissioning and operation of the water heating networks]. 3rd ed. Strojizdat, Moscow, 1988, p. 432.

[10] Aktualizirovannaya redaktsiya SNiP 2.04.02-84*. Vodosnabzhenie. Naruzhnye seti i sooruzheniya. Izdanie ofitsial'noe [The updated edition of SNiP 2.04.02-84*. Water supply. External networks and facilities. Official publication]. Izd. Ministerstva regional'nogo razvitiya Rossijskoj Federatsii, Moscow, 2012.

[11] **A.G. Nemudrov, V.I. Chernikin,** Raschet rezhimov raboty gazoprovodov metodom opredeleniya optimal'nykh kharakteristik turbonagnetatelej [Calculation of the operating modes of pipelines through the method of determining optimum performance turbochargers], Gazovaya promyshlennost'. 3 (1966) 31–34.

[12] **A.G. Evdokimov, A.D. Tevyashev,** Operativnoe upravlenie potokoraspredeleniem v inzhenernykh setyakh [Operational management flow in engineering networks]. Vishcha shkola, Kharkov, 1980.

[13] **A.A. Levin, E.A. Tairov, V.F. Chistyakov,** Raschet potokoraspredeleniya v energoustanovkakh kak gidravlicheskikh tsepyakh s reguliruemymi parametrami, Truboprovodnye sistemy energetiki: matematicheskoe modelirovanie i optimizatsiya [Calculation of the flow distribution in power plants as hydraulic circuits with adjustable parameters, Energy piping systems: mathematical modeling and optimization], ed by N.N. Novitsky, Nauka, Novosibirsk, 2010, 115–124.

[14] **L.B. Korel'shtejn, E.S. Pashenkova,** Opyt ispol'zovaniya metodov global'nogo gradienta i dekompozitsii pri raschete ustanovivshegosya neizotermicheskogo techeniya zhidkostej i gazov v truboprovodakh, Truboprovodnye sistemy energetiki: matematicheskoe modelirovanie i optimizatsiya [Experience in the use of the global gradient methods and decomposition in the calculation of steady non-isothermal flow of liquids and gases in pipes, Energy piping systems: mathematical modeling and optimization], ed. by. N.N. Novitsky, Nauka, Novosibirsk, 2010, pp. 103–115.

THE AUTHORS

MIKHAILOVSKY Egor A.
Melentiev Energy Systems Institute of Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
130, Lermontov St., Irkutsk, 664033, Russian Federation
egor.isem@mail.ru

NOVITSKY Nikolai N.
Melentiev Energy Systems Institute of Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
130, Lermontov St., Irkutsk, 664033, Russian Federation
pipenet@isem.sei.irk.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.4
УДК 521.1, 501

М.Р. Петриченко
Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ПРИБЛИЖЕННЫЕ ОЦЕНКИ ПОСТОЯННОЙ БЛАЗИУСА

Для приближенной оценки постоянной Блазиуса используются интегральные свойства однородных решений предельной задачи Крокко и расщепляющие (плоские) разложения. Доказано, что производная $d\varphi/dh$ имеет логарифмическую особенность в точке $h = 1$, поэтому $d\varphi^2/dh \to -0$, $\varphi \to +0$ ($h \to 1-0$), и расщепляющий ряд для производной $d\varphi/dh$ расходится при $h \to 1-0$ не медленнее, чем гармонический ряд. Доказано существование интегрального инварианта для однородного решения предельной задачи Крокко, изображающего квадрат нормы производной решения. Доказано, что вдоль действительных однородных решений задачи Крокко выполняется условие минимума для распределения (гомеоморфизма из $D(\varphi) \times J(\varphi) \to R^1$), $Z(1, \varphi, \psi)$.

ПРЕДЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА КРОККО, РАСЩЕПЛЯЮЩЕЕ РАЗЛОЖЕНИЕ, РАСПРЕДЕЛЕНИЕ И ПЛОТНОСТЬ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ, ГОМЕОМОРФИЗМ, ИНВАРИАНТ ПРЕДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ.

Введение и постановка задачи

Оценка значения постоянной Блазиуса имеет принципиальное значение в связи с определением плотности потоков массы, импульса и энергии на границе твердое тело – жидкость. Исторически первое значение этой константы определено в гидродинамической задаче о пограничном слое на пластине Г. Блазиусом. Им применено сшивание (аналитическое продолжение) степенного ряда вблизи стенки и асимптотического разложения во внешней (струйной) части течения. В таком виде решение Блазиуса приводится в курсах гидродинамики Н.Е. Кочина, Л. Прандтля и др. История вопроса описана в работах [1, 2].

Можно считать, что точное значение постоянной a известно, надежно вычислено на 30 разрядов и, как констатируется в работе [1], «Метод Блазиуса полностью реабилитирован».

Пусть мы имеем

$$D(\varphi) = (h : 0 < h < 1), \varphi \in C^2(0,1),$$
$$J(\varphi) = (\varphi : 0 < \varphi < a < \infty)$$

и $a := \varphi(0)$ – постоянная Блазиуса.

Диффеоморфизм $\varphi(h)$, $\varphi \in C^{(2)}(0,1)$ получается как решение двухточечной предельной задачи:

$$2\varphi d^2\varphi / dh^2 + f(h) = 0,$$
$$(d\varphi / dh)_{h=0} = \varphi(1) = 0. \qquad (1)$$

Двухточечная предельная задача может быть редуцирована на задачу Коши со следующими начальными условиями:

$$\varphi(0) - a = (d\varphi / dh)_{h=0} = 0. \qquad (2)$$

При этом должно выполняться условие $\varphi(1) = 0$. По предложению В.П. Варина [1], удобнее ставить нормированные начальные условия в точке $h = 1$:

$$\varphi(0) - 1 = (d\varphi / dh)_{h=0} = 0, \qquad (2a)$$

где $0 < h < r$, $r = a^{-2/3}$, $\varphi(r) = 0$.

Основная задача состоит в точной оценке постоянной a (постоянная Блазиуса). Явно эта постоянная возникает только при редукции предельной задачи (1) на задачу Коши; удобство же задачи (1) состоит в том, что все предельные условия триви-

альны. Если константу a нормировать на единицу, то необходимо найти величину r, которая является корнем $\varphi(h)$. Более того, в работе [2] доказано, что $\varphi(h)$ – это распределение, аналитическое на промежутке $0 < h < r$. Точка $h = r$ (или $h = 1$ в ненормированной постановке) – особая точка для производной $d\varphi/dh$ [2].

Именно, в работе [2] приводится следующий результат: пусть $\varphi(h)$ – решение предельной задачи (1). Тогда $h = 1$ – особая точка,

$$\varphi(1) = 0, \ -d\varphi/dh \to \infty, \ h \to 1 - 0,$$

т. е. $r = 1$ – естественный радиус сходимости, зависящий от a:

$$\forall\varepsilon > 0, \exists\eta(\varepsilon) > 0, \ \eta \underset{\varepsilon\to+0}{\to} +0 \Rightarrow 1 - \eta < \\ < r(a + \varepsilon) < r(a - \varepsilon) < 1 + \eta.$$

Для вычисления постоянной a используется метод так называемых плоских разложений [3]. Метод удобен тем, что позволяет ограничиваться в вычислениях небольшим количеством членов левого фланга ряда. Эта аппроксимация гарантирована равномерной сходимостью плоского ряда. Доказательство равномерной сходимости представлено в работах [3, 4]. Подобные функциональные ряды (расщепляющие разложения) описаны в статье [5]; идея расщепления в том виде, в котором она используется в этой статье, принадлежит Л. Шварцу и Д. Юэ [6].

Цель настоящей работы – получение приближенных оценок константы a. Для решения этой задачи используется прямой метод, основанный на вычислении норм распределений и плотностей распределений. Далее оценки будут считаться плохими, если погрешность вычисления a будет не меньше 1 %.

Основные свойства решения предельной задачи (1)

В качестве первого шага нашего исследования изучим свойства решений уравнения

$$2\varphi d^2\varphi / dh^2 + h = 0, \tag{3}$$

со следующим набором предельных условий:

$$\begin{gathered}(d\varphi / dh)_{h=0} = \varphi(1) = 0, \\ \varphi(0) - a = \varphi(1) = 0, \\ (d\varphi / dh)_{h=0} = \varphi(0) - a = 0.\end{gathered} \tag{4}$$

Перенормировка на промежуток единичной длины в данном случае не целесообразна, так как $r = a^{-2/3}$ (константы a и r связаны).

Лемма 1. *Формальный первый интеграл уравнения (3), такой, что*

$$(d\varphi / dh)_{h=0} = 0,$$

имеет следующий вид:

$$\begin{gathered}\psi^2 := (d\varphi / dh)^2 = \int_0^\omega h(\tau)d\tau, \\ \omega := \ln(a / \varphi) \in (0, \infty).\end{gathered} \tag{5}$$

Доказательство леммы 1 очевидно.

Из леммы 1 следует, что

$$\exp(-\omega)d\omega / dh = -\sqrt{\int_0^\omega h(\tau)d\tau},$$

и для определения $h(\omega)$ нетрудно получить нелинейное интегральное уравнение.

Распределение $h(\omega) \geq 0$ является монотонным, т. е.

$$dh/d\omega > 0, \ h(0) = h(\infty) - 1 = 0,$$

поэтому, в силу второй теоремы о среднем [7] имеем:

$$\exists\omega^* \in (0, \omega) \Rightarrow \int_0^\omega h(\tau)d\tau = h(\omega)(\omega - \omega^*).$$

Введем обозначение

$$\sigma := 1 - \omega^* / \omega < 1,$$

или в другой записи

$$\sigma := \frac{\int_0^\omega h(\tau)d\tau}{\omega h(\omega)}. \tag{6}$$

Лемма 2. *Уравнение (3) равносильно канонической системе со следующим гамильтонианом:*

$$H(\omega, \psi, h) = (1 / 2)(\psi^2 - \omega h(\omega)) < 0.$$

Доказательство. Действительно,

$$\psi^2 - \omega h(\omega) = (\omega^* - \omega)h(\omega) = -\sigma\omega h(\omega) < 0.$$

Таким образом, лемма 2 доказана.

Следствие леммы 2. Действительная траектория (характеристика) уравнения (3) удовлетворяет условию минимума распределения $Z(1, \varphi, \psi)$:

$$Z(1,\varphi,\psi) = \int_0^1 (\psi^2 + h\ln(a/\varphi))dh \to \inf > 0.$$

Можно трактовать $Z(h, \psi, \varphi)$ как действие, и вместо уравнения Крокко (3) для переменной φ решать уравнение Якоби для Z:

$$\partial Z / \partial h + H(h,\varphi,\partial Z / \partial\varphi) = 0,$$

$$\psi := d\varphi/dh = \partial Z / \partial\varphi.$$

Полное решение уравнения Якоби равносильно решению уравнения (3). Вдоль траектории уравнения (3) выполняется неравенство

$$0 = dZ \le \delta Z,$$

где δ означает изометрическую вариацию на виртуальных траекториях, а d – вариацию на действительном решении предельной задачи (1).

Лемма 3. *Существует ненулевое решение предельной задачи (1).*

Доказательство. Проинтегрируем уравнение (3) по h от 0 до 1:

$$(\varphi d\varphi / dh)_0^1 - \int_0^1 (d\varphi / dh)^2 dh + 1/4 = 0.$$

Но следует учесть, что

$$\lim_{h\to 1-0} \varphi d\varphi / dh = \lim_{\varphi\to +0} \varphi\sqrt{\ln(a/\varphi)^{\sigma h}} = 0,$$

и тогда предыдущее тождество можно переписать следующим образом:

$$\int_0^1 (d\varphi / dh)^2 dh = 1/4 > 0. \qquad (7)$$

Лемма 3 доказана.

Лемма 4. *Распределение $\sigma(\omega)$ является возрастающим при*

$$\sigma \le \frac{1}{1+\alpha}, \alpha := \frac{d\ln h}{d\ln\omega},$$

и допускает следующую оценку:

$$3/4 \le \sigma \le 1.$$

Доказательство. В силу определения (6) справедливо следующее равенство:

$$d\sigma / d\omega = (1 - \sigma(1+\alpha)) / \omega,$$

$$\alpha := d\ln h / d\ln\omega.$$

Производная в левой части равенства неотрицательна при

$$\sigma \le 1/(1+\alpha).$$

Далее, в данном случае $h \approx (\mathrm{erf}\sqrt{\omega})^{2/3}$, и при $\omega << 1$ $h = O(\omega^{1/3})$, $\alpha = 1/3$. При $\omega \to \infty$, $\sigma \to 1-0$.

Лемма 3 доказана.

Оценки постоянной Блазиуса

(а). Из доказательства леммы 1 следует, что

$$\exp(-\omega)d\omega / dh = \sqrt{\sigma\omega h}.$$

Пусть $\sigma = \sigma_m = \mathrm{const}$, $1 > \sigma_m > 3/4$ – некоторая норма σ (см. лемму 4). Тогда приближенная оценка имеет вид

$$a\sqrt{\pi}\mathrm{erf}(\sqrt{\omega}) = \\ = (2/3)\sqrt{\sigma_m h^3} \Rightarrow a = (2/3)\sqrt{\sigma_m / \pi}. \qquad (8)$$

Из выражений (8) следует, что $h = (\mathrm{erf}\sqrt{\omega})^{2/3}$.

Аналогичная аппроксимация решения предельной задачи (1) приведена в работе [8], где она записана как

$$h = (\mathrm{erf}\sqrt{\omega})^{1/2}.$$

В силу равенства (8), постоянная a лежит в пределах

$$0{,}32573501 < a < 0{,}376126392\,.$$

Очевидно, что допустимый интервал значений этой постоянной непомерно велик. Чтобы получить требуемую оценку, целесообразно его сузить.

Оценку σ можно улучшить, если использовать тождество (7):

$$1/4 = \int_0^\infty \sigma\omega h(\omega)dh = \frac{2}{3\sqrt{\pi}}\int_0^\infty \omega^{1/2}\sigma(\mathrm{erf}\sqrt{\omega})^{1/3} \times \\ \times \exp(-\omega)d\omega \cong (1/3)(1 - 1/(3\pi))\sigma_m,$$

причем полученная оценка есть верхняя для σ_m.

Таким образом,

$$\sigma_m = 0{,}839023119,\ a = 0{,}344525024,$$

что лежит в пределах вычисленного отклонения a.

(б). Пусть в общем случае

$$\sigma = \sigma_0 + \alpha h,\ \sigma_0 = 3/4,\ 0 < \alpha < 1/4.$$

Тогда формула (6) принимает вид:

$$a = \frac{\sigma_0^2}{8\sqrt{\alpha^3\pi}}\{(1 + 2\alpha/\sigma_0)\times \times\sqrt{4\alpha/\sigma_0(1+\alpha/\sigma_0)} - \ln(1 + 2\alpha/\sigma_0 + + \sqrt{4\alpha/\sigma_0(1+\alpha/\sigma_0)})\}. \quad (8а)$$

Если $\alpha \to +0$, то

$$a \to 2/3\sqrt{\sigma_0/\pi} + 0.$$

Среднее арифметическое значение α на промежутке (0, 1/4) составляет 0,125; тогда

$$\sigma_m = 0{,}8125,\ a = 0{,}339035748,$$

с погрешностью 1 % от точного значения.

При $\sigma_m = 0{,}7795$, $a = 0{,}33207$ и погрешность определения константы Блазиуса сужается до 0,003 %.

Итак, значение постоянной Блазиуса можно определять из интеграла уравнения Крокко:

$$a\sqrt{\pi}\,\mathrm{erf}(\sqrt{\ln(a/\varphi)}) = \int_0^h \sqrt{\sigma z}\,dz,$$

полагая $\varphi = 0$, $h = 1$, $\sigma = \sigma_m$, $\sigma_m > 3/4$.

Тогда получаем, что $a = (2/3)\sqrt{\sigma_m/\pi}$.

(в). **Псевдотеорема.** *Справедлива следующая рациональная оценка*: $a = 1/3$.

Доказательство. Действительно, напишем расщепляющий ряд для ряд для $\varphi(h)$ в следующем виде [5]:

$$\varphi(h) = a + \sum_{k\ge1}\lambda^k\varphi_k(h),\ \varphi'_1(0) = = \varphi_1(1) + a/\lambda = \varphi'_k(0) = \varphi_k(1) = 0,\ k \ge 2. \quad (3)$$

Такой плоский ряд представлен в работе В.П. Варина [2], где автор обозначает параметр разложения λ через C.

Подстановка ряда (3) в уравнение Крокко (1) со свободным членом $f(h)$ расщепляет последнее в систему линейных уравнений:

$$2a\varphi''_1 + f(h)/\lambda = 0,$$

$$2a\varphi''_k + \sum_{j=1}^{k}\varphi_j(h)\varphi''_{k-j}(h) = 0,$$

и тогда

$$\varphi(h) = \frac{1}{2a}\int_h^1 dz\int_0^z f(t)dt + \frac{1}{a}\sum_{k\ge2}\int_h^1 dz\int_0^z g_k(t)dt.$$

Очевидно, что это разложение не зависит от параметра λ. Здесь

$$g_k := \sum_{j=1}^{k}\varphi_j(h)\varphi''_{k-j}(h),\ k \ge 2.$$

При $h = 0$ получим равенство

$$\varphi(0) := a = \frac{1}{2a}\int_0^1(1-t)f(t)dt + + \frac{1}{a}\sum_{k=2}^{\infty}\int_0^1(1-t)g_k(t)dt,$$

или в символическом виде:

$$a = G_1 + \sum_{k=2}^{\infty}G_k,\ G_1 := \frac{1}{2a}\int_0^1(1-t)f(t)dt,$$

$$G_k := \frac{1}{a}\int_0^1(1-t)g_k(t)dt,$$

где $\forall k \ge 1$, $G_k > 0$, $G_k = G_1^k$.

Тогда, согласно формальному подходу, получаем равенство

$$\varphi(0) = \frac{G_1}{1-G_1} = \frac{\frac{1}{2a}\int_0^1(1-t)f(t)dt}{1-\frac{1}{2a}\int_0^1(1-t)f(t)dt}.$$

Пусть в этом равенстве $f(h) = h$, $\varphi(0) = a$. Тогда

$$a = \frac{1/(12a)}{1-1/(12a)},$$

$a = 1/3 = 0{,}3(3)$, что и требовалось доказать.

Псевдотеорема доказана.

Полученное значение a несколько отличается от точного значения, приводимого в работах [1, 2], не ниже, чем на 32 разряда, и оно составляет

$$a = 0{,}33205733621...,$$

т. е. отличается менее, чем на 0,4 %.

Расщепляющий (плоский) ряд для уравнения (3) приводит к последовательности (системе) линейных уравнений:

$$2a\varphi''_1 + f(h)/\lambda = 0,$$

$$2a\varphi''_k + \sum_{j=1}^{k}\varphi_j(h)\varphi''_{k-j}(h) = 0,$$

каждое из которых представляет необходимое условие минимума для соответствующих распределений.

Выпишем указанные уравнения в их естественной последовательности:

$$Z_1 = \int_0^1 (a(d\varphi_1 / dh)^2 - \varphi_1(h) f(h) / \lambda) dh,$$

$$Z_k = \int_0^1 \left(a(d\varphi_k / dh)^2 - \right.$$

$$\left. - \varphi_k(h) \sum_{j=1}^{k} \varphi_j \varphi''_{k-j} \right) dh \to \inf .$$

В результате получается, что нелинейная предельная задача «разваливается» на счетную последовательность линейных задач, обладающих интегралами энергии вида

$$E_1 = \psi_1^2 / 2 + \varphi_1(h) f(h) / \lambda,$$

$$E_k = \psi_k^2 / 2 + \varphi_k(h) \sum_{j=1}^{k} \varphi_j(h) \varphi''_{k-j}(h).$$

Такой результат не является неожиданным, поскольку уравнение Крокко (3) равносильно канонической системе.

Аналогичный результат получается при расщеплении и в случае с уравнением Блазиуса:

$$2d^2 y / dz^3 + y d^2 y / dz^2 = 0,$$

$$D(y) = (z : 0 < z < \infty), J(dy / dz) = (0,1),$$

$$z \in C^{(3)}(0, \infty),$$

не связанным ни с какими вариационными задачами.

Далее, пусть

$$y = z + \sum_{k=1} \lambda^k y_k(z),$$

и расщепленная линейная система принимает вид

$$2y'''_1 + zy''_1 = 0; \; 2y'''_k + zy''_k + \sum_{j=1}^{k} y_j y''_{k-j} = 0.$$

Очевидно, каждое из уравнений расщепленной системы не зависит от параметра λ, и каждое уравнение представляет необходимое условие минимума для некоторого распределения. Например, первое уравнение связано с необходимым условием минимума для распределения

$$Z_1 := \int_0^\infty ((d\varphi / dz)^2 + (1/4)(z\varphi)^2) dz, \; \varphi := y''_1.$$

Точнее, первое уравнение расщепленной системы содержится среди необходимых условий минимума Z_1 или эквивалентного распределения

$$Z_1^* := \int_0^\infty (d\varphi / dz - z\varphi / 2)^2 dz.$$

Заключение

В результате проведенного исследования показано, что приближенную оценку постоянной Блазиуса $a = \varphi(0)$ можно получить, если использовать простые интегральные оценки решения предельной задачи (1). Каноническая структура уравнения Крокко позволяет свести решение предельной задачи (1) к поиску критической точки положительного функционала (распределения). Разложения решения в плоский (расщепляющий) ряд сводит решение предельной задачи (1) к минимизации последовательности неотрицательных распределений. Формальное суммирование расщепляющего ряда приводит к рациональному приближению $a = 1/3$ для постоянной Блазиуса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Варин В.П.** Плоские разложения и их приложения. М.: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша № 23. 2014. 25 с.

[2] **Varin V.P.** A solution of the Blasius problem. Moscow: Keldysh Institute preprints. No. 40. 2013. 21 p.

[3] **Варин В.П.** Плоские разложения решений ОДУ вблизи особенности. М.: Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. № 64. 2010. 12 с.

[4] **Кащенко И.С.** Асимптотические разложения решений уравнений. Ярославль: Ярославский гос. ун-т им. П.Г. Демидова, 2011. 46 с.

[5] **Петриченко М.Р.** Расщепляющие разложения в предельных задачах для обыкновенных квазилинейных дифференциальных уравнений // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2012. № 2(146). С. 143–149.

[6] **Шварц Л., Юэ Д.** Математические методы для физических наук. М.: Мир, 1965.

С. 76–77 (пример 1-7).

[7] **Харди Г.Х.** Курс чистой математики. М.: Гос. изд-во иностр. лит-ры, 1949. С. 323 (7.11, 7.12).

[8] **Полубаринова-Кочина П.Я.** Теория движения грунтовых вод. М.: ГТТИ, 1952. С. 569–571.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ПЕТРИЧЕНКО Михаил Романович – *доктор технических наук, заведующий кафедрой Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.*

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

fonpetrich@mail.ru

Petritchenko M.R. ROUGH ESTIMATES OF THE BLASIUS CONSTANT.

Integral properties of homogeneous solutions of the Crocco boundary problem and splitting (flat) decomposition have been used for an approximate estimate of the Blasius constant. The derivative $d(\text{fi}) / dh$ was proved to have a logarithmic singularity at the point $h = 1$, therefore the second one tends to minus zero, and the function in itself tends to plus zero, because h tends to unity minus zero, so the splitting series is not slower to diverge as compared with the harmonic one. The existence of an integral invariant was proved for a uniform solution of the Crocco boundary problem, the solution exhibiting the squared norm of the solution derivative. The condition for distribution minimum was established to be satisfied along the real uniform solutions of the boundary Crocco problem.

CROCCO BOUNDARY PROBLEM, SPLITTING DECOMPOSITION, DISTRIBUTION DENSITY, HOMEOMORPHISM, INVARIANT OF BOUNDARY PROBLEM.

REFERENCES

[1] **V.P. Varin,** Flat expansions of solutions and their applications, Keldysh Institute preprints, Moscow, 23 (2014).

[2] **V.P. Varin,** A solution of the Blasius problem, Keldysh Institute preprints, Moscow, 40 (2013).

[3] **V.P. Varin,** Flat expansions of solutions to ODEs at singularities, Keldysh Institute preprints, Moscow, 64 (2010).

[4] **I.S. Kashchenko,** Asimptoticheskie razlozheniya reshenij uravnenij [Asymptotic expansions of solutions of equations], Yaroslavskij gos. un-t im. P.G. Demidova, Yaroslavl', 2011.

[5] **M.R. Petrichenko,** Splitting expansions for the ordinary quasi-linear differential equations in the limiting problems, St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. 2(146) (2012) 143–149.

[6] **L. Shvarts, D. Yue,** Matematicheskie metody dlya fizicheskikh nauk [Mathematical methods for physical sciences], Mir, Moscow, 1965, pp. 76–77 (example 1-7).

[7] **G.H. Hardy,** Kurs chistoj matematiki [A Course of Pure Mathematics], Gos. izd-vo inostr. lit-ry, Moscow, 1949, p. 323.

[8] **P.Ya. Polubarinova-Kochina,** Teoriya dvizheniya gruntovykh vod [Theory of groundwater flow], GTTI, Moscow, 1952, pp. 569–571.

THE AUTHOR

PETRITCHENKO Mikhail R.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

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

fonpetrich@mail.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.5
УДК 53.08; 004.9

А.Г. Железняк, В.Г. Сидоров

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ПЛАНШЕТНЫЙ СКАНЕР КАК ПРИБОР ДЛЯ ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Представлен новый метод оптического неразрушающего контроля свойств различных материалов: полупроводников, диэлектриков, металлов. Метод основан на измерении геометрических и оптических неоднородностей исследуемых объектов по характеристикам рассеянного объектами излучения. В качестве физического прибора для измерения интенсивности рассеянного излучения предложено использовать планшетный сканер. Анализ возможностей метода показал, что с его помощью можно измерять шероховатость и кривизну поверхности, выявлять одиночные дефекты на поверхности объектов, измерять электрофизические параметры материалов, прозрачных в видимой области спектра. Метод прост в реализации, не уступает по точности измерениям, проводимым с помощью многих специализированных физических приборов, превосходит дорогостоящее оборудование по объему и оперативности получаемой информации, позволяет проводить контроль свойств материалов в производственных условиях.

ПЛАНШЕТНЫЙ СКАНЕР, РАССЕЯНИЕ СВЕТА, ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ НЕОДНОРОДНОСТИ, ШЕРОХОВАТОСТЬ ПОВЕРХНОСТИ.

Введение

Поиск объективных методов неразрушающего контроля и разработка экспресс-методов оценки качества полупроводниковых и других материалов электронной техники представляет интерес как для исследовательских целей, так и для производства.

В работе [1] сообщалось об использовании планшетного сканера в сочетании с современными информационными технологиями для экспресс-диагностики свойств кристаллов карбида кремния. В развитие данного предложения к настоящему времени нами разработаны оригинальные методики исследования свойств различных материалов электронной техники [2 – 4]. Методики обеспечивают бесконтактный неразрушающий контроль свойств материалов при нетрадиционном использовании возможностей современной компьютерной техники, что обеспечивает им доступность и низкую стоимость аппаратного оформления.

Цели настоящей работы: обоснование идеи и физических основ метода исследования свойств материалов электронной техники с использованием планшетного сканера в качестве основного инструмента для измерений; сравнение возможностей метода с существующими; представление аппаратуры для его реализации и областей применения, а также демонстрация некоторых из полученных результатов.

Идея и физические основы метода

Можно смело утверждать, что надежным методом измерений является любой «дифференциальный» метод, особенно если

эти измерения проводятся не относительно опорного сигнала (он сам может оказаться источником ошибки его формирования), а относительно «чистого нуля». Для оптических измерений таким примером может служить метод рассеянного света. «Нулями» сигнала в нем являются состояния абсолютной прозрачности и абсолютного зеркального отражения. Эти случаи могут быть реализованы на серийно выпускаемых планшетных сканерах – периферийных устройствах для персональных компьютеров.

Планшетный сканер, благодаря особенностям его оптической схемы, «не видит» зеркальные поверхности и поэтому представляет собой идеальный физический прибор для регистрации рассеянного света плоскими объектами в видимом диапазоне длин волн.

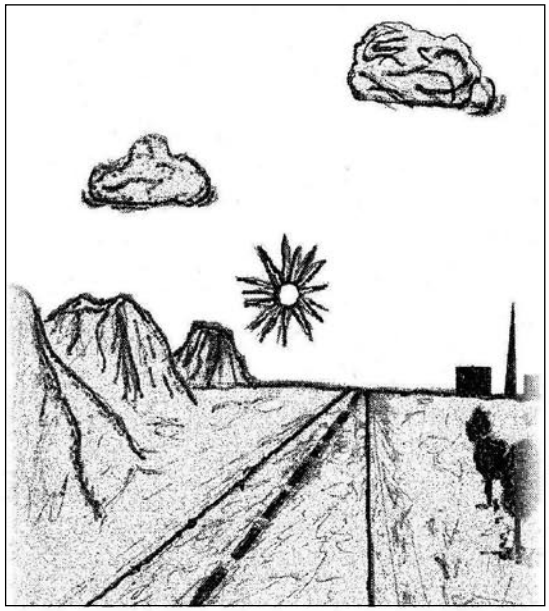
Прежде, чем перейти к описанию устройства различных моделей сканеров и их возможностей для проведения физических исследований, кратко остановимся на природе появления рассеянного света.

Окружающие нас предметы отражают падающий на них свет. С этим связана возможность их видеть. Отраженный от предметов свет имеет зеркальную и рассеянную составляющие. На рис. 1 схематически показано, как глаз человека видит реальный мир (рис. 1,*a*) и как бы он его видел, если бы все окружающие предметы только зеркально отражали свет, а атмосфера была бы абсолютно прозрачной (рис. 1, *b*).

Из приведенного примера видно, что, взаимодействуя с веществом различных объектов, свет создает зрительный образ предмета, прежде всего, за счет рассеянного света, а спектральный состав последнего несет информацию об оптических свойствах вещества. Рассеяние света определяется геометрическими и оптическими неоднородностями предметов. Чем неоднороднее объект, тем, как правило, интенсивнее рассеяние. Рассмотрим кратко природу неоднородностей исследуемых объектов, которые могут служить причиной рассеяния света.

К геометрическим неоднородностям можно отнести шероховатость поверхности исследуемого объекта. По измеренной интенсивности света, рассеянного шероховатой поверхностью, можно судить о величине шероховатости, об однородности рельефа шлифованной или полированной

a)



b)

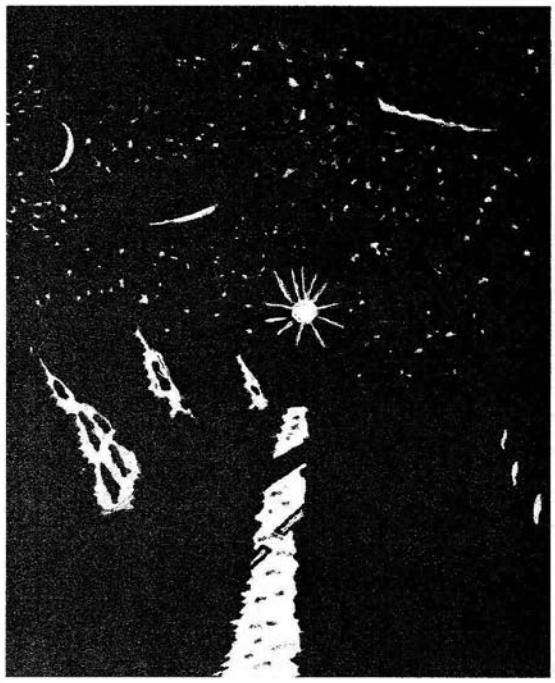


Рис. 1. Зрительное восприятие одной и той же местности в реальном (*a*) и чисто зеркальном (*b*) мирах

поверхности, о наличии на ней крупных дефектов.

Оптические свойства среды характеризуются ее комплексным показателем преломления. Непостоянство данного параметра в объеме исследуемого объекта свидетельствует о его оптической неоднородности и приводит к рассеянию падающего на объект излучения.

Природа оптических неоднородностей исследуемой среды разнообразна. Это могут быть вкрапления второй фазы или неоднородности химического состава среды, например негомогенность твердых растворов полупроводников и других материалов. Ярким примером регулярных оптических неоднородностей служат фотонные кристаллы. По характеристикам рассеянного излучения можно судить о степени оптической неоднородности среды, о концентрации, форме и ориентации центров рассеяния, об их распределении по размерам и в пространстве.

Из сказанного следует, что идея метода не нова, а исследование интенсивности и спектрального состава рассеянного света многократно привлекалось для изучения свойств различных материалов и сред. Проблема заключается в методах измерения, поскольку существующие методы и реализующие их экспериментальные установки весьма сложны и дороги.

Планшетный сканер как прибор для регистрации рассеянного света

Современный сканер [5 – 7] функционально состоит из двух частей: сканирующего механизма и программной части (TWAIN-модуль). Сканируемый объект располагается на прозрачном неподвижном стекле, вдоль которого передвигается каретка с источником света и линейкой фотоприемников (приборов с зарядовой связью – ПЗС-элементов, или фототранзисторов). Оптическая система сканера проецирует световой поток от объекта на фотоприемники, где осуществляется разделение информации по цвету. Фотоприемники преобразуют уровень освещенности в уровень напряжения. Далее аналоговый сигнал поступает на аналого-цифровой преобразователь (АЦП), из которого информация выходит в двоичном коде и после обработки в контроллере сканера через интерфейс с компьютером поступает в драйвер сканера – TWAIN-модуль, с которым взаимодействуют прикладные программы.

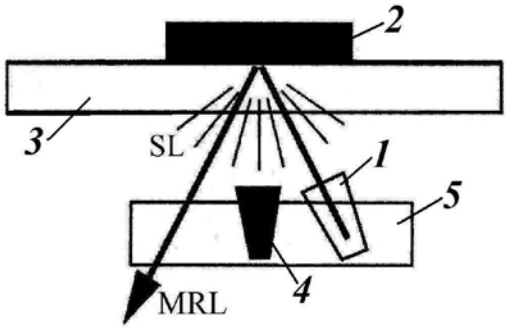


Рис. 2. Схема расположения элементов планшетного сканера (без элементов оптической системы): *1* – источник света, *2* – объект, *3* – стекло экспонирования, *4* – фотоприемники, *5* – каретка сканера; SL и MRL – рассеянный и зеркально отраженный свет, соответственно

Геометрия оптической системы сканера такова, что свет, зеркально отраженный от объекта, не попадает на фотоприемники (рис. 2), поэтому сканер можно использовать как физический прибор для регистрации рассеянного света.

Планшетный сканер, созданный для считывания изображений и текстов с полиграфической продукции, в руках физика-исследователя может служить превосходным инструментом для получения и последующего анализа изображений исследуемых объектов, т. е. может быть использован для их бесконтактной неразрушающей диагностики.

В качестве прибора для физических исследований планшетный сканер обладает следующими достоинствами:

это готовая экспериментальная установка для наблюдения рассеянного света от плоских объектов в видимом диапазоне длин волн;

в нем реализована плоская оптическая задача, что позволяет исключить погрешности, возникающие при контроле однородности свойств плоских объектов с помощью

устройств со сферическими или цилиндрическими оптическими системами (фотоаппарат, видеокамера, микроскоп и т. п.);

он обеспечивает высокую скорость сбора информации от объектов большой площади и позволяет регистрировать и обрабатывать большие массивы информации. Это возможно благодаря бесконтактному построчному считыванию информации, в отличие от последовательной линейной (к тому же, в большинстве случаев контактной) регистрации информации в современных микрозондовых методах (профилометры и различные сканирующие микроскопы, в том числе электронные, туннельные, атомно-силовые) [8];

с его помощью достигается высокая точность измерений величин, имеющих случайную погрешность.

Модели планшетных сканеров

Несмотря на то, что планшетные сканеры сравнительно просты в использовании, они представляют собой весьма сложные оптико-электронно-механические устройства. Вне зависимости от фирмы производителя, интерфейса, габаритов и технологии сканирования все сканеры имеют плоско-горизонтальную конструкцию, тогда как их сканирующие элементы могут быть различными. Наиболее часто используются следующие модели: CIS, LIDE и CCD [5 – 7].

Сканер, использующий технологию контактного датчика изображения CIS (Contact Image Sensor), не содержит оптики. На сканирующей каретке смонтирован источник света, состоящий из трех групп светодиодов, генерирующих свет в красном, зеленом и синем диапазонах длин волн. Суммарное белое излучение падает на объект и, отражаясь, возвращается на сканирующую головку – линейку фотоприемников, расположенную в непосредственной близости от предметного стекла сканера. Длина светочувствительной линейки соответствует ширине стекла сканера, поэтому дополнительные элементы оптики (зеркала, призмы, линзы) в сканере подобной конструкции отсутствуют.

Сканеры с непрямым светодиодным экспонированием LIDE (LED InDirect Exposure) являются улучшенной версией технологии CIS. Здесь в качестве источника света используются мощные трехцветные RGB- светодиоды (Red, Green, Blue – красный, зеленый, синий), излучение которых направляется на объект по кварцевому световоду, который обеспечивает равномерное экспонирование оригинала по всей ширине окна сканера (рис. 3).

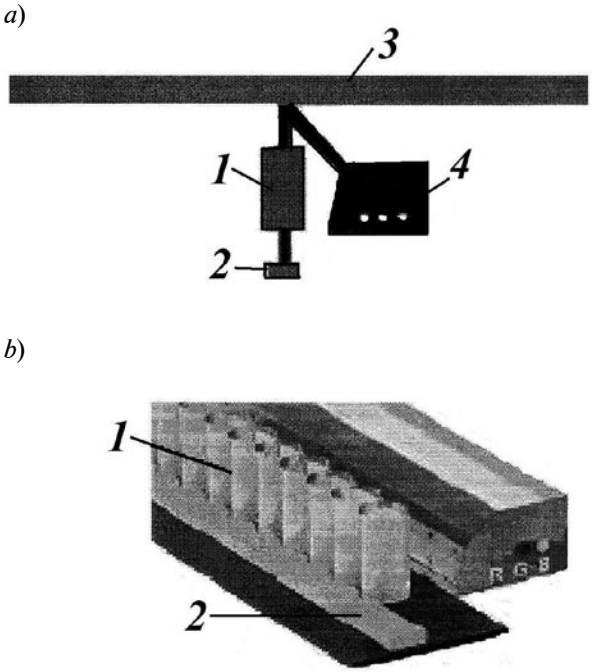


Рис. 3. Схема сканера технологии LIDE (*a*) и светочувствительная линейка сканера (*b*): *1* – цилиндрические линзы, *2* – линейка фототранзисторов, *3* – стекло экспонирования, *4* – световод

Цилиндрические линзы собирают рассеянный объектом свет в однородные пучки на линейке оптоэлектронных преобразователей из фототранзисторов, которые характеризуются значительной величиной отношения сигнал/шум и высокой чувствительностью, по сравнению с любыми другими существующими приемными сенсорами (рис. 3, *b*).

В планшетном сканере типа CCD (Charge Coupled Device), в отличие от технологии CIS и LIDE, оптическая система состоит из объектива, зеркал или призм, проецирующих световой поток от сканируемого объекта на систему фотоприемников (рис. 4).

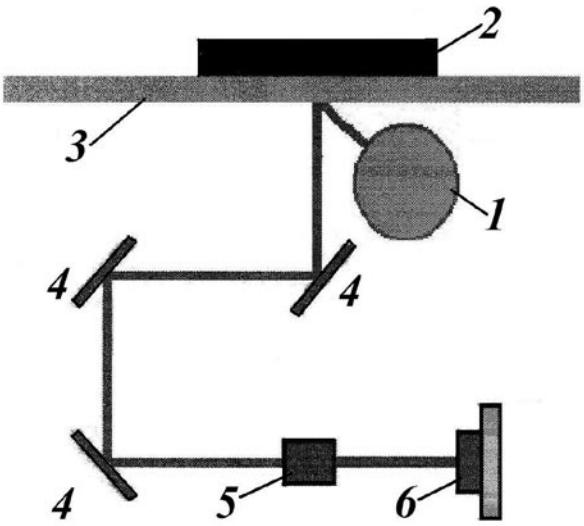


Рис. 4. Расположение элементов в сканере технологии CCD:
1 – источник света, *2* – объект, *3* – стекло экспонирования, *4* – зеркала, *5* – объектив, *6* – ПЗС-матрица

Система фотоприемников состоит из трех параллельных ПЗС-линеек с равным числом одинаковых светочувствительных элементов (каждая со своим красным, зеленым и синим светофильтрами), принимающих информацию о содержании «своих» цветов в световом потоке от сканируемого объекта. В качестве осветителей в сканерах CCD используются люминесцентные лампы. Если сканируются прозрачные образцы, то используется так называемый слайд-адаптер, для которого включается вторая лампа, расположенная в крышке сканера. Эта лампа перемещается строго параллельно считывающей головке сканера.

Основные характеристики сканеров

Оптическое разрешение. Это количество элементов в линейке фотоприемников, деленное на максимальную ширину сканируемой области, т. е. ширину предметного стекла сканера (*dpi*-параметр). Для сканеров CCD предельная величина *dpi* = 9600, для сканеров LIDE – 4800. Данный параметр определяет число каналов, по которым параллельно измеряется интенсивность светового потока, рассеянного объектом, и линейные размеры каждого канала (см. таблицу).

Механическое разрешение. Это количество «считываний» информации линейкой фотоприемников (число строк), деленное на длину пути, пройденного сканирующей кареткой за то же время. Часто механическое разрешение называют оптическим, что неверно. Как правило, оно вдвое больше оптического и задается изготовителем.

Интерполяционное разрешение. Это произвольно заданное разрешение, до которого программа сканера «сама рассчитывает» недостающие точки (например, выдает 16 × 16 точек, получив со сканера всего 3 × 3 точки). При физических исследованиях этот параметр использовать не следует.

Таблица

Оптическое разрешение и информационные каналы планшетного сканера

Оптическое разрешение сканера (*dpi*-параметр)	Линейные размеры одного канала, мкм	Число параллельных каналов на 1 см^2
600	42,3 × 42,3	$5{,}6 \cdot 10^4$
1200	21,2 × 21,2	$2{,}2 \cdot 10^5$
2400	10,6 × 10,6	$8{,}9 \cdot 10^5$
4800	5,3 × 5,3	$3{,}6 \cdot 10^6$
9600	2,6 × 2,6	$1{,}5 \cdot 10^7$

Глубина цвета (количество бит на цвет, разрядность). Обычное количество двоичной информации о цвете одной точки полноцветного изображения в компьютере – 24 бита на каждую точку, по 8 бит на каждый из основных цветов RGB, что дает порядка 17 млн. вариантов цвета этой точки. Более тонкие оттенки глаз человека не различает.

Диапазон оптических плотностей. Оптическая плотность – это характеристика объекта сканирования. Она вычисляется как десятичный логарифм отношения интенсивности света, падающего на объект, к интенсивности света, отраженного от него или прошедшего через прозрачный объект. Минимально возможное значение 0,0 D соответствует идеально белому или прозрачному объекту, значение 4,0 D – предельно черному или непрозрачному объекту. Диапазон оптических плотностей сканера характеризует его способность различать близлежащие оттенки. Максимальная оптическая плотность для сканера – это оптическая плотность объекта, которую сканер еще отличает от «полной темноты». Все оттенки объекта темнее этой границы сканер не различает. Это означает, что сканер может потерять все детали сканируемого объекта как в его темных, так и в светлых участках. Этот параметр важен для физических исследований, поскольку более широкий диапазон оптических плотностей сканера позволяет получать более детальную информацию о сканируемых объектах.

Приведем также обычно не сообщаемые, но чрезвычайно важные параметры ПЗС-фотоприемной линейки для сканеров CCD-технологии.

Уровень шума ограничивает динамический диапазон и реальное число разрядов данных, содержащих полезную информацию. Если к дешевой шумящей линейке подключить 36-битный АЦП, то качество получаемого изображения не улучшится, но и не ухудшится. Отметим, что уровень шума в сканерах CCD может быть в несколько раз выше, чем в сканерах LIDE. При физических исследованиях уровень шума сканера может быть измерен и учтен при анализе результатов.

Разброс чувствительности от ячейки к ячейке в ПЗС-линейке. Даже если в сканере предусмотрена калибровка, она выполняется по усредненным значениям от нескольких соседних ячеек, что скрывает мелкие детали изображения.

Уровень перекрестных помех. Это влияние ярко освещенных ячеек на соседние, что также скрывает мелкие детали изображения.

Совмещение цветов. В однопроходных сканерах CCD-технологии цвет падающего света определяется тремя линейками из ПЗС-элементов, для которых технологически трудно обеспечить абсолютную идентичность, а поэтому возможны искажения в получаемых изображениях.

Кроме того, для сканеров CCD-технологии само наличие оптической системы потенциально закладывает возможные искажения в получаемые изображения, поскольку перекос любого элемента в оптической системе приведет к неоднородному считыванию информации вдоль каждой строки, чего нет в сканерах LIDE-технологии, которые обеспечивают более высокую геометрическую точность при сканировании. CCD-сканеры из-за наличия длиннофокусной оптической системы обеспечивают большую глубину резкости (до 5 мм) в отличие от сканеров LIDE (до 0,5 мм). В сканерах LIDE, как правило, отсутствует слайд-модуль.

Анализ изображений, полученных со сканера

В современных сканерах используется трехканальная система представления цвета – RGB. Каждый канал имеет 256 градаций интенсивности. Нулевое значение соответствует отсутствию рассеянной компоненты, т. е. сканируемый объект представляет собой идеальное зеркало. Значению 255 соответствует идеально рассеивающая поверхность, зеркальная компонента отсутствует. В результате имеем $256^3 = 16\ 777\ 216$ цветовых оттенков, которые различает компьютер, что очень близко к чувствительности человеческого глаза.

Сканер разбивает изображение на отдельные точки – пикселы, количество и линейные размеры которых зависят от

оптического разрешения сканера (см. таблицу). Каждый пиксел имеет свой цветовой «паспорт», а именно, обладает своими координатами в RGB-пространстве. Например, запись (185, 17, 110) означает, что пиксел отображает красный, зеленый и синий цвета с интенсивностями 185, 17 и 110, соответственно. Компьютер получает пикселы со своими «паспортами» и хранит информацию о них в своей памяти.

С помощью сканера удается одновременно вводить для обработки в компьютер $10^4 - 10^7$ независимых точек отсчета в одном измерении с каждого квадратного сантиметра поверхности формата А4 (см. таблицу), что существенно отличает сканер от систем с одномерной регистрацией сигналов, как это делается в различных сканирующих приборах (атомно-силовой, электронный и туннельный сканирующие микроскопы и др.), которые имеют лучшее геометрическое разрешение, но значительно уступают сканеру по быстродействию и размерам анализируемой площади [8].

Существует ряд графических редакторов, позволяющих обрабатывать большие массивы информации. Чаще других используется графический редактор Adobe Photoshop. Он позволяет подсчитывать количество пикселов в изображении, выводить их распределение по яркостям в виде гистограммы, проводить усредненные оценки по площадям.

Для физических исследований больше подходит программа Origin, основным преимуществом которой является возможность математической обработки данных, полученных со сканера. Origin поддерживает создание двух- и трехмерной научной графики, позволяет проводить численный анализ данных, включая различные статистические операции, выполнять аппроксимацию результатов различными аналитическими зависимостями. Пользуясь данной программой, можно строить гистограммы в различных масштабах, например в логарифмическом. Это позволяет оценивать более широкий диапазон интенсивностей рассеянного света, т. е. определять размеры не только доминирующих рассеивающих образований в исследуемом объекте, но и видеть редко встречающиеся на общем фоне более мелкие и более крупные элементы.

В эксперименте можно с одинаковым успехом использовать сканеры конструкций CCD и LIDE, применяя каждый из них в зависимости от решаемых задач и ориентируясь на перечисленные выше особенности этих моделей. Чтобы не вносить искажения в получаемые изображения, рекомендуем никогда не использовать внутренние настройки сканера и не сохранять изображения в *jpg*-формате, так как при этом можно потерять значительную часть информации. Для сохранения изображений можно использовать один из следующих форматов: *tif, bmp, pnd* или *raw* [9].

Следует отметить общий недостаток, свойственный всем моделям сканеров. Каждый из них требует своей индивидуальной калибровки, поскольку даже два сканера одной модели, от одного производителя могут различаться по своим характеристикам. По-видимому, это следствие ручной настройки каждого сканера при его изготовлении. На копирование полиграфической продукции это обстоятельство существенного влияния не оказывает, но для надежности получаемых результатов в физическом эксперименте имеет определяющее значение.

Примеры реализации метода

В качестве подтверждения широких возможностей использования планшетных сканеров для физических исследований приведем несколько практических примеров.

На рис. 5 представлена гистограмма распределения интенсивности рассеянного света от пластины сапфира в линейном и логарифмическом масштабах. Логарифмический масштаб позволяет увидеть неоднородности полировки пластины, которые не видны на линейной гистограмме. Основной максимум гистограммы соответствует преимущественному рельефу на поверхности пластины, полуширина максимума отражает разброс шероховатости относительно средней величины, а практически

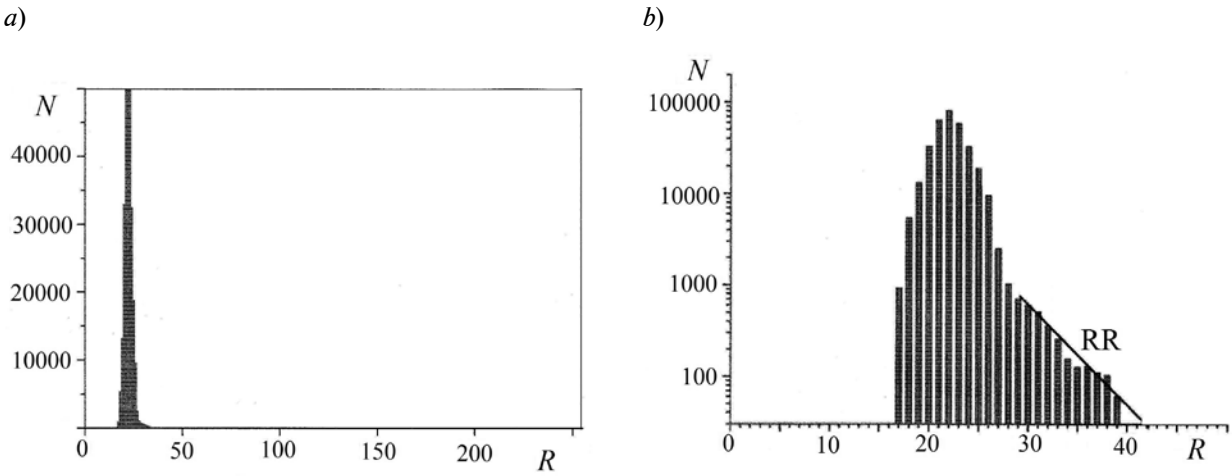


Рис. 5. Гистограмма распределения интенсивности света, рассеянного пластиной сапфира, построенная в линейном (*a*) и логарифмическом (*b*) масштабах:
RR (Rare, Rouphness) – редкие, более грубые неровности

экспоненциальный спад справа от максимума RR соответствует присутствию на поверхности пластины грубого рельефа, что свидетельствует о недошлифовке пластины на предыдущем этапе ее обработки.

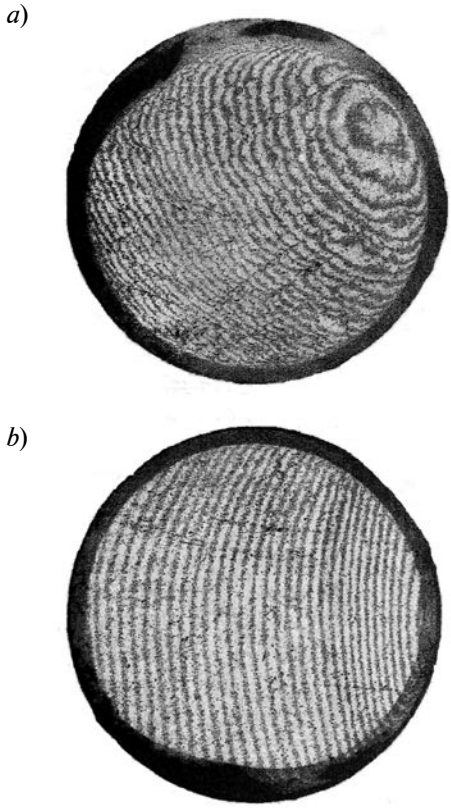


Рис. 6. Рельефы поверхности оптического окна из CaF_2 до (*a*) и после (*b*) финишной полировки

На рис. 6 показаны рельефы поверхности оптического окна из фторида кальция CaF_2, полученные с помощью сканера до и после финишной полировки. Искривления интерференционных полос (колец Ньютона) демонстрируют неоднородности рельефа. На пластине, прошедшей финишную полировку, кольца Ньютона расположены параллельно и на одинаковых рас-

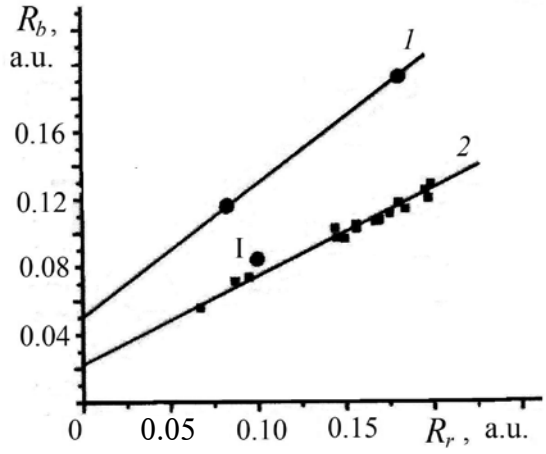


Рис. 7. Определение политипа кристаллов карбида кремния:
1 – кубический 3C-SiC, *2* – гексагональный 6H-SiC. Образец I, кубический по паспорту, оказался гексагональным

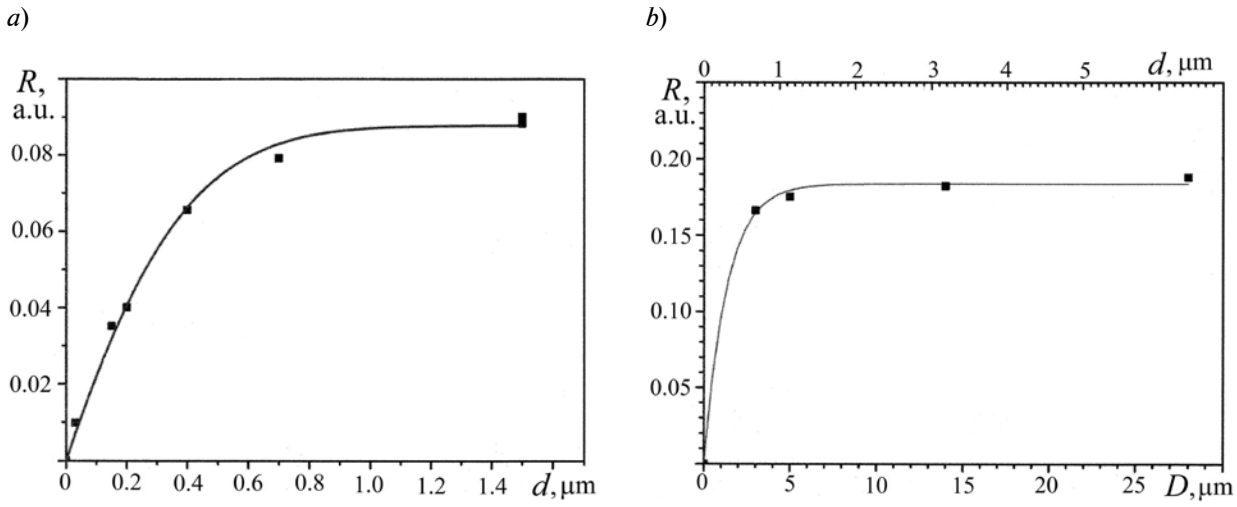


Рис. 8. Калибровочные зависимости для определения шероховатости поверхности для кварца (*a*) и стекла (*b*):
символы – эксперимент, сплошные линии – аппроксимация, d – шероховатость, D – размер зерна абразива, использованного при шлифовке

стояниях друг от друга, т. е. на поверхности нет вершин и провалов, а кривизна колец свидетельствует о небольшой конусности поверхности.

Рис. 7 демонстрирует возможности сканера при определении политипа кристаллов карбида кремния SiC, полученных по технологии Lely. Образец I из набора кубических кристаллов 3C-SiC оказался на самом деле гексагональным политипом 6H-SiC. По осям графика отложены в относительных единицах интенсивности рассеяния света образцами карбида кремния в красном (R_r) и синем (R_b) диапазонах длин волн.

На рис. 8 приведены калибровочные зависимости для определения шероховатости пластин кварца и стекла по данным сканирования. Количественная калибровка по величине шероховатости выполнена с помощью измерений на профилометре. На графиках точки соответствуют экспериментальным данным, полученным с помощью сканера, сплошные кривые – аппроксимация.

Подробное описание методик, использующих планшетный сканер для получения результатов, представленных на рис. 5 – 8, предполагается представить в наших дальнейших публикациях.

Заключение

Разработан относительно недорогой метод неразрушающего контроля поверхностных и объемных свойств изделий и материалов электронной техники, основанный на применении планшетного сканера для измерения оптической неоднородности контролируемых объектов по характеристикам излучения, рассеянного этими объектами.

Объектами контроля могут быть твердые, жидкие и сыпучие полупроводниковые, диэлектрические и металлические объекты. Контроль может быть выполнен одновременно для серии образцов, размещенных в пределах рабочего окна сканера А4 (290 × 210 мм), независимо от их количества, размеров и формы.

Метод предназначен для использования, в первую очередь, на производстве как для 100%-го цехового контроля, так и для выборочного экспресс-контроля в заводских лабораториях, но представляет интерес и для исследовательских целей.

Универсальность метода определяется тем, что в нем удачно сочетаются достаточно высокие чувствительность и разрешающая способность, быстрота измерений,

компактность измерительного оборудования, простота обслуживания, отсутствие жестких требований к размещению и установке и сравнительно невысокая цена.

Принципиальное отличие разработанного метода от методов, использующих узкоспециализированное оборудование, состоит в том, что при низкой цене и простоте аппаратного оформления он позволяет измерять широкий спектр физических параметров материалов с достаточно высокой точностью путем обработки большого объема информации, полученной от контролируемого объекта.

В настоящее время в лабораторных условиях разработаны и освоены методики, позволяющие выполнять следующие функции:

измерять физические параметры материалов (от практически прозрачных до почти абсолютно черных в видимой области спектра);

измерять степень шероховатости (от 2 нм и грубее) полированных и шлифованных плоских поверхностей, однородность их обработки по площади объекта с латеральным разрешением участков 3 – 10 мкм; количественно оценивать степень недополировки-недошлифовки поверхности на каждой стадии обработки, т. е. выявлять грубый рельеф, включая царапины, на фоне более мелкого;

разделять свет, рассеянный прозрачным объектом, на составляющие (рассеяние от объема, от лицевой и обратной поверхностей) и тем самым раздельно характеризовать поверхностные и объемные свойства объекта;

определять количество, положение и размеры дефектов, их форму и геометрические размеры в пределах оптической разрешающей способности сканера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Горохов Е.В., Титков И.Е., Штурбин А.В.** Применение графического редактора ADOBE FOTOSHOP для экспресс-диагностики кристаллов карбида кремния // 3-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Санкт-Петербург. 5–8 декабря 2001. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2001. С. 99.

[2] **Железняк А.Г., Сидоров В.Г., Штурбин А.В.** Новые оптические методы неразрушающего контроля свойств полупроводниковых материалов и структур // Book of papers of the 5-th Belarussian-Russian Wookshop “Semiconductor Lasers and Systems”, 1 – 5 June 2005. Minsk, Belarus, 2005. Pp. 168–171.

[3] **Железняк А.Г., Сидоров В.Г., Штурбин А.В., Шмидт Н.М.** Магнито-абразивная обработка подложек, предназначенных для эпитаксиального выращивания полупроводниковых структур, и бесконтактный метод контроля качества обработки поверхности // 3-я Всероссийская конференция «Нитриды галлия, индия и алюминия: структуры и приборы», Москва, 7 – 9 июня 2004. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2004. С. 17–18.

[4] **Железняк А.Г., Сидоров В.Г., Штурбин А.В.** Диагностика гомогенности твердых растворов III-нитридов средствами современных IT-технологий // Book of papers of the 6-th Belarusian-Russian Workshop «Semiconductor Lasers and Systems», 4–8 June 2007. Minsk, Belarus, 2007. Pp. 183–186.

[5] **Степаненко О.С.** Сканеры и сканирование: краткое руководство. М.: Издательский дом «Вильямс», 2004. 288 с.

[6] **Шпунт Я.Б.** Сканирование изображений; 4-е изд. испр. и доп. М.: Изд-во «НТ Пресс», 2004. 411 с.

[7] **Овчинников С.М.** Секреты сканирования изображений и символов на персональном компьютере. М.: «Майор», 2002. 240 с.

[8] **Рыков С.А.** Сканирующая зондовая микроскопия полупроводниковых материалов и наноструктур : СПб.: Наука, 2001. 52 с.

[9] **Жук Ю.А.** Компьютерная графика. Средства создания и обработки растровых изображений. Учеб. пособие. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2014. 118 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЖЕЛЕЗНЯК Александр Генрихович – *технический директор ООО «МАО».*
141551, Российская Федерация, Московская обл., Солнечногорский район, Андреевка, д. 16Б
Igrok50@yandex.ru

СИДОРОВ Валерий Георгиевич – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники ИФНиТ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

sidorov@rphf.spbstu.ru

Zheleznyak A.G., Sidorov V.G. FLATBED SCANNER AS AN INSTRUMENT FOR PHYSICAL STUDIES.

A new method for nondestructive testing of the optical properties of various materials (semiconductors, dielectrics and metals) has been presented. It is based on the determination of geometric and optical inhomogeneities of the objects using the measurement data on the objects characteristics of the light scattered by them. It has been proposed to use a flatbed scanner as a physical device for measuring the scattered light. An analysis of the method possibilities showed that it is possible to measure the roughness and surface curvature, identify single defects on the surface, to measure the electrophysical parameters of materials being transparent in the visible region of the spectrum by means of the scanner. The method is simple to implement, it is on par with the accuracy of measurements made with many specialized physical devices, it is superior to the expensive equipment in a body of on-line information, it makes testing material properties under production conditions possible.

FLATBED SCANNER, LIGHT SCATTERING, GEOMETRICAL AND OPTICAL INHOMOGENEITIES, SURFACE ROUGHNESS.

REFERENCES

[1] **E.V. Gorokhov, I.E. Titkov, A.V. Shturbin,** Primeneniye graficheskogo redaktora ADOBE-FOTOSHOP dlya ekspress-diagnostiki kristallov karbida kremniya [The use of graphic editor Adobe Photoshop for rapid diagnosis of silicon carbide crystals] // 3-ya Vserossiyskaya molodezhnaya konferentsiya po fizike poluprovodnikov i poluprovodnikovoy opto- i nanoelektronike, St. Peterburg, December 5–8, 2001. Izd-vo SPbGTU, St. Petersburg, 2001, p. 99.

[2] **A.G. Zheleznyak, V.G. Sidorov, A.V. Shturbin,** Novyye opticheskiye metody nerazrushayushchego kontrolya svoystv poluprovodnikovykh materialov i struktur [New optical methods of nondestructive testing of properties of semiconductor materials and structures] // Book of papers of the 5-th Belarussian-Russian Wookshop “Semiconductor Lasers and Systems”, June 1–5, 2005. Minsk, Belarus, 2005, pp.168–171.

[3] **A.G. Zheleznyak, V.G. Sidorov, A.V. Shturbin, N.M. Shmidt,** Magnito-abrazivnaya obrabotka podlozhek, prednaznachennykh dlya epitaksialnogo vyrashchivaniya poluprovodnikovykh struktur, i beskontaktnyy metod kontrolya kachestva obrabotki poverkhnosti [Magneto-abrasive treatment of substrates designed for epitaxial growth of semiconductor structures, and non-invasive method of monitoring the quality of surface treatment] // 3-ya Vserossiyskaya konferentsiya «Nitridy galliya, indiya i alyuminiya: struktury i pribory», Moscow, June 7–9, 2004. Izd-vo SPbGPU, St. Petersburg, 2004, pp. 17–18.

[4] **A.G. Zheleznyak, V.G. Sidorov, A.V. Shturbin,** Diagnostika gomogennosti tverdykh rastvorov III-nitridov sredstvami sovremennykh IT-tekhnologiy [Diagnosis of homogeneity in solid solution of III-nitride by means of modern IT-technologies] // Book of papers of the 6-th Belarusian-Russian Workshop “Semiconductor Lasers and Systems”, June 4–8, 2007. Minsk, Belarus, 2007, pp. 183–186.

[5] **O.S. Stepanenko,** Skanery i skanirovaniye : kratkoye rukovodstvo [Scanners and scanning: a quick guide] M.: Izdatelskiy dom “Vilyams”, 2004.

[6] **Ya.B. Shpunt,** Skanirovaniye izobrazheniy [Scanning of images]: 4-ye izd. ispr. i dop. Izd-vo «NT Press», Moscow, 2004.

[7] **S.M. Ovchinnikov,** Sekrety skanirovaniya izobrazheniy i simvolov na personalnom kompyutere [Scanning secrets of images and symbols on person computer], Mayor, Moscow, 2002.

[8] **S.A. Rykov,** Skaniruyushchaya zondovaya mikroskopiya poluprovodnikovykh materialov i nanostruktur [Scanning probe microscopy of semiconductor materials and nanostructures], Nauka, St. Petersburg, 2001.

[9] **Yu.A. Zhuk,** Kompyuternaya grafika. Sredstva sozdaniya i obrabotki rastrovykh izobrazheniy [Computer graphics. Tools for creating and processing bitmap images], Izd-vo Politekhn. un-ta, St. Petersburg, 2014.

THE AUTHORS

ZHELEZNYAK Alexander G.
MAO, LLC
16B, Andreevka, Moskow Oblast, 141551, Russian Federation
Igrok50@yandex.ru

SIDOROV Valeriy G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
sidorov@rphf.spbstu.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.6
УДК 537.86:519.2, 581.785.4, 681.883.63

В.Д. Купцов, В.П. Валюхов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ФОТОИНТЕГРАТОР ДЕТЕКТОРА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЯДЕР КОНДЕНСАЦИИ

В статье представлены результаты разработки фотометра детектора молекулярных ядер конденсации (MCN) и исследования его пороговой чувствительности к оптическому сигналу. На основе обобщения прежних исследований фотоприемных устройств оптико-электронных систем определен наиболее рациональный прием расчета чувствительности этих систем – через создание эквивалентных шумовых схем и интегрирование временных зависимостей импульсной функции интегратора. Проведенный расчетный анализ позволил внести ряд усовершенствований в разработанный фотоинтегратор.

ИНТЕГРАТОР, ПОРОГОВАЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ, ФОТОПРИЕМНОЕ УСТРОЙСТВО, ФОТОМЕТР, ДЕТЕКТОР МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЯДЕР КОНДЕНСАЦИИ.

Введение

Интеграторы фототока (фотоинтеграторы) составляют основу оптических фотометров, позволяющих прецизионно измерять чрезвычайно малые световые потоки. Такие фотометры используются в физическом эксперименте в том случае, если необходимо получить предельно достижимую чувствительность оптической измерительной системы при относительно невысоких скоростях протекания физического процесса. Применяются фотометры в самых разных областях жизнедеятельности человека, начиная с медицины (например, в системах измерения оптических плотностей растворов и аэрозолей) и заканчивая (в качестве примера) горно-обогатительными технологиями (в рентгеновских сцинтилляционных детекторах). Актуальной проблемой создания высокочувствительных фотометров является снижение порогового значения оптической мощности, регистрируемой фотоприемным устройством. В данной статье представлены результаты разработки фотометра детектора молекулярных ядер конденсации (MCN – Molecular Condensation Nuclei), отвечающего современным требованиям.

Цель настоящей статьи – провести рациональный анализ пороговой чувствительности разработанного детектора к оптическому сигналу и на этой основе максимально усовершенствовать это фотоприемное устройство.

Фотометр детектора молекулярных ядер конденсации

Фотометр – один из основных элементов высокочувствительных газоанализаторов на основе явления конденсации молекулярных ядер (MCN). Принцип работы таких газоанализаторов заключается в ряде последовательных физико-химических воздействий на непрерывный поток газа, содержащий примеси, подлежащие идентификации и количественному анализу [1, 2]. В результате указанных воздействий на молекулы детектируемого вещества образуется монодисперсный аэрозоль с размерами частиц 0,23 – 0,25 мкм [3]. Светорассеяние каждой частицы имеет интерференционный немонотонный характер [4]. На заключительной стадии образования аэрозоля измеряется его светорассеяние нефелометрическим методом. Сигнал фотоприемного устройства нефелометра пропорционален концентрации определяемой примеси на входе в детектор. При этом размер частиц аэрозоля, полученного в результате воздействия, оказывается примерно в 1000 раз больше размера исходной молекулы детектируемо-

го вещества. Соответственно способность детектируемой частицы аэрозоля отражать падающий свет увеличивается примерно в $10^{14} - 10^{16}$ раз, по сравнению с таковой для исходной молекулы, и это позволяет надежно обнаруживать молекулы исходного вещества, заключенные в аэрозоль, по светорассеянию частиц аэрозоля [5].

Механизм физико-химического воздействия пересыщенного пара на MCN исследован в работах [6, 7]. В первой из них рассмотрены вопросы о работе, затраченной на образование кластеров, и об их равновесных концентрациях. Выведено уравнение, связывающее работу по переносу молекулярного ядра конденсации из газовой фазы в гомогенный кластер с работой по разрыву отдельных контактов. В работе [7] представлены модельные расчеты нуклеации пересыщенного пара ди(2-этилгексил) себацината (DEHS) на молекулах оксида железа FeO, выполненные с использованием простейших структурных моделей кластеров. Установлено, что большую роль в нуклеации DEHS на молекулах FeO играет взаимодействие электрических зарядов молекулярных ионов оксида железа с эфирными группами молекулы DEHS. Выявлено принципиальное значение прочности контакта MCN с первой молекулой конденсата. Прочность этого контакта существенно влияет как на коэффициент превращения MCN в аэрозольные частицы, так и на характер зависимости этой величины от фона спонтанной конденсации.

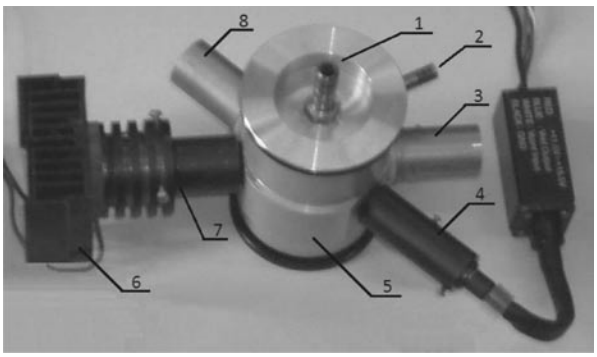


Рис. 1. Внешний вид малогабаритного аэрозольного фотометра:
1, *2* – входное и выходное отверстия газа-носителя; *3* – светопоглотитель фотоприемного устройства; *4* – лазер; *5* – фотометрируемый объем; *6* – фотоприемное устройство; *7* – тубус фотоприемного устройства; *8* – светопоглотитель лазера

Как уже отмечалось, измерение светорассеяния полученного аэрозоля производится нефелометрическим методом. Для этого внутреннюю полость аэрозольного фотометра освещают через специальное отверстие лампой или лазером и измеряют светорассеяние под некоторым углом к падающему свету. Фототок приемного устройства аэрозольного фотометра пропорционален счетной концентрации аэрозоля и, в конечном счете, концентрации молекул детектируемой примеси на входе в детектор MCN.

Разработанная конструкция аэрозольного фотометра для исследования светорассеяния детектора MCN представлена на рис. 1 [3].

Фотометр выполнен по нефелометрической схеме, т. е. в нем измеряется рассеянное оптическое излучение под углами, отличными от нулевого значения. Поток газа-носителя (воздуха) с аэрозольными частицами поступает в камеру нефелометра через верхнее сопло *1* входа газа-носителя, освещается световым потоком от излучателя *4* (лазер, светодиод или лампа накаливания). Рассеянное излучение попадает на коллимирующую линзу и детектируется фотоприемным устройством *6*, расположенным под углом 40° по отношению к падающему свету. Для защиты от попадания на детектор паразитных засветок от достаточно мощного источника света, фотоприемное устройство расположено в длинном тубусе *7*, а напротив излучателя и фотоприемного устройства расположены ловушки *8* и *3* со светопоглотителями. Выводится поток газа-носителя через штуцер *2*. Фотометрируемый объем внутри камеры фотометра составляет $2 \cdot 10^{-6}$ м^3, что представляет собой значительную величину по сравнению с аналогичными объемами фотометров в существующих спектроанализаторах. Выходным сигналом фотодетектора фотометра является ток, изменяющийся пропорционально световому потоку в пределах от $1 \cdot 10^{-15}$ до $1 \cdot 10^{-7}$ А. На выходе фотоприемного устройства интегри-

рующего типа формируется электрический сигнал, пропорциональный концентрации детектируемого вещества.

Аэрозольные частицы в фотометрируемом объеме имеют радиус рассеивающих частиц примерно 0,25 мкм и незначительный разброс величины вокруг этого значения [8]. Поэтому светорассеяние аэрозольными частицами исследовано в работах [5, 9] на основе теории Ми, которая рассматривает это явление на сферических частицах с размерами, сравнимыми с длиной световой волны λ. Установлено [5], что интенсивность светорассеяния для аэрозольной частицы (при оптимальном угле наблюдения) приблизительно в три раза больше таковой для воздуха в фотометрируемом объеме аэрозольной камеры нефелометра и превышает примерно в 10^{15} раз эту интенсивность для самой молекулы детектируемой примеси. Экспериментально измеренные значения мощности светорассеяния аэрозольными частицами и воздухом в фотометрируемом объеме малогабаритного аэрозольного фотометра превышают теоретически рассчитанные всего на 8 – 10 %, что для этих величин является удовлетворительным результатом. Оптимизация конструкции камеры аэрозольного фотометра и его оптико-электронной части позволили достигнуть предела обнаружения целевого компонента газоанализатора на уровне фона спонтанной конденсации, а не предельной чувствительности ФПУ детектора. Использование фотоэлектронного умножителя и интегратора в составе фотоприемного устройства фотометра детектора MCN позволяет калибровать газоанализатор по светорассеянию воздуха в фотометрируемом объеме камеры фотометра.

Светорассеяние воздухом внутри фотометрируемого объема представляет собой паразитную фоновую засветку при измерении светорассеяния аэрозольными частицами. Расчет светорассеяния воздухом был проведен на основе теории Рэлея [9].

Разработаны малогабаритный аэрозольный фотометр, микропроцессорный блок

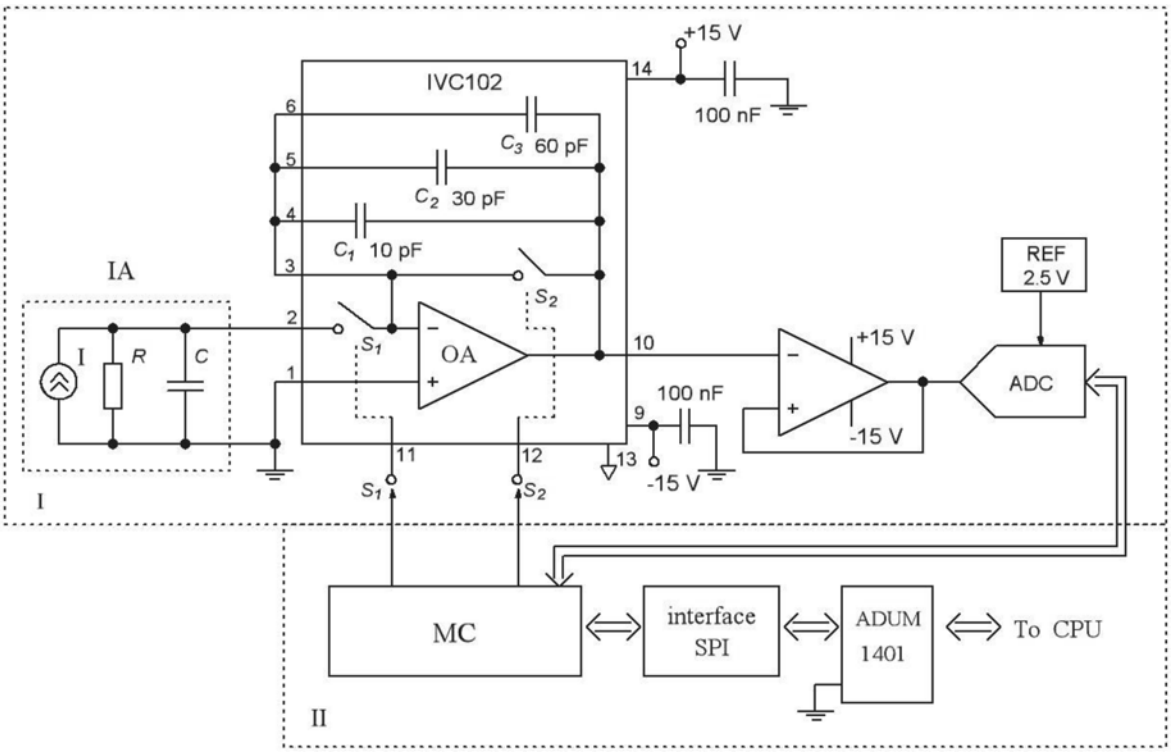


Рис. 2. Упрощенная принципиальная схема фотоинтегратора (I) с контроллером фотометра (II): IA – фотоприемник (фотодиод или фотоэлектронный умножитель); REF – опорный уровень, ADC – аналого-цифровой преобразователь, MC – микроконтроллер, To CPU – на центральный процессор

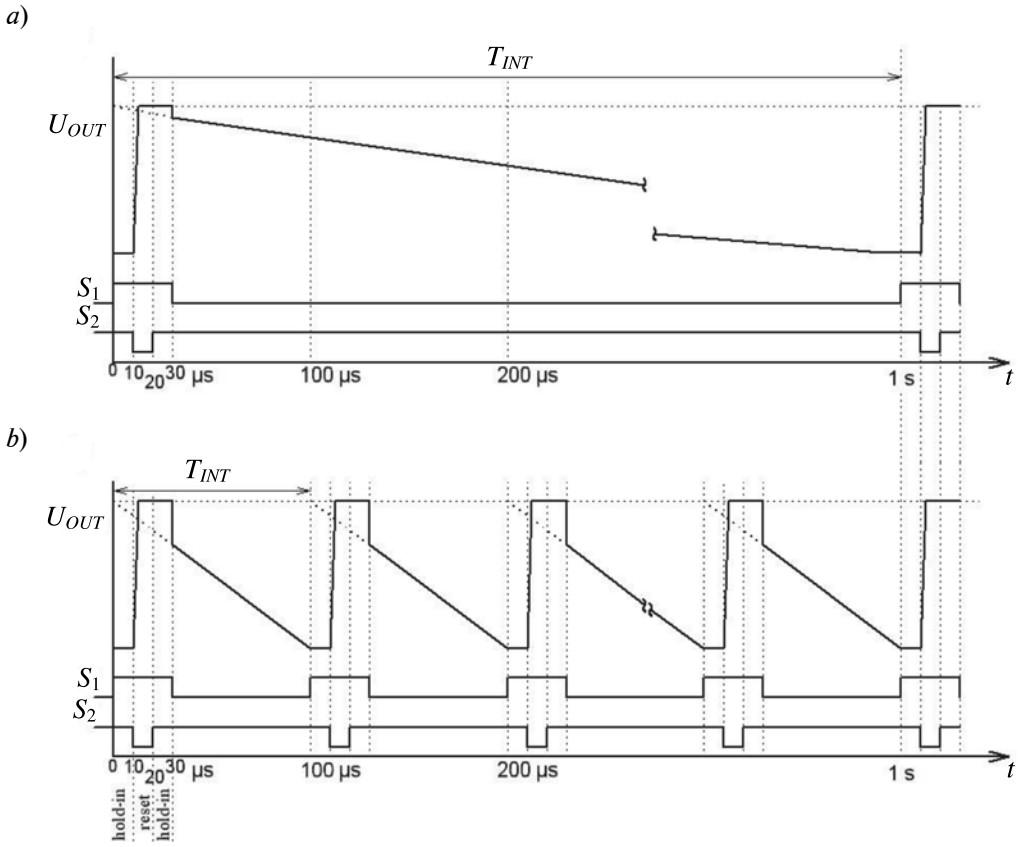


Рис. 3. Временные диаграммы фотоинтегратора для малых (*a*) и больших (*b*) концентраций детектируемых веществ в пробе; T_{INT} – время интегрирования; S_1, S_2 – сигналы управления ключами; hold-in, reset – удержание и сброс, соответственно

управления, регистрации и обработки информации [10], позволившие создать высокочувствительные газоанализаторы на основе эффекта MCN для анализа загрязнений воздуха различными вредными веществами [2]. Среди них можно выделить серийные изделия «Каскад-Г» и «Каскад-5» на отравляющие вещества [10], опытные образцы газоанализаторов на карбонилы металлов, на взрывчатые вещества, а также газоанализаторов выдыхаемого воздуха для диагностики заболеваний [11]; были также разработаны течеискатели теплообменников ядерных реакторов, устройства для контроля средств индивидуальной защиты органов дыхания [1].

Для обеспечения высокой чувствительности по фототоку светорассеяния в фотометре применено фотоприемное устройство на основе интегратора входного тока (микросхема IVC102 фирмы Texas Instruments) [10]. Упрощенная принципиальная схема фотоинтегратора с контроллером приведена на рис. 2, временные рабочие диаграммы – на рис. 3.

Выходной сигнал интегратора определяется выражением

$$U_{OUT} = -\frac{1}{C_{INT}} \int I_{INT}(t)dt,$$

где I_{INT}, C_{INT} – входной ток и емкость интегратора.

Для случая медленно меняющегося фототока за время интегрирования выражение для выходного напряжения упрощается:

$$U_{OUT} = -\frac{I_{INT} \cdot T_{INT}}{C_{INT}},$$

где T_{INT} – время интегрирования.

Контроллер, выполненный на основе

микропроцессора ATmega 88, формирует сигналы управления ключами S_1, S_2, принимает цифровой код фототока с аналого-цифрового преобразователя (ADC) и передает его по шине SPI на центральный процессор (CPU).

При малых концентрациях детектируемых веществ в пробе (рис. 3, *a*), соответствующих малым уровням рассеянной оптической мощности в нефелометре, за время измерения $T_{INT} = 1$ с выходной сигнал фотоинтегратора изменяется от 0 до уровня $\pm U_{OUT(\mathrm{MAX})}$. Частота оцифровки фототока в ADC установлена 100 кГц, соответственно за время в 1 с осуществляется 10^5 цифровых отсчетов. При поступлении в процессор цифрового кода, соответствующего $\pm U_{OUT(\mathrm{MAX})}$, процессор сбрасывает фотоинтегратор в начальное (нулевое) состояние. Для больших значений концентраций в пробе (рис. 3, *b*), соответствующих значительным уровням рассеянной оптической мощности в нефелометре, цифровой код ADC, соответствующий $\pm U_{OUT(\mathrm{MAX})}$, формируется за время, значительно меньшее 1 с.

Верхняя граница динамического диапазона измеряемого фототока соответствует минимальной длительности интегрирования $T_{INT} = 100$ мкс. За это время формируется всего 5–6 отсчетов, но зато количество циклов интегратора (сбросов в нулевое значение) за 1 с достигнет значения 10^4. Центральный процессор при получении каждого отсчета определяет тангенс угла наклона зависимости фототока от времени и рассчитывает фототок в соответствии с выражением

$$I_{IN} = -\frac{\Delta U_{OUT}}{\Delta T_d} \cdot C_{INT},$$

где ΔT_d – интервал дискретизации по времени, равный 10 мкс; ΔU_{OUT} – приращение выходного напряжения за один интервал дискретизации.

Применение метода наименьших квадратов для всех отсчетов позволяет существенно увеличить точность измерения. Среднеквадратичное отклонение измеряемого фототока при многократных измерениях уменьшается пропорционально $1/\sqrt{N}$, где N – количество измерений.

За время интегрирования 1 с выполняется 10^4 измерений, соответственно среднеквадратичное отклонение измеряемого фототока уменьшается в 100 раз. Максимальное значение измеряемого фототока определяется приращением выходного напряжения на величину $U_{OUT(\mathrm{MAX})}$ за время 100 мкс и составляет

$$I_{IN_MAX} = \frac{10\ \text{В}}{100\ \text{мкс}} \cdot 100\ \text{пФ} = 10\ \text{мкА}.$$

Минимальное значение измеряемого фототока определяется как приращение вы-

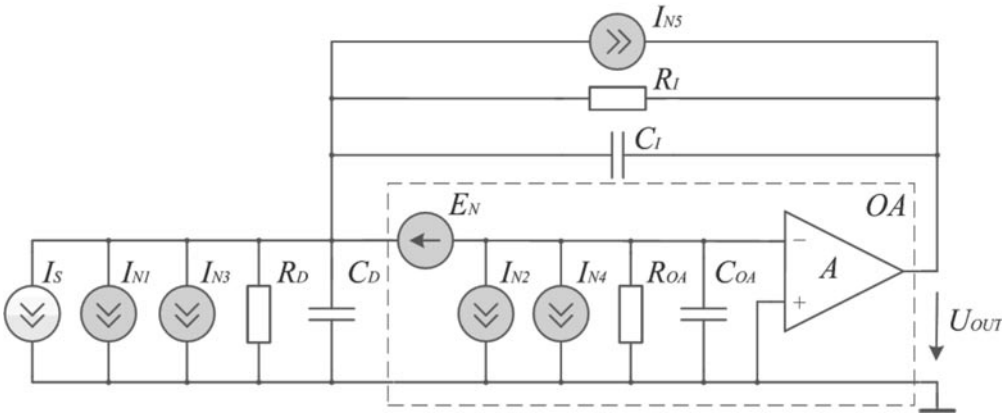


Рис. 4. Эквивалентная шумовая схема фотоинтегратора:
R_D – динамическое сопротивление фотодиода; C_D – емкость *p–n*-перехода фотодиода;
R_{OA}, C_{OA} – входные сопротивление и емкость операционного усилителя, C_I – емкость интегратора,
R_I – сопротивление разомкнутого ключа интегратора, I_S – фототок фотодиода

ходного напряжения в один уровень квантования ADC за время 1 с и составляет

$$I_{IN_MIN} = -\frac{10\ \text{В}}{2^{N-1}\cdot 1\text{с}}\cdot 100\ \text{пФ},$$

где N – разрядность ADC.

При 14-разрядном ADC $I_{IN_MIN} = -60$ фА и динамический диапазон фотоинтегратора равен

$$D = \frac{I_{IN_MAX}}{I_{IN_MAX}} \approx 160\cdot 10^6 \approx 160\ \text{дБ}.$$

При 20-разрядном ADC минимальное значение измеряемого фототока $I_{IN_MIN} = -1,9$ фА, но нижняя граница динамического диапазона определяется не шумами квантования ADC, а тепловыми и дробовыми шумами фотоинтегратора.

Шумовая модель фотоинтегратора

Эквивалентная шумовая схема фотоинтегратора приведена на рис. 4.

К параметрам операционного усилителя (ОА) относятся: постоянная времени T_0, коэффициент передачи $A = A_0/(1+pT_0)$, частота единичного усиления $\varpi_1 = A_0/T_0$. Входное сопротивление операционного усилителя в эквивалентной схеме вынесено за пределы четырехполюсника А.

Эквивалентные шумовые генераторы токов I_{N1}, I_{N2}, ..., I_{N5} и эдс e_N описывают случайные шумовые процессы и имеют спектральные плотности мощности [12]: I_{N1} – дробовые шумы тока фотодиода, $S_{N1} = 2qI_S$; I_{N2} – дробовые шумы входного тока ОА, $S_{N2} = 2qI_{OA}$; I_{N3} – тепловые шумы динамического сопротивления фотодиода, $S_{N3} = 4kT/R_D$; I_{N4} – тепловые шумы входного сопротивления ОА, $S_{N4} = 4kT/R_{OA}$; I_{N5} – тепловые шумы сопротивления разомкнутого ключа интегратора, $S_{N5} = 4kT/R_I$; E_N – тепловые шумы ОА, $S_E = 4kTR_n$.

Эквивалентные шумовые генераторы в эквивалентной схеме можно считать некоррелированными, их спектральная плотность в рабочем диапазоне частот постоянна (белый шум). Суммарную спектральную плотность источников шумового тока можно определить простым суммированием:

$$S_{N\Sigma_I} = S_{N1} + S_{N2} + S_{N3} + S_{N4} + S_{N5}.$$

После подстановки значений спектральных плотностей шумовых источников тока получаем:

$$S_{N\Sigma_I} = 2q\left(I_S + I_{OA} + 2\varphi_T \times \left(\frac{1}{R_{OA}} + \frac{1}{R_D} + \frac{1}{R_I}\right)\right), \quad (1)$$

где q – заряд электрона, $\varphi_T = kT/q$ – тепловой потенциал.

Средний квадрат шумового тока на входе ОА:

$$\overline{I_{N\Sigma_I}{}^2} = \int_0^\infty S_{N\Sigma_I}(f)df = S_{N\Sigma_I}\int_0^\infty df = S_{N\Sigma_I}\cdot\Delta f. \quad (2)$$

Для определения среднеквадратичного значения шумового напряжения на выходе ФПУ $\overline{U^2_{N_I}}$, вызванного шумовыми токами, необходимо определить дисперсию случайного процесса на выходе линейной системы при условии, что на ее вход в момент времени $t = 0$ подается случайный стационарный сигнал в виде белого шума со спектральной плотностью $S_{N\Sigma_I}$ [13]:

$$\overline{U^2_{N_I}} = \overline{I^2_{N\Sigma_I}}\int_0^t h^2(\tau_1)dt_1, \quad (3)$$

где $h(\tau_1)$ – импульсная характеристика исследуемой линейной цепи.

В статье [14] рассмотрено три вида приближений:

(а) некоррелированные шумовые генераторы (с белым шумом), что соответствует эквивалентной схеме рис. 4;

(б) конденсатор и ключ сброса интегратора – идеальные устройства (использовано допущение вида $R_I \to \infty$);

(в) идеальный фотоинтегратор (приняты допущения вида $R_I \to \infty$, $R_D \to \infty$, $R_{OA} \to \infty$, $C_{OA} \to 0$).

Расчетные выражения для приближений (а) и (б) приведены в статье [14], в настоящей статье рассматривается только приближение (в).

Импульсную характеристику источников тока фотоинтегратора можно получить обратным преобразованием Лапласа от передаточной характеристики. Такое преобразование выражается как

$$\overline{U^2_{N_I}} = \overline{I^2_{N\Sigma_I}} \cdot \int_0^{T_{INT}} h_I^{\,2}(\tau_1)dt = \\ = \overline{I^2_{N\Sigma_I}} \cdot \int_0^{T_{INT}} \frac{1}{C_I^{\,2}} dt = \overline{I^2_{N\Sigma_I}} \cdot \frac{T_{INT}}{C_I^{\,2}}. \quad (4)$$

Эквивалентная шумовая схема фотоинтегратора для расчета вклада шумовой эдс в средний квадрат шумового напряжения на выходе представлена на рис. 5.

Коэффициент передачи интегратора в операторной форме для шумовой эдс следует выражению

$$H_E(p) = \frac{\varpi_1}{\varpi_1 + p}.$$

Импульсную характеристику источника эдс получаем обратным преобразованием Лапласа от передаточной характеристики $h_E(t) = \varpi_1 \cdot e^{-\varpi_1 t}$:

$$\overline{U^2_{N_E}} = \overline{e^2_N} \cdot \int_0^{T_{INT}} h_N^{\,2}(t)dt = \frac{\overline{e^2_N}\,\varpi_1}{2}[1 - e^{-2\varpi_1 T_{INT}}].$$

Анализ полученного результата показывает, что расчет, который использует приближение идеального фотоинтегратора, существенно занижает вклад шумового источника эдс в средний квадрат шумового напряжения на выходе.

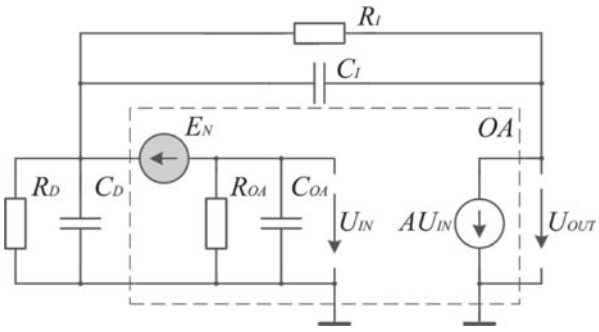


Рис. 5. Эквивалентная шумовая схема фотоинтегратора для расчета вклада шумовой эдс в средний квадрат шумового напряжения на выходе

Пороговая чувствительность фотоинтегратора на основе фотодиода

Пороговой чувствительностью фотоинтегратора $P_0 = I_0/S$ называется значение мощности оптического сигнала на входе интегратора, при которой на выходе электронной части фотоинтегратора среднеквадратичное напряжение сигнала равно среднеквадратичному значению общего шума [15]. В математической форме это выражается как условие

$$U^2_{OUT_S} = \overline{U^2_{N_\Sigma}} = \overline{U^2_{N_I}} + \overline{U^2_{N_E}},$$

необходимое для нахождения величины порогового входного тока I_0; S – чувствительность фотодетектора (фотодиода) к световому потоку.

Для составления уравнения $U^2_{OUT_S} = \overline{U^2_{N_\Sigma}}$ необходимо квадрат переходной функции приравнять к суммарному среднеквадратичному напряжению шума на выходе.

Выходной сигнал фотоинтегратора при воздействии на входе скачка фототока I_0 определяется следующим выражением (переходная функция):

$$U_{OUT}(T_{INT}) = \int_0^{T_{INT}} I_0(T_{INT} - t) \cdot h_I(t)dt = \\ = I_0 \cdot \int_0^{T_{INT}} h_I(t)dt = I_0 \cdot \frac{1}{C_I} \cdot T_{INT}. \quad (5)$$

Определим теперь пороговый ток фотоинтегратора I_0, при котором на выходе электронной части фотоинтегратора среднеквадратичное напряжение сигнала равно среднеквадратичному напряжению общего шума. Пороговый ток при малых временах интегрирования рассчитан для приближений (а) и (б) в работах [3, 14] и здесь не приведен ввиду громоздкого вида полученных выражений.

При выполнении условия

$$T_{INT} >> \frac{C_I + C_D + C_{OA}}{\dfrac{1}{R_D} + \dfrac{1}{R_{OA}} + \varpi_1 C_I}$$

пороговый ток определяется следующим выражением:

$$I_0 \approx \frac{1}{T_{INT}}\left[\overline{I^2_{N\Sigma_I}} \cdot T_{INT} + \frac{\overline{e^2_N}\varpi_1 C_I (C_I + C_D)}{2}\right]^{1/2}. \quad (6)$$

Шумовые генераторы тока дают больший вклад с увеличением времени интегрирования. При временах интегрирования, несколько бóльших, чем

$$\frac{\overline{e^2_N}\varpi_1 C_I (C_I + C_D)}{2\cdot\overline{I^2_{N\Sigma_I}}},$$

вкладом шумовой эдс в величину порогового тока можно пренебречь.

Подстановка спектральной плотности шумовых источников тока фотоинтегратора в (6) приводит к выражению:

$$I_0 = \frac{1}{T_{INT}}\left[2q\left(I_S + I_{OA} + 2\varphi_T\left(\frac{1}{R_{OA}} + \frac{1}{R_D} + \frac{1}{R_I}\right)\right)T_{INT} + \frac{\overline{e^2_N}\varpi_1 C_I (C_I + C_D)}{2}\right]^{1/2}. \quad (7)$$

Как правило, дробовые шумы фототока $2qI_S$ необходимо учитывать для некоторых фотоприборов с усилением, в частности для лавинных фотодиодов и фотоэлектронных умножителей.

Часто бывает удобно использовать величины спектральной плотности шумового источника тока $\sqrt{S^2_{I_OA}}$ (А·Гц$^{-1/2}$) и шумового источника напряжения $\sqrt{S^2_{U_OA}}$ (В·Гц$^{-1/2}$),

Таблица

Основные характеристики фотоинтегратора на микросхеме IVC102 фирмы Texas Instruments

Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение параметра
Емкость интегрирования	C_I	пФ	100
Входной ток ОА	I_{OA}	А	$\pm 1\cdot 10^{-13}$
Входная емкость ОА	C_{OA}	пФ	50
Спектральная плотность шумовой эдс ОА при f = 1 кГц	$S_{U\,OA}$	нВ·Гц$^{-1/2}$	10
Частота единичного усиления ОА	f_1	МГц	2
Интегральная токовая чувствительность фотодиода	S	А/ Вт	0,5
Темновой ток фотодиода	I_D	А	10^{-11}
Емкость фотодиода	C_D	пФ	600
Сопротивление фотодиода	R_D	ГОм	1
Сопротивление закрытого ключа	R_I	ГОм	1
Динамический диапазон фотоинтегратора	D	дБ	186

приведенных ко входу операционного усилителя. Именно эти шумовые параметры измеряются экспериментально и приводятся фирмами-изготовителями в справочных данных. В этом случае дробовый шум входного тока и тепловой шум входного сопротивления операционного усилителя включаются в спектральную плотность шумового источника тока, и выражение для порогового тока приобретает следующий вид:

$$I_0 = \frac{1}{T_{INT}}\left[\left(2q\left(I_S + \frac{2\varphi_T}{R_D} + \frac{2\varphi_T}{R_I}\right) + \overline{S^2_{I_OA}}\right)T_{INT} + \frac{\overline{S^2_{U_OA}}\varpi_1 C_I(C_I + C_D)}{2}\right]^{1/2}. \quad (8)$$

Иногда для электронных устройств вводят специальную характеристику NEP (Noise Equivalent Power – эквивалентная шумовая мощность). Такая величина определяется как мощность входного сигнала, при которой отношение сигнал/шум на выходе равно единице в полосе частот 1 Гц. NEP-характеристика эквивалентна спектральной плотности источника шумового тока, приведенного ко входу усилителя (которая измеряется в А·Гц$^{-1/2}$), но делится на крутизну преобразования фотодетектора S (А/Вт); соответственно NEP измеряется в (Вт·Гц$^{-1/2}$). Пороговая чувствительность фотоинтегратора P_0 представляет собой интегральную характеристику NEP, т. е. учитывается вся полоса частот фотоприемного устройства.

Параметры фотоинтегратора, реализованного на кремниевом p–i–n-фотодиоде, прецизионном интегральном малошумящем усилителе с полевым транзистором на входе, интегрирующем конденсаторе и ключе с малыми потерями на полевом транзисторе (микросхема IVC102 фирмы Texas Instruments), представлены в таблице.

Рассчитанное значение пороговой чувствительности фотоприемного устройства на основе фотодиода с интегратором при времени интегрирования 1 с составило $P_{0_FD} = 0,9 \cdot 10^{-14}$ Вт. Динамический диапазон фотоинтегратора был найден по формуле

$$D = \frac{I_{IN_MAX}}{I_{IN_MAX}} \approx 2,2 \cdot 10^9 \approx 186 \text{ дБ}.$$

При этом ADC должен иметь более двадцати разрядов.

Пороговая чувствительность фотоинтегратора на основе фотоэлектронного умножителя (PMT)

С целью повышения чувствительности фотоинтегратора допустимо применять в качестве фоточувствительного элемента фотоэлектронный умножитель (PMT – photomultiplier tube). Последний обладает высокой крутизной преобразования S_A оптической мощности в электрический ток (для PMT она достигает значения 10^6 А/Вт, для фотодиода – 0,5 А/Вт), однако PMT имеет и ряд недостатков: значительно большую стоимость, меньший срок эксплуатации и требует высоковольтного источника питания.

Для того чтобы полностью учесть шумовые источники FMP, к вышеописанным следует добавить еще два источника дробовых шумов: от сигнального тока I_S и от темнового анодного тока I_{DA}.

Спектральная плотность дробового шума термоэмиссионного тока катода I_{CATH} рассчитывается по известной формуле Шоттки:

$$S_{CATH} = 2qI_{CATH},$$

а средний квадрат шумового термоэмиссионного тока – по формуле

$$\overline{i^2_{TE}} = 2qI_{CATH}\Delta f.$$

Спектральная плотность среднего квадрата дробового шума сигнального и темнового анодных токов PMT определяется выражением

$$S_N = 2q(I_A + I_{DA})\mu. \quad (9)$$

Средний квадрат суммарного шумового напряжения на выходе PMT-интегратор определяется выражением

$$\overline{U}^2_{N\Sigma} = 2q\left((I_A + I_{DA})\mu + I_{OA} + 2\frac{kT}{q}\left(\frac{1}{R_{OA}} + \frac{1}{R_{FMP}}\right)\right)\cdot\frac{T_{INT}}{C_I^2} + \quad (10)$$

$$+\frac{\overline{e_N^2}\varpi_1(C_I+C_{FMP})}{2C_I}, \qquad (10)$$

где введены новые обозначения C_{FMP} и R_{FMP} – входные емкость и сопротивление PMT.

Вследствие большого внутреннего усиления PMT, выходное напряжение можно определять по переходной характеристике идеального интегратора:

$$\overline{U}_{OUT}^2 = \overline{I}_A^2 \cdot \frac{T_{INT}^2}{C_I^2}.$$

Расчет пороговой чувствительности фотоинтегратора с PMT проведен в работе [14], где получено выражение

$$P_0 = \frac{1}{S_A}\sqrt{\frac{2qI_{DA}\mu}{T_{INT}}}. \qquad (11)$$

Дробовые шумы PMT следует учитывать лишь при временах интегрирования, меньших десятых долей секунды.

Пороговая чувствительность фотоинтегратора на PMT зависит от анодного напряжения последнего. Для расчета указанной чувствительности необходимо подставлять в выражение (11) значения S_A, μ и I_{DA} для различных анодных напряжений PMT (они даются в его технической характеристике). Расчет, проведенный для фотосенсорного модуля H6780 фирмы Hamamatsu с заданным временем интегрирования в 1 с, позволил определить минимальное значение пороговой чувствительности:

$$P_{0_FMP} = 0,48 \cdot 10^{-15} \text{ Вт}$$

при анодном напряжении 700 В.

Таким образом, реально достигается выигрыш в чувствительности в 18 – 30 раз при использовании PMT, по сравнению с аналогичным использованием фотоинтегратора на фотодиоде.

Пороговая чувствительность детектора MCN

Измеренная пороговая чувствительность $P_{0_EXP} = 6,6 \cdot 10^{-16}$ Вт при анодном напряжении 600 В, тогда как ее рассчитанное значение $P_{0_THEOR} = 5,9 \cdot 10^{-16}$ Вт. Отличие измеренного значения от теоретического хотя и составило 10 %, но при уровнях регистрируемой мощности в доли фемтоватт в экспериментальной установке очень трудно избавиться от столь малых значений побочных отражений оптического излучения. Этим и объясняется некоторое превышение экспериментального значения чувствительности над рассчитанным.

Использование PMT совместно с прецизионным малошумящим усилителем в составе фотоинтегратора, а также большие времена интегрирования (порядка 1 с), позволили существенным образом упростить выражения для расчета чувствительности фотоприемного устройства детектора MCN. Однако такие условия встречаются далеко не всегда. На практике часто применяются позиционно-чувствительные датчики оптического излучения, что требует использования фотодиодов, а характерное время измерения достигает долей миллисекунд и менее. В этом случае для расчета чувствительности фотоприемного устройства следует использовать выражения, полученные для приближений (а) и (б).

В качестве примера иных расчетных условий можно привести позиционно-чувствительный датчик проникающего рентгеновского излучения в рентгеноабсорбционной технологии обогащения минералов [16]. Фотоприемное устройство содержит сцинтиллятор, нанесенный на линейку фотодиодов; он преобразует рентгеновское в видимое оптическое излучение, и при этом каждый фотодиод снабжен интегрирующим усилителем. Время интегрирования определяет скорость движения конвейера с минералами и не превышает долей миллисекунд.

Заключение

Чувствительность к световому потоку фотоприемных устройств оптико-электронных систем интегрирующего типа (фотоинтеграторов) можно определять методом эквивалентных шумовых схем путем интегрирования временных зависимостей импульсной функции фотоинтегратора.

Интегратор фототока, основанный на

измерении зависимости фототока от времени (с последующим усреднением тангенса угла наклона относительно временной оси), а также усреднении результатов измерений, позволяет регистрировать фототоки светорассеяния аэрозольными частицами на уровне долей фемтоампер.

Столь малые значения регистрируемых мощностей позволили внести ряд усовершенствований в детектор молекулярных ядер конденсации (MCN):

обеспечить чувствительность к детектируемым веществам ниже уровней предельно допустимых концентраций;

калибровать газоанализатор по светорассеянию воздуха непосредственно в фотометрическом объеме камеры нефелометра;

достигнуть предела обнаружения целевого компонента газоанализатора на уровне спонтанной нуклеации ядрообразования, а не предельной чувствительности оптико-электронной системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Кянджециан Р.А., Кателевский В.Я., Валюхов В.П., Купцов В.Д., Демин С.В.** Высокочувствительные газоанализаторы на базе детектора молекулярных ядер конденсации для экологического мониторинга и контроля высокоэффективных фильтров // Альтернативная энергетика и экология. 2011. № 10 (102). С. 32–42.

[2] **Купцов В.Д., Кянджециан Р.А., Кателевский В.Я., Валюхов В.П.** Газоанализаторы на основе эффекта молекулярных ядер конденсации // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Информатика. Телекоммуникации. Управление. 2010. № 6 (113). С. 145–150.

[3] **Купцов В.Д., Кателевский В.Я., Валюхов В.П.** Оптико-электронные устройства газоанализаторов на основе эффекта проявления молекулярных ядер конденсации. СПб: Изд-во Политехнического университета, 2012. 142 с.

[4] **Купцов В.Д., Кянджециан Р.А., Кателевский В.Я., Валюхов В.П.** Светорассеяние аэрозольными частицами в газоанализаторах на молекулярных ядрах конденсации // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Информатика. Телекоммуникации. Управление. 2011. № 1(115). С. 178–186.

[5] **Купцов В.Д., Кателевский В.Я., Валюхов В.П., Рыбин Е.Н.** Оптико-электронная система аэрозольного фотометра детектора молекулярных ядер конденсации // Журнал технической физики. 2013. Т. 83. № 8. С. 127–134.

[6] **Рыбин Е.Н., Валюхов В.П., Купцов В.Д.** Термодинамика нуклеации пересыщенного пара на молекулярных ядрах конденсации // Журнал технической физики. 2012. Т. 82. № 8. С. 22–27.

[7] **Рыбин Е.Н., Валюхов В.П., Купцов В.Д.** Моделирование нуклеации пересыщенного пара на молекулярных ядрах конденсации // Журнал технической физики. 2012. Т. 82. № 8. С. 28–34.

[8] **Коган Я.И., Бурнашева З.А.** Укрупнение и измерение ядер конденсации в непрерывном потоке // Журнал физической химии. 1960. Т. 34. № 12. С. 2630–2639.

[9] **Kuptsov V.D., Katelevsky V.Y., Valyukhov V.P., Rybin E.N.** Light scattering by aerosol particles and air in the molecular condensation nuclei (MCN) detector // Proceedings of SPIE. 2014. Vol. 9205(0Q). Pp. 92050Q1–92050Q11.

[10] **Демин С.В., Купцов В.Д., Валюхов В.П., Кателевский В.Я.** Газоанализаторы на молекулярных ядрах конденсации для определения концентрации отравляющих веществ // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Информатика. Телекоммуникации. Управление. 2011. № 2 (120). С. 183–190.

[11] **Kuptsov V.D., Katelevsky V.Y., Valyukhov V.P.** Optical sensors based on the molecular condensation nuclei detector // Proceedings of SPIE. 2015. Vol. 9506. Pp. 950620-1–950620-8.

[12] **Чернов Е.И.** Прецизионные фотоприемные устройства на основе фотодиодов. Ч. II // Обзоры по электронной технике. Сер. 4. Электровакуумные и газоразрядные приборы. 1989. № 1420. С. 52.

[13] **Заездный А.М.** Основы расчетов по статистической радиотехнике. М: Связь, 1969. 448 с.

[14] **Купцов В.Д., Валюхов В.П.** Чувствительность фотоприемного устройства на основе интегратора фототока // Электромагнитные волны и электронные системы. 2014. Т. 19. № 7. С. 16–23.

[15] **Купцов В.Д., Валюхов В.П.** Чувствительность фотоприемных устройств волоконно-оптических линий связи // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Информатика. Телекоммуникации. Управление. 2010. № 6(113). С. 31–36.

[16] **Новиков В.В., Рудаков В.В., Злобин М.Н. и др.** Способ сепарации минералов. Пат. 2472595. Российская Федерация, МПК B07C 5/346.; заявитель и патентообладатель Новиков Владлен Васильевич. № 2011150666/12; заявл.14.12. 2011; опубл. 20.01. 2013, Бюл. № 2. 11 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КУПЦОВ Владимир Дмитриевич – *кандидат технических наук, доцент кафедры радиофизики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

kuptsov@yandex.ru

ВАЛЮХОВ Владимир Петрович – *доктор технических наук, профессор кафедры радиофизики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

Valyukhov@yandex.ru

Kuptsov V.D., Valyukhov V.P. A PHOTOINTEGRATOR OF THE MOLECULAR CONDENSATION NUCLEI DETECTOR.

The problem of calculating the threshold sensitivity of an integrating photoreceiver (photocurrent integrator) is investigated. Photocurrent integrators are used in scientific instruments to achieve high sensitivity of an optical measurement system in case of relatively slow physical processes. Noise model of a photointegrator is used to develop equivalent noise circuits and to calculate the RMS value of the voltage across the output of the photoreceiver. Among all the models of the real photointegrator it is conceivable that the approximation by an ideal photointegrator may be used. The threshold sensitivity of a photointegrator is defined as the power at the input of a photointegrator at which the root mean squared (RMS) voltage across its output is equal to the RMS voltage of total noise i.e. the signal to noise ratio is equal to one. A photomultiplier tube (PMT) can be used to increase the sensitivity. Formulae for calculation of the sensitivity of PMT based on photointegrator are given. The increase in sensitivity due to the use of PMT can be up to 18-30 times.

Experimental study of a photometer of a molecular condensation nuclei (MCN) detector that forms a base of highly sensitive MCN gas analyzers was conducted. Measured sensitivity differed from calculated one by 10%, however, at femtowatt power levels it is very difficult to get rid of parasitic optical signals that are responsible for a small decrease in sensitivity compared to the theoretical prediction. It is noted that in many practical applications, for example in X-ray absorption method of mineral extraction using position sensitive photodiode X-ray receivers, an approximation of a real photointegrator must be used.

PHOTOCURRENT INTEGRATOR, THRESHOLD SENSITIVITY OF PHOTOINTEGRATOR, PHOTOMETER OF MOLECULAR CONDENSATION NUCLEI (MCN) DETECTOR.

REFERENCES

[1] **R.A. Kyandzhetsian, V.Ya. Katelevsky, V.P. Valyukhov, V.D. Kuptsov, S.V. Demin,** Highly sensitive gas analyzers based on molecular condensation nuclei detector for ecological monitoring and testing of highly effective filters, Int. J. Alternative Energy Ecol, 10 (102) (2011) 32–42.

[2] **V.D. Kuptsov, R.A. Kyandzhetsian, V.Ya. Katelevsky, V.P. Valyukhov,** Gas analyzers based on the molecular condensation nuclei effect, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Computer Science. Telecommunication and Control Systems, 6 (113) (2010) 145–150.

[3] **V.D. Kuptsov, V.Ya. Katelevsky, V.P. Valyukhov,** Optoelectronic devices for molecular condensation nuclei effect gas analyzers, SPbSPU Publishing House, St. Petersburg, 2012.

[4] **V.D. Kuptsov, R.A. Kyandzhetsian, V.Ya. Katelevsky, V.P. Valyukhov**, Light scattering by aerosol particles in gas analyzers based on molecular condensation nuclei, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Computer Science. Telecommunication and Control Systems, 1 (115) (2011) 178–186.

[5] **V.D. Kuptsov, V.Y. Katelevskii, V.P. Valyukhov, E.N. Rybin**, Optoelectronic system of the aerosol photometer in the detector of molecular condensation nuclei, Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics, 58(8) (2013) 1211–1218.

[6] **E.N. Rybin, V.P. Valyukhov, V.D. Kuptsov**, Thermodynamics of supersaturated vapor nucleation

on molecular condensation nuclei, Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics, 57 (8) (2012) 1062–1067.

[7] **E.N. Rybin, V.P. Valyukhov, V.D. Kuptsov**, Simulation of supersaturated vapor nucleation on molecular condensation nuclei, Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics, 57 (8) (2012) 1068–1074.

[8] **Y.I. Kogan, Z.A. Burnasheva**, Enlargement and measurement of condensation nuclei in a continuous flow, Russian Journal of Physical Chemistry, 34(12) (1960) 2630–2639.

[9] **V.D. Kuptsov, V.Y. Katelevsky, V.P. Valyukhov, E.N. Rybin**, Light scattering by aerosol particles and air in the molecular condensation nuclei (MCN) detector, Proceedings of SPIE Vol. 9205(0Q) (2014) 92050Q1–92050Q11.

[10] **S.V. Demin, V.D. Kuptsov, V.P. Valyukhov, V.Ya. Katelevsky**, Gas analyzers based on molecular condensation nuclei for detection of poisonous substances, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Computer Science. Telecommunication and Control Systems, 2(120) (2011) 183–190.

[11] **V.D. Kuptsov, V.Y. Katelevsky, V.P. Valyukhov**, Optical sensors based on the molecular condensation nuclei detector, Proceedings of SPIE Vol. 9506 (2015) 950620-1–950620-8.

[12] **E.I. Chernov**, Precizionnye fotopriemnye ustrojstva na osnove fotodiodov Chast' II, Obzory po jelektronnoj tehnike. Serija 4: Jelektrovakuumnye i gazorazrjadnye pribory, CNII "Jelektronika", Moscow, No 1420, 1989.

[13] **A.M. Zaezdnyj,** Osnovy raschetov po statisticheskoj radiotehnike, Svjaz', Moscow, 1969.

[14] **V.D. Kuptsov, V.P. Valyukhov**, The sensitivity of a photoreceiver based on a photocurrent integrator, Elektromagnitnye Volny i Elektronnye Systemy (Electromagnetic Waves and Electronic Systems), 19(7) (2014) 16–23.

[15] **V.D. Kuptsov, V.P. Valyukhov**, Sensitivity of fiber optic communication lines photoreceivers, St. Petersburg State Polytechnic University Journal. Computer Science. Telecommunication and Control Systems, 6(113) (2010) 31–36.

[16] **V.V. Novikov, V.V. Rudakov, M.N. Zlobin, V.I. Malakhovsky, V.D. Kuptsov, V.P. Valyukhov, M.V. Kuptsov, V.A. Olchovoj**, The method of separation of minerals, Russian Federation Patent, No. 2472595 C1 (2013).

THE AUTHORS

KUPTSOV Vladimir D.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vdkuptsov@yandex.ru

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

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.7
UDC 628.9

A.V. Aladov[1], K.A. Bulashevich[2], A.E. Chernyakov[1], S.Yu. Karpov[2], V.P. Valyukhov[3], A.L. Zakgeym[1]

[1]Research and Development Center of Microelectronics and Submicron Heterostructures of RAS,
[2]STR Group – Soft-Impact, LTD,
[3]Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

THERMAL RESISTANSE AND NON-UNIFORM DISTRIBUTION OF ELECTROLUMINESCENCE AND TEMPERATURE IN HIGH-POWER AlGaInN LIGHT-EMITTING DIODES

The paper studies current spreading, light emission, and heat transfer in high-power flip-chip light-emitting diodes (LEDs) and their effect on the chip thermal resistance by experimental and theoretical approaches. The thermal resistance was measured using two methods: by monitoring the transient response of the LED operation voltage to the temperature variation with the Transient Tester T3Ster and by temperature mapping with the use of an infrared thermal-imaging microscope. The near field of the electroluminescence intensity was recorded with an optical microscope and a CCD camera. Three-dimensional numerical simulation of the current spreading and heat transfer in the LED chip was carried out using the SimuLED package in order to interpret the obtained experimental results.

LED, CHIP, THERMAL RESISTANCE, CURRENT SPREADING, LIGHT DISTRIBUTION, ELECTROLUMINESCENCE, SIMULATION.

1. Introduction

There has been a general trend in recent years to increase the operating current and the chip area of the commercial high-power light-emitting diodes (LEDs) in order to provide more and more values of their output optical power. In particular, high-power CBT-140-W LEDs by Luminus, Inc. have the chip area of 14 mm^2 and the operating current up to 21 A, corresponding to the total heat dissipation power of ~76 W and the heat release density more than 500 W/cm^2. In addition to the rise of the output optical power, engineers complicate the contact electrode geometry to avoid the shading effect. The flip-chip mounting on a heat sink followed by the removal of the substrate (made of sapphire as a rule) after the growth of the LED structure is widely used [1, 2]. This increasing design sophistication requires paying more attention to the thermal management of LEDs operation, which should include not only evaluating the total chip thermal resistance, but thoroughly analyzing the temperature distribution over the chip area as well. In other words, temperature mapping is required.

Conventionally, the thermal resistance of an LED chip is considered as the parameter independent of the operating current, in a similar way to an electrical resistance. This analogy is correct, however, only in the specific case when the generated heat distribution inside the chip is uniform. More commonly, the increase in the operating current leads to enhanced current crowding, i. e. to the non-uniform distribution of the current density in the active region.

The crowding current around the contact electrode edges involves the localization of the heat generation, thus forming a non-uniform lateral temperature distribution in the chip. As a result, the effective cross-section of the heat flow moving in the direction of a substrate decreases and heat removal deteriorates as compared to one through the uniform generation of heat.

Since local temperature and current density have a significant influence on the local internal quantum efficiency (IQE) of light emission, the

current spreading over the LED active region and related temperature distribution become the critical factors eventually affecting the overall output characteristics of the light emitters (the optical power and the efficiency). Therefore, the investigation of their non-uniformity over the chip as a function of operating current seems to be especially important for state-of-the-art high-power LEDs.

In this paper, we consider various experimental and theoretical approaches to evaluating non-uniformity in temperature distribution, current density, and electroluminescence intensity in high-power LEDs and its variation with the LED operating current.

2. Experimental

Commercial Luxeon Rebel ES LEDs produced by Philips Lumileds have been the subject of our investigation. The area of the emitting chip was 1340 × 1340 μm. This device is known as the thin-film flip-chip InGaN/GaN multiple-quantum-well LED (TFFC LED) [3]. To provide efficient heat removal from the active region, the LED chip is mounted on a ceramic submount with a *p*-layer and then the submount is soldered on a metal-core printed circuit board (MCPCB). The MCPCB is in turn mounted onto an outside bulk radiator. The general view of the LED and the photomicrograph of the operating LED chip are shown in Fig. 1.

2.1. Transient *p*–*n* junction-to-case thermal resistance

Thermal resistances of individual LED units are conventionally determined similarly to electric resistance, with a thermal flow considered instead of an electric current, and temperature instead of voltage. The heat spreads from the active region through the chip to the ceramic substrate, and then to the MCPCB and the heat sink which are considered as elements of an equivalent heat circuit like the current flow in an equivalent electrical circuit. Such a circuit, within the framework of the Cauer set-up, consists of some resistors and capacitors connected to a common bus (see Fig. 2).

The thermal capacities of the LED distinct layers affect only the transient characteristics of device, namely, heating/cooling rates when turning the device on/off.

In order to determine the thermal resistance with the forward voltage relaxation method, the LED chip is initially driven by a test current of 5 mA. Under this current, the device does not self-heat, and the temperature of the *p*–*n* junction depends on the external radiator, varying through a range of 20 – 100 °C with an accuracy of 0.5 °C. The forward voltage is recorded as a function of temperature. The linear voltage – temperature dependence with a coefficient of –1.733 mV/K was established using these measurements. The obtained value is to be used for determining the *p*–*n* junction

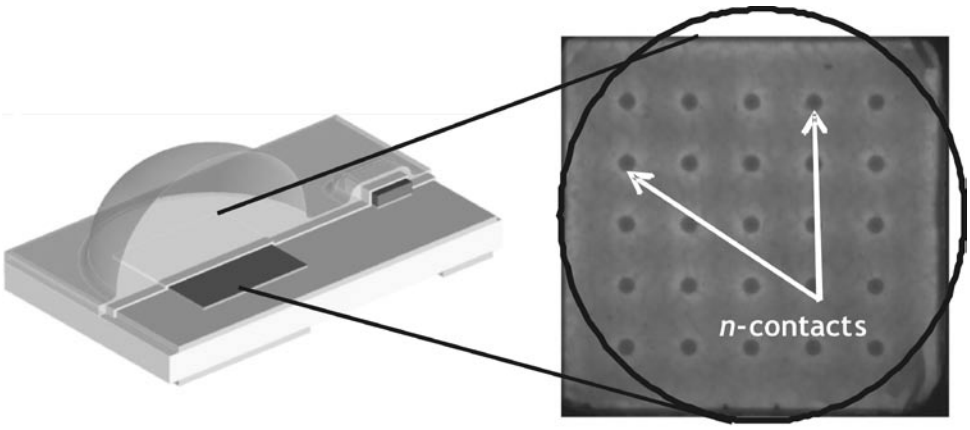


Fig. 1. Schematic general view and photomicrograph of the operating Luxeon Rebel LED; arrows indicate some *n*-contact pads formed onto the *n*-contact layer (opened by etching the LED structure)

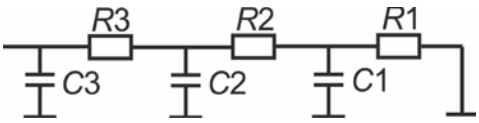


Fig. 2. An example of the Cauer's equivalent circuit used for an analysis of a thermal resistance

temperature under real operating conditions.

Next, the thermal transient characteristics of the LED were measured by step-like quick switching to a high constant driving current. From this moment on, the LED was gradually heated; the heat generated in the chip was partly consumed for heating the LED units (chip, submount, and MCPCB) and partly transferred to the radiator and then to the ambient air. The temperature evolution of the *p*–*n* junction during heating was tracked by the changes in forward voltage measured at the moments when short test current pulses were supplied (as described above), with the pulses 'cutting' the direct heating working current with a specific frequency. The subsequent processing analysis of the voltage transient characteristic of the *p*–*n* junction using the so-called structure function [4] allowed to calculate the components of the equivalent thermal circuit and the total thermal resistance as well. Plotting the derivative, i.e. the so-called differential structure function, demonstrated clearly the peaks corresponding to the drastic changes in the thermal properties of the LED layers (Fig. 3). These peaks could be attributed to specific unit borders inside the LED (chip, submount, solder joints, etc.), while the distance between the peaks shows the thermal resistances of the respective LED units. The detailed description for the measurement procedure and its analysis may be found in Ref. [5] and references therein.

The above method is implemented in a commercial Thermal Transient Tester T3Ster by MicRed, Ltd. The T3Ster heats the LED with a constant current and uses Cauer's thermal equivalent circuit for data processing.

The differential structure function obtained with the T3Ster at the operating heating currents of 100, 300, 700, and 900 mA is shown in Fig. 3. The first two peaks attributed to the thermal resistances (*i*) between the *p*–*n* junction and

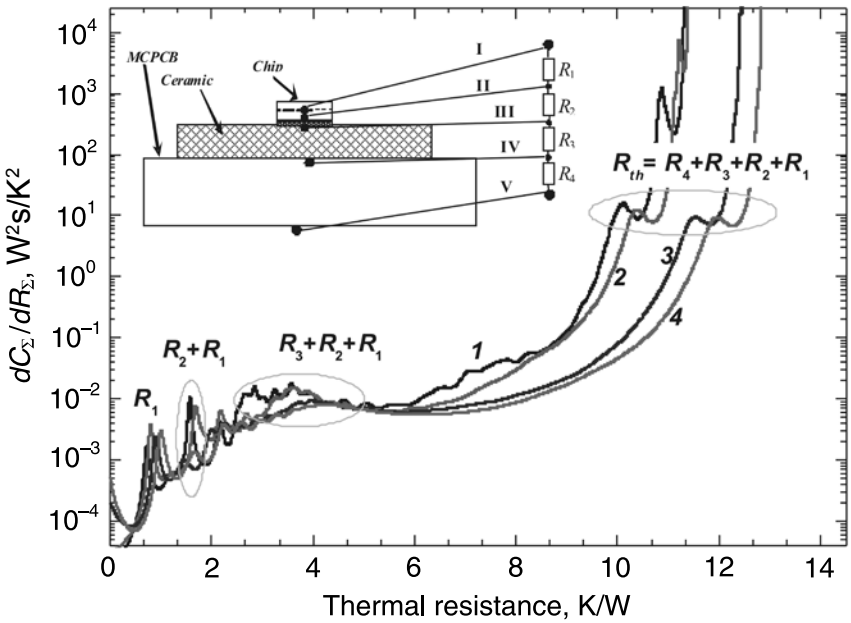


Fig. 3. Differential structure functions obtained with the T3Ster for different currents, mA: 100 (*1*), 300 (*2*), 700 (*3*), 900 (*4*).

Peaks in the curves *1* – *4* correspond to the thermal resistances and their sums; chip design and corresponding thermal resistances are shown schematically in the inset; temperature points included: at the *p*–*n* junction (I), die (II), die – ceramic submount interface (III), solder joint (IV), bottom (V)

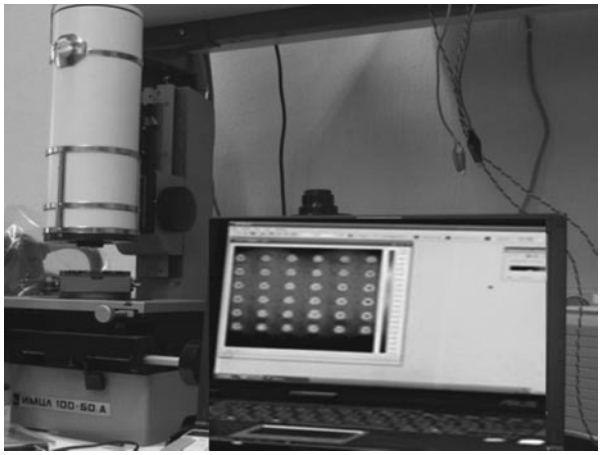


Fig. 4. General view of the UTK 1 IR microscope with the interface

the chip rear surface and (*ii*) between the chip surface and the submount are, apparently, nearly the same for all the heating currents. The third peak associated with the thermal resistance of the submount becomes shifted to higher values as the current is increased, which indicates the growth of the respective thermal resistance with current. The increase of the total thermal resistance is also clearly seen from the shift of the last peak. The thermal resistance value provided by the MCPCB is estimated from the plot at 7 K/W, so it is a primary contributor compared with the rest of the LED units. The total thermal resistance is found to increase by ~20 %, from 10 to 12 K/W, under an increase of the operating current from 100 to 900 mA.

The T3Ster equipment is basically applicable to any semiconductor device, not only LED; therefore, its data processing implies the conversion of the total supplied electric power into heat. In LEDs, however, much of the electric power is converted into light and is therefore not involved in the device heating. For consistency, all the results in this paper do not take the power emission (optical cooling) into account. Otherwise the actual thermal resistance of the chip would increase by a factor of $(1-\eta_W)^{-1}$, where η_W is the LED wall plug efficiency nearly equal to 30 %.

2.2. Infrared thermal microscopy mapping the LED

An alternative approach to determining the chip surface temperature distribution is based on the application of thermal imaging equipment. This allows to measure the temperature directly and thus obtain more detailed information on the temperature distribution over the surface.

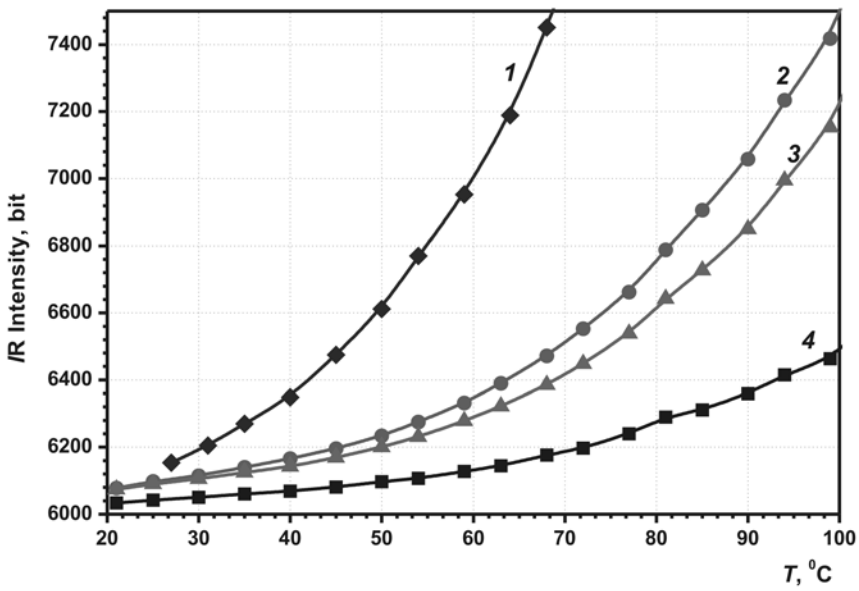


Fig. 5. Plots of IR emission intensity versus temperature for various materials included in the LED design: InAs as a black-body imitator (*1*), Ti/Ag as an *n*-contact (*2*), Ni/Ag as a *p*-contact (*3*), Au (*4*)

There exists a wide diversity of IR thermal imaging systems, e. g., the one manufactured by Cedip Infrared Systems, intended for evaluating the temperature of objects on the basis of their intrinsic thermal radiation in the spectral range from 3 to 12 μm. However, these systems are mostly applicable to macroscopic objects. In the present study, we employed a UTK1 infrared (IR) microscope developed at the Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, for analyzing the temperature distributions in LED chips with a spatial resolution of several micrometers (see Fig. 4 [6]).

The thermal emission was recorded with an InAs charge injection device, a photo detector array (128 × 128 elements with a 50 μm step between them) and spectral sensitivity range of 2.5–3.1 μm (near IR). The image field of the microscope was 400 × 400 μm (~3 μm per element).

One of the main methodological problems encountered when using the thermal imaging microscopy for temperature analysis in AlInGaN LEDs is the transparency of the epitaxial structure itself and of the sapphire substrate in the operating IR spectral range and a great spread in the emissivity values for various materials involved in the device: contact electrodes, reflecting and antireflecting coatings, substrates, phosphor, etc. [7]. Therefore, the initial calibration is of great importance; using it,

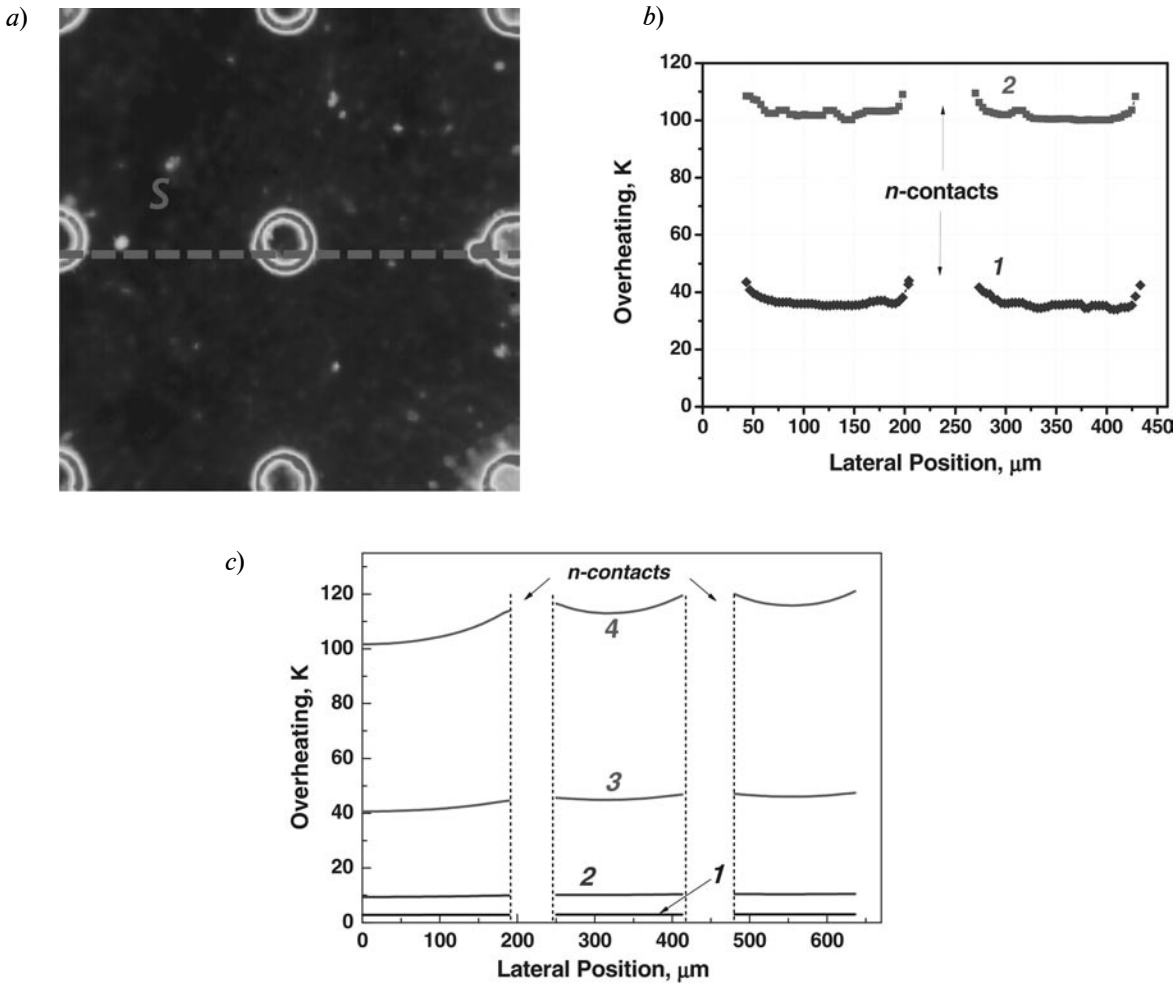


Fig. 6. Results of IR mapping the LED: *a* – 2D near-field IR intensity distribution measured at a current of 2A (only a quarter of the chip area is displayed); *b* – experimental local heating profile over the cross-section *S* (measured at currents of 1 A (*1*) and 2A (*2*)); *c* – simulated local heating profiles in the cross-section *S* (taken currents of 0.1 A (*3*), 0.3 A (*4*), 1.0 A (*1*), and 2 A(*2*))

the temperature of objects (all LED structural units) is maintained by an external heater with simultaneous digital recording of the IR emission intensity (bits). The 'emission intensity–temperature' calibration curve is then used to determine the absolute temperatures of the objects in real operation mode of the LED. Fig. 5 shows some examples of calibration curves for materials used in the LED design and for InAs substrate with anti-reflecting coating serving as a blackbody imitator. As expected, minimum emissivity is observed for the highly reflecting copper and gold films deposited by thermal evaporation in vacuum. With this calibration method, the absolute temperature is in error by no more than ~2 K (at low temperature and low material emissivity).

Fig. 6, *a* shows a picture of a part of the LED chip operating at the current of 2 A, the picture being recorded with an IR microscope and processed with the included software. The corresponding temperature distributions in section *S*, i. e. the local temperature profile in the LED chip, are plotted in Fig. 6, *b* for two selected values of the operating current.

On one hand, at both current values, the temperature distributions remain nearly uniform, indicating a good lateral heat spread inside the upper layer of the LED chip. On the other hand, there is a tendency towards a concavity of temperature distribution profile. This fact may be interpreted as a fingerprint of current crowding in the LED dice providing a higher current density next to the electrode

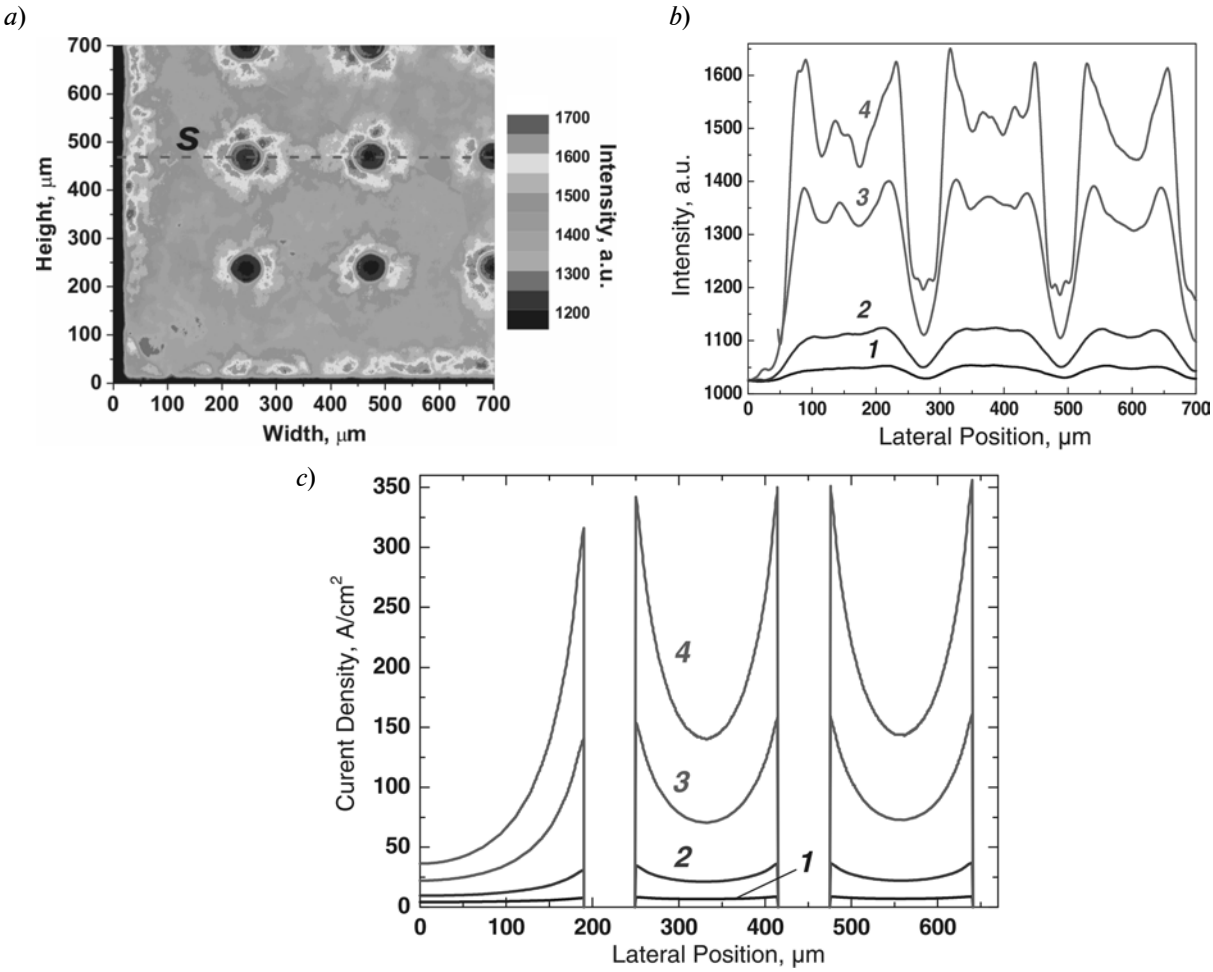


Fig. 7. Experimental 2D (*a*) and 1D (*b*) near-field EL intensity distributions and simulated 1D lateral distribution of the vertical current density (*c*).

The chip part and the cross-section *S* are identical to those of given in Fig. 6. The driving currents are as follows: 0.1 A (*1*), 0.3 A (*2*), 1.0 A (*3*), and 2.0 A (*4*)

edges, thus increasing the local temperature in the LED.

2.3. The near-field electroluminescence imaging by means of optical microscopy

In order to qualitatively assess the current spreading in the LED die, the near-field distribution of electroluminescence (EL) intensity was monitored over the blue-green spectral range by means of a Mitutoyo optical microscope and a Canon EOS 5D camera with a 12 Mpx matrix. The distribution obtained at a driving current of 2 A is shown in Fig. 7, *a*. The observed increase of the emission intensity next to the *n*-electrode edges is an indirect evidence for considerable current crowding. The evolution of the EL intensity distribution in the cross-section *S* with the driving current varying in the range of 0.1–2.0 A is shown in Fig. 7, *b*. It demonstrates clearly that the concavity of the EL profile becomes more pronounced at high driving currents.

It should be emphasized that the observed EL intensity non-uniformity cannot serve as a measure of the current density non-uniformity in the emitting chip, as it is often assumed. The EL non-uniformity is always more smoothed than the current density one due to photon propagation and their multiple reflections and scattering inside the LED chip. Therefore, to find a correlation between the current density and the EL intensity distribution in a LED chip, numerical simulations are of major importance.

3. Simulation

To interpret the experimental results, we carried out coupled hybrid 1D/3D simulations of the current spreading in the LED chip and heat transfer in the LED chip and the submount [8]. The active area was regarded as a thin layer with the Shockley dependence of the local current density j_{p-n} on the local applied $p-n$ junction bias voltage U_{p-n}:

$$j_{p-n} = j_s(T) \cdot [\exp(U_{p-n} / mkT) - 1], \quad (1)$$

where m is the ideality factor, and the saturation current j_s is assumed to increase exponentially with temperature:

$$j_s(T) = j_0 \exp(-\hbar\omega / kT). \quad (2)$$

Here $\hbar\omega$ is a mean energy of emitted photons; j_0 is a fitting parameter for the magnitude of the saturation current which was adjusted to fit experimental turn-on voltage value. The internal quantum efficiency (η_i) dependence on the current density was approximated by the ABC-model:

$$j_{p-n} = qd(An + Bn^2 + Cn^3),$$
$$\eta_i = \frac{Bn}{A + Bn + Cn^2}, \quad (3)$$

with the recombination constants $A = 1 \cdot 10^7$ s^{-1}, $B = 2 \cdot 10^{-11}$ cm^3/s, and $C = 3 \cdot 10^{-30}$ cm^6/s. Here n is a concentration of electron-hole pairs injected into the LED active region; d is an effective thickness of the total active region; q – electron charge.

The coupled problem of the current spreading and heat transfer in the LED chip was solved numerically using the commercial SimuLED software package [9].

The sheet resistance of the *n*-GaN contact layer being equal to 22 Ω/cm^2, and the specific resistance of the contact formed to *p*-GaN being equal to 10^{-3} $\Omega \cdot cm^2$, were chosen, respectively, as the input parameters.

In carrying out the simulation, we assumed the heat to be released through the bottom surface of the submount where the boundary conditions of the third kind for the heat flux were fulfilled. The heat-transfer coefficient was chosen to be $5 \cdot 10^4$ $W/(m^2 \cdot K)$ fitting the overall thermal resistance to the measured value. The submount thermal conductivity was assumed to be of 50 $W/(m \cdot K)$. The thermal resistance was calculated as a ratio of the average overheating of the active region to the total electric power supplied to LED, in order to keep consistence with our experimental data. It is worthy to note that the computations should include the ceramic submount to enable lateral heat transfer. It is important for the correct prediction of the lateral temperature distribution, as the bulk submount provides more intensive lateral heat transfer than the chip with removed sapphire substrate, the chip thickness being only ~(3 – 5) μm after this removal.

The computed active region overheating and current density profiles in the cross-section *S* simulated for various driving currents are

plotted in Figs. 6*c* and 7*c*, respectively. These figures show the lateral current density non-uniformity to increase dramatically with current. At the driving currents of 700 mA and higher, the maximum current density at the mesa edge is more than two times higher than the typical current density between the mesas. The current density next to the external chip boundary is even lower.

As a rule, the heat generation rate in the active region is roughly proportional to the current density with some deviation from the linearity coming from the lateral variation of the internal quantum efficiency η_i and U_{p-n}. Nevertheless, the lateral distribution of the overheating is predicted to be much more uniform than that of the current density. Simulation shows that the lateral temperature variation does not exceed ~20 % of the mean overheating at the driving current as high as 2 A. This latter fact is attributed to intensive lateral heat transfer in the ceramic submount, indicating that its thermal properties are essential for the overall thermal management of the LED chip.

4. Summary

The paper is focused on the experimental and simulation approaches to evaluating the thermal resistance and non-uniformity of current density, electroluminescence intensity and temperature distribution in the high-power flip-chip AlInGaN LEDs.

The total thermal resistance of the LED and its components were determined from the measurements of transient temperature-sensitive characteristics (forward voltage U_{p-n}) of the chip under a step-like drive of heating current. The total thermal resistance of the LED is found to grow by about 20 % from 10 to 12 K/W while the driving current is increased from zero to 1 A. The variation of the thermal resistance is attributed to the effect of current crowding near the *n*-electrode edges with corresponding localization of heat generation and relevant reduction of the effective area of intensive heat release from the chip into submount.

This conclusion is supported by direct measurements of the temperature distribution and near-field EL intensity using IR and optical microscopy. The experimental results are in good agreement with the numerical simulation of the temperature and current density distributions in the AlInGaN flip-chip LED.

The results obtained prove that it is important to take into account the thermal properties of all the chip units, both to reduce the total thermal resistance of the chip and to attain more uniform temperature distribution in the LED active region. In modern practice, a proper thermal management in high-power LED chips is a critical factor in improving all LED parameters.

This investigation was financially supported by Ministry of Education and Science of Russian Federation (grant: 14.607.21.0010 of 05.06.2014, unique ID: RFMEFI60714X0010).

REFERENCES

[1] **C.A. Hurni, A. David, M.J. Cich, et al.,** Bulk GaN flip-chip violet light-emitting diodes with optimized efficiency for high-power operation, Applied Physics Letters 106(2015) 031101.

[2] **J. Carey,** New LED architectures and phosphor technologies lower costs and boost quality, LEDs Magazine, 72 (2014) 67–71.

[3] **O.B. Shchekin, J.E. Epler, T.A. Trottier, et al.,** High performance thin-film flip-chip InGaN-GaN light-emitting diodes, Applied Physics Letters 89 (2006) 071109.

[4] **V. Szekely,** A new evaluation method of thermal transient measurement results, Microelectronics journal, 28 (1997) 277–292.

[5] **A. Poppe,** Thermal Characterization Confirms Real-World LED Performance.URL: http://s3.mentor.com/public_documents/whitepaper/resources/ mentorpaper_59097.pdf

[6] **V.M. Bazovkin, A.A. Guzev, A.P. Kovchavtsev, et al.,** Teplovizionnyi mikroskop, Prikl. Fiz. 2 (2005) 97–102.

[7] **A.L. Zakgeim, G.L. Kuryshev, M.N. Mizerov, et al.,** Issledovanie teplovych protsessov v mosh'nych InGaN/GaN flip-chip svetodiodach s ispol'zovaniem infrakrasnoi teplovizionnoi mikroskopii. Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov, 44 (3) (2010) 390–396.

[8] **M.V. Bogdanov, K.A. Bulashevich, I.Y. Evstratov, et al.,** Coupled modeling of current spreading, thermal effects and light extraction in III-nitride light-emitting diodes, Semiconductor Science and Technology, 23(12) (2008) 10–16.

[9] SimuLED – engineering tool for LED and laser diode design and optimization. URL: http://www.str-soft.com/products/SimuLED/index.htm.

THE AUTHORS

ALADOV Andrei V.
Submicron Heterostructures for Microelectronics Research and Engineering Center of the RAS.
26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
aaladov@mail.ioffe.ru

BULASHEVICH Kirill A.
STR Group – Soft-Impact, LTD.
P.O. Box 33, 27 Engels av., St. Petersburg, 194156, Russian Federation
kirill.bulashevich@str-soft.com

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

KARPOV Sergey Yu.
STR Group – Soft-Impact, LTD.
P.O. Box 33, 27 Engels av., St. Petersburg, 194156, Russian Federation
sergey.karpov@str-soft.com

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

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

Аладов А.В., Булашевич К.А., Черняков А.Е., Карпов С.Ю., Валюхов В.П., Закгейм А.Л. ТЕПЛОВОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ И НЕОДНОРОДНОСТЬ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И ТЕМПЕРАТУРЫ В МОЩНЫХ AlGaInN-СВЕТОДИОДАХ.

Теоретически и экспериментально исследованы распределения светового излучения, тока и тепла, а также их влияние на общее тепловое сопротивление в мощных AlGaInN светодиодах флип-чип конструкции. Тепловое сопротивление измерялось как по методу релаксации прямого напряжения с использованием прибора T3Ster, так и с применением инфракрасной тепловизионной микроскопии. Ближнее поле собственной электролюминесценции регистрировалось с помощью оптического микроскопа и цифровой фотокамеры, температурный мэппинг осуществлялся с помощью инфракрасного микроскопа высокого разрешения. Для интерпретации экспериментальных результатов проводилось трехмерное численное моделирование растекания тока и теплообмена в светодиодном кристалле с помощью программного пакета SimuLED. Получено хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных, обнаружен рост теплового сопротивления с увеличением тока, обусловленный эффектом локализации тока вблизи контактных площадок.

СВЕТОДИОД, ТЕПЛОВОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ, ТОКОРАСТЕКАНИЕ, ИНФРАКРАСНАЯ ТЕПЛОВИЗИОННАЯ МИКРОСКОПИЯ, ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Hurni C.A., David A., Cich M.J., et al.** Bulk GaN flip-chip violet light-emitting diodes with optimized efficiency for high-power operation// Applied Physics Letters. 2015. Vol. 106. P. 031101.

[2] **Carey J.** New LED architectures and phosphor technologies lower costs and boost quality// LEDs Magazin. 2014. Vol. 72, September. Pp. 67–71.

[3] **Shchekin O.B., Epler J.E., Trottier T.A., et al.** High performance thin-film flip-chip InGaN-GaN light-emitting diodes// Applied Physics Letters. 2006. Vol. 89. P. 071109.

[4] **Szekely V.** A new evaluation method of thermal transient measurement results // Microelectronic Journal. 1997. Vol. 28. Pp. 277–292.

[5] **Poppe A.** Thermal Characterization Confirms Real-World LED Performance.URL: http://s3.mentor.com/public_documents/whitepaper/ resources/ mentorpaper_59097.pdf

[6] **Базовкин В.М., Гусев А.А., Ковчавцев А.П. и др.** Тепловизионный микроскоп// Прикладная физика. 2005. Т. 2. С. 97–102.

[7] **Закгейм А.Л., Мизеров М.Н., Половинкин В.Г. и др.** Исследование тепловых процессов в мощных InGaN/GaN флип-чип светодиодах с использованием инфракрасной тепловизионной микроскопии// Физика и техника полупроводников. 2010. Т. 44, Вып. 3.

С. 390–396.

[8] **Bogdanov M.V., Bulashevich K.A., Evstratov I.Y., et al.** Coupled modeling of current spreading, thermal effects and light extraction in III-nitride light-emitting diodes// Semiconductor Science and Technology. 2008. Vol. 23. No. 12. Pp. 10 –12.

[9] SimuLED – engineering tool for LED and laser diode design and optimization URL: http://www.str-soft.com/products/SimuLED/index.htm.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АЛАДОВ Андрей Вальменович – *старший научный сотрудник Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН.*

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

aaladov@mail.ioffe.ru

БУЛАШЕВИЧ Кирилл Александрович – *научный сотрудник ООО «Софт-Импакт»,*

194156, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, а/я 83, пр. Энгельса, 27

kirill.bulashevich@str-soft.com

ЧЕРНЯКОВ Антон Евгеньевич – *кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН.*

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

chernyakov@mail.ioffe.ru

КАРПОВ Сергей Юрьевич – *кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ООО «Софт-Импакт»,*

194156, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, пр. Энгельса, 27

sergey.karpov@str-soft.com

ВАЛЮХОВ Владимир Петрович – *доктор технических наук, профессор кафедры радиофизики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

Valyukhov@yandex.ru

ЗАКГЕЙМ Александр Львович – *кандидат технических наук, заместитель директора по научной работе Научно-технологического центра микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН.*

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

zakgeim@mail.ioffe.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.8
УДК 621.373.826

О.Л. Головков [1,2], Г.А. Купцова [2], В.А. Степанов [2]

[1] ОАО «Государственный Рязанский приборный завод»

[2] Рязанский государственный университет им. С.А. Есенина

ВЛИЯНИЕ НА СПЕКТР ГЕНЕРАЦИИ YAG:Nd-ЛАЗЕРА БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ ПОДУРОВНЯМИ НИЖНЕГО РАБОЧЕГО МУЛЬТИПЛЕТА

В работе приведено стационарное решение системы уравнений Танга – Статца – Демарса, описывающее генерацию YAG : Nd-лазера на длине волны 1064,2 нм с учетом семи линий усиления перехода $^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$. Произведен расчет влияния уширения контуров усиления, вызванного повышением температуры, на спектр генерации YAG : Nd-лазера. Рассчитано влияние распределения населенности подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$ на спектр генерации исследуемого лазера. Установлено, что смещение спектра генерации в область 1066 нм при повышении температуры обусловлено неравномерностью населенности подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$.

YAG : Nd-ЛАЗЕР, СПЕКТР ГЕНЕРАЦИИ, БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЙ ПЕРЕХОД, РАСПРЕДЕЛЕНИЕ НАСЕЛЕННОСТИ, СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ТАНГА–СТАТЦА–ДЕМАРСА.

Введение

Известно, что спектр генерации лазера на основе активированного ионами неодима кристалла иттрий-алюминиевого граната (YAG:Nd) на длине волны 1064,2 нм при повышении температуры уширяется и смещается в длинноволновую область спектра на следующие величины [1]:

$$d(\nu)/dT = 5 \cdot 10^{-2}\ \text{см}^{-1}\text{K}^{-1};$$

$$d(\Delta\nu)/dT = 1,8 \cdot 10^{-2}\ \text{см}^{-1}\text{K}^{-1}.$$

Уширение спектра генерации объясняется усилением тепловых колебаний кристаллической решетки и ионов неодима. Однако смещение максимума спектра генерации до длины волны 1066 нм при повышении температуры кристалла YAG невозможно объяснить, если использовать лишь модель генерации YAG:Nd-лазера, учитывающую три линии усиления: 1064,40, 1064,15 и 1061,50 нм.

В литературе приводится анализ влияния температуры кристалла YAG:Nd на усиление лазерной среды на основе классических балансных уравнений [2], в которых рассматривается термическое заселение мультиплета $^4I_{11/2}$, начиная с нижнего уровня. В классических балансных уравнениях сложно учесть влияние на спектр генерации нескольких линий усиления и нескольких подуровней, составляющих как верхний, так и нижний уровни.

Спектр генерации лазерного излучения рассчитывается с помощью системы уравнений Танга – Статца – Демарса, при этом возможен учет нескольких линий усиления [3], степень их уширения и количество генерируемых аксиальных частот [4]. Учет влияния больцмановской населенности и структуры подуровней нижнего мультиплета $^4I_{11/2}$ в указанной системе не предусмотрен, так как в уравнениях используется инверсия населенности.

В связи с вышеизложенным можно утверждать, что в настоящее время не разработано теоретического описания зависимости спектра генерации YAG:Nd-лазера от температуры.

Цель работы – показать эффекты влияния на спектр генерации лазера отклонения от теплового равновесия населенности подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$. В связи с этим в представленной статье приведено решение системы уравнений Танга – Статца – Демарса для всех возможных линий усиления лазерного перехода $^4F_{3/2} \to {}^4I_{11/2}$.

Теоретическая часть

Известно, что ион неодима в кристаллической решетке YAG на переходе $^4F_{3/2} \to {}^4I_{11/2}$ имеет семь линий усиления, на двух из которых может происходить лазерная генерация (1064,15 и 1061,50 нм). Дополнительные линии усиления, которые не участвуют в генерации лазера, влияют на его эмиссионный спектр [5].

Для анализа спектра генерации YAG:Nd-лазера с учетом семи линий усиления (переходов) используем соответствующие переходы $^4F_{3/2} \to {}^4I_{11/2}$ [5], представленные в таблице.

С учетом данных таблицы, аналогично записи, приведенной в работе [6], запишем систему уравнений Танга – Статца – Демарса для семи линий усиления YAG:Nd-лазера:

$$\frac{dm_k}{d\tau} = Gm_k[L_k^{(A)}(n_0 + n_k) + L_k^{(B)}(n_0' + n_k') - 1 - \beta_k];$$

$$\frac{dn_0}{d\tau} = A - n_0\left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_m^{(A)} m_m\right) - \sum_{m=1}^{M} L_m^{(A)} m_m n_m;$$

$$\frac{dn_k}{d\tau} = -n_k\left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_m^{(A)} m_m\right) - \frac{1}{2} L_k^{(A)} m_k n_0; \quad (1)$$

$$\frac{dn_0'}{d\tau} = A' - n_0'\left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_m^{(B)} m_m\right) - \sum_{m=1}^{M} L_m^{(B)}) m_m n_m';$$

$$\frac{dn_k'}{d\tau} = -n_k'\left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_m^{(B)} m_m\right) - \frac{1}{2} L_k^{(B)} m_k n_0';$$

$$w = \frac{n_0}{n_0'} = \exp\left(\frac{E_B - E_A}{k_B T}\right);$$

$$L_k^{(A)} = L_k^{(1)} + L_k^{(3)} + L_k^{(5)},$$

$$L_k^{(B)} = L_k^{(2)} + L_k^{(4)} + L_k^{(6)} + L_k^{(7)},$$

где m_k – интенсивность генерируемой k-й аксиальной моды; n_0, n_k – пространственно-однородная инверсия и ее решетки на переходе с верхним рабочим подуровнем (11507 см$^{-1}$); n_0', n_k' – пространственно- однородная инверсия и ее решетки на переходе с верхним рабочим подуровнем (11423 см$^{-1}$); M – число аксиальных мод; $G = 2k / \gamma_\parallel$; $\tau = t / \gamma_\parallel$ ($\gamma_\parallel$, k – скорости релаксации инверсии населенности и поля в резонаторе); β_k – потери k-й аксиальной моды; A, A' – параметры накачки на верхние рабо-

Таблица

Частичная структура энергетических уровней и переходы $^4F_{3/2} \to {}^4I_{11/2}$ YAG:Nd-лазера при 300 К

Номер перехода	λ, нм	Энергия подуровня, см$^{-1}$		σ·10^{19}, см^2
		Нижний	Верхний	
1	1052,10	2028	11 507 (A)	2,7
2	1061,50	2002	11 423 (B)	4,7
3	1064,15	2110	11 507 (A)	7,1
4	1064,40	2028	11 423 (B)	1,9
5	1068,20	2146	11 507 (A)	1,8
6	1073,70	2110	11 423 (B)	2,6
7	1077,90	2146	11 423 (B)	1,2

Обозначения: λ – длина волны перехода (центр линии усиления) иона неодима в кристалле YAG; σ – эффективное сечение электронного перехода между подуровнями мультиплетов $^4F_{3/2}$ и $^4I_{11/2}$; (A), (B) – энергии двух энергетических подуровней мультиплета $^4F_{3/2}$.

чие подуровни; $L_k^{(i)}$ – лоренцевы формы линий усиления i-й компоненты, нормированные к сечению сильного перехода, которые следуют выражению

$$L_k^{(i)} = f_k(n)\frac{\sigma_i}{\sigma}[1+((p-k)\Delta_0+\Delta_i)^2]^{-1};$$

$$\Delta_i = \frac{\omega_0^{(i)}-\omega_0}{\gamma_\perp},$$

при этом $f_k(n)$ – функция, учитывающая влияние однородного усиления на спектр генерации [4], равная

$$f_k(n) = \prod_{m=1}^{n}\left|\cos\left(\frac{\pi}{2m}k\right)\right| \qquad (2)$$

(n – количество расположенных рядом аксиальных мод, не участвующих в лазерной генерации); ω_0 – центр сильной линии усиления на длине волны 1064,15 нм; $\omega_0^{(i)}$ – центр линии усиления i-й линии усиления; σ_i – сечение перехода i-й линии усиления; Δ_0 – межмодовый интервал, задаваемый длиной резонатора; $\gamma_\perp$ – скорость релаксации поляризации (равна полуширине однородной линии усиления); E_A, E_B – энергии штарковских подуровней; $k_В$ – постоянная Больцмана.

Стационарное решение системы уравнений (1) имеет вид:

$$n_0' = \frac{1}{1+w}\left(A+A'-(1+\beta_k)\sum_{m=1}^{M}m_m\right);$$

$$n_0 = \frac{w}{1+w}\left(A+A'-(1+\beta_k)\sum_{m=1}^{M}m_m\right);$$

$$n_k = \left[\frac{(1+\beta_k)-L_k^{(B)}n_0'}{L_k^{(A)}}-n_0\right]\left[F_2+F_1\frac{L_k^{(B)}}{L_k^{(A)}}\right]^{-1}; \quad (3)$$

$$n_k' = \frac{(1+\beta_k)-L_k^{(B)}(n_0'+n_k')}{L_k^{(A)}}-n_0;$$

$$m_k = \frac{n_k\left(1+\sum_{m=1}^{M}L_m^{(A)}m_m\right)}{-0,5L_k^{(A)}n_0},$$

где

$$F_1 = n_0'L_k^{(B)}\left(1+\sum_{m=1}^{M}L_m^{(A)}m_m\right),$$

$$F_2 = n_0L_k^{(A)}\left(1+\sum_{m=1}^{M}L_k^{(B)}m_m\right).$$

С учетом межмодового интервала $\Delta_0 = 0,05$, для удобства расчетов, по аналогии с предположением в работе [6], положим произвольным образом, что продольная мода резонатора, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1064,15 нм, имеет номер 70. Тогда моды, соответствующие максимумам усиления на длинах волн 1052,10; 1061,50; 1064,40; 1068,20; 1073,70 и 1077,90 нм, имеют соответственно номера 746, 222, 56, –156, –464 и –699.

Для учета влияния однородного уширения для резонатора длиной 30 мм во всех последующих расчетах примем в выражении (2) n равным 2, когда осуществляется генерация на четырех аксиальных модах.

Для учета неоднородного уширения спектра генерации лазерного излучения при повышении температуры кристалла YAG необходимо уширить лоренцевы контуры усиления (2) с помощью $s(T)$ – функции неоднородного уширения линии усиления – следующим образом:

$$L_k^{(i)} = \frac{s(T)\sigma_i}{\sigma}[s(T)+((p-k)\Delta_0+\Delta_i)^2]^{-1}. \qquad (4)$$

Проведенные расчеты показали, что при увеличении неоднородного уширения линий усиления, связанного с повышением температуры, происходят следующие изменения:

уширение спектра генерации, что согласуется с общеизвестными данными [1];

смещение максимума спектра генерации в коротковолновую область спектра; а это не соответствует общеизвестным данным, согласно которым должно происходить смещение в длинноволновую область.

Смещение спектра генерации в коротковолновую область при повышении температуры обусловлено близостью линии усиления 1061,5 нм. Система уравнений Танга – Статца – Демарса (1) подразумевает отсутствие населенности на нижнем уровне, следовательно, расчеты выполнялись при условии, что нижний уровень (мультиплет $^4I_{11/2}$) опустошается мгновенно.

Как показали расчеты по системе уравнений (3), учитывающие выражение (4), смещение в длинноволновую область спектра при уширении линий усиления воз-

можно только в том случае, если сечения переходов на длинах волн 1061,5 и 1064,4 нм стремятся к нулю. Как видно из данных таблицы, лазерные переходы с длинами волн 1061,50 и 1064,40 нм осуществляются на подуровни мультиплета $^4I_{11/2}$ с энергиями 2002 и 2028 см$^{-1}$ соответственно. При этом лазерные переходы с длинами волн 1064,15 и 1068,20 нм осуществляются на более высокие энергетические подуровни мультиплета $^4I_{11/2}$: 2110 и 2146 см$^{-1}$ соответственно.

Если принять условие, что населенность подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$ подчинена распределению Больцмана, то возможная разница населенностей по подуровням мультиплета $^4I_{11/2}$ не превышает 25 %. В связи с этим, существование больцмановского распределения населенностей мультиплета $^4I_{11/2}$ не подтверждается расчетами.

Для выяснения распределения населенности подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$ были составлены балансные уравнения. С целью упрощения расчетов были сделаны следующие допущения:

энергетические подуровни мультиплета $^4I_{11/2}$ 2002 и 2028 см$^{-1}$ рассматривались как один нижний подуровень, так как они очень близко расположены;

скорости релаксационных переходов с подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$ на основной мультиплет считались одинаковыми (w_{20}), а значит при этом термическое заселение подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$, начиная с нижнего уровня, также одинаково для всех подуровней (w_{02}); основанием служило то обстоятельство, что разность энергий между подуровнями мультиплета $^4I_{11/2}$ значительно меньше таковой между мультиплетами $^4I_{11/2}$ и $^4I_{9/2}$;

термические релаксационные переходы между подуровнями мультиплета также считались одинаковыми (w), так как разница населенностей между подуровнями мультиплета $^4I_{11/2}$ не превышает 25 %.

При указанных допущениях балансные уравнения приняли следующий вид:

$$\frac{dn_1}{dt} = -(2w + w_{20} + w_f(\Delta E_{12}, T) + w_f(\Delta E_{13}, T))n_1 + w(n_2 + n_3) + w_{02};$$

$$\frac{dn_2}{dt} = A - (2w + w_{20} + w_f(\Delta E_{23}, T))n_2 + w_{f1}n_1 + w(n_1 + n_3) + w_{02};$$

$$\frac{dn_3}{dt} = -(2w + w_{20})n_3 + (w + w_{f1} + w_{f2})n_1 + (w + w_{f1})n_2 + w_{02},$$

где n_1, n_2, n_3 — населенности подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$ с энергиями 2146, 2110 и 2028 см$^{-1}$ соответственно; $w_f(\Delta E_{ij}, T)$ — скорости релаксационных переходов между подуровнями i и j, вызванных фонон-электронным воздействием кристаллической решетки на ионы неодима.

Известно [7], что при фонон-электронном взаимодействии матрицы кристалла с ионом активатора вероятность многофононного перехода зависит от температуры кристалла T и энергетического зазора ΔE следующим образом:

$$w(\Delta E, T) = [1 - \exp(-\hbar\omega/kT)]^{-p} \times [C^{(p)} \exp(-\alpha\Delta E)], \quad (5)$$

где p — количество фононов, возникших в результате фонон-электронного взаимодействия; $C^{(p)}$, α — константы, характеризующие матрицу (в данном случае это кристалл YAG).

Из выражения (5) видно, что вероятность релаксационного перехода зависит от энергетического зазора экспоненциально. Следовательно, вероятность фонон-электронного перехода между подуровнями 1 (2146 см$^{-1}$) и 2 (2110 см$^{-1}$) больше вероятностей перехода между подуровнями 1 и 3 (2028 см$^{-1}$), а также 2 и 3. В связи с этим при расчетах мы полагали, что

$$w_f(\Delta E_{12}, T) > w_f(\Delta E_{13}, T) \approx w_f(\Delta E_{23}, T).$$

Поскольку время жизни мультиплета $^4I_{11/2}$ имеет порядок 10^{-8} с, а время фонон-электронного перехода — 10^{-9} — 10^{-10} с, то в расчетах использовалось соотношение

$$w_f = 10w_{20}.$$

Расчеты показали, что относительная инверсия населенности подуровней мультиплета имеет следующие значения:

$$n_1 = 0,062,\ n_2 = 0,336,\ n_3 = 0,601.$$

При этом установлено, что данное распределение сильно зависит от отношений w_f/w и w_f/w_{20}.

Населенность подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$ с энергией 2110 см$^{-1}$ зависит от скорости тепловых релаксационных переходов, обеспечивающих больцмановское распределение (рис. 1, *a*). Проведенные расчеты показали, что для адекватной модели изменения спектра излучения вследствие уширения линий усиления необходимо, чтобы при нагреве относительная населенность подуровня 2 была не ниже 0,3. В связи с этим можно заключить, что скорость фонон-электронной релаксации в активированном кристалле должна быть, как минимум, на порядок выше, чем скорость установления теплового равновесия в соответствии с распределением Больцмана.

Из рис. 1, *b* видно, что населенность верхнего подуровня мультиплета $^4I_{11/2}$ с энергией 2 110 см$^{-1}$ не зависит от скорости релаксационных переходов на основной уровень $^4I_{9/2}$.

В результате расчетов установлено, что для адекватной модели изменения спектра излучения от уширения линий усиления необходимо, чтобы при нагреве относительная населенность подуровня 2 была ниже, чем эта величина для подуровня 3. На этом основании можно сделать вывод, что скорость фонон-электронной релаксации должна быть на порядок выше, чем скорость релаксационных переходов на основной уровень $^4I_{9/2}$.

Что же касается больцмановского термического заселения мультиплета $^4I_{11/2}$ с основного уровня $^4I_{9/2}$, то оно практически не влияет на распределение населенности по подуровням мультиплета и с повышением температуры приводит к пропорциональному росту, а затем насыщению населенности мультиплета.

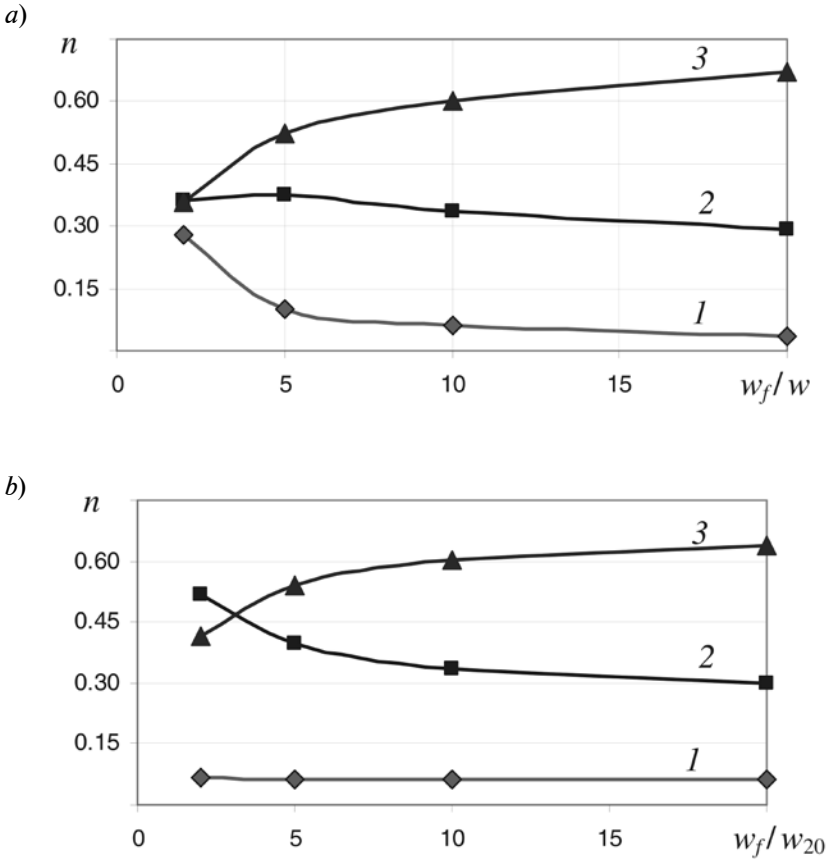


Рис. 1. Зависимости относительной населенности подуровней *1–3* мультиплета $^4I_{11/2}$ от отношений вероятностей w_f/w (*a*) и w_f/w_{20} (*b*)

Заключение

В результате проведенного теоретического анализа было показано влияние на спектр генерации лазера отклонения населенности подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$ от теплового равновесия. Решение балансных уравнений, описывающих населенность подуровней мультиплета $^4I_{11/2}$, показало, что населенность нижних подуровней этого мультиплета с повышением температуры возрастает, при этом энергетический подуровень 2146 см$^{-1}$ остается незаселенным. Это в конечном итоге приводит к смещению спектра генерации YAG:Nd-лазера в длинноволновую область спектра при повышении температуры, ввиду влияния на спектр генерации линии усиления с длиной волны 1068,2 нм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Каминский А.А.** Лазерные кристаллы. М.: Наука, 1975. 256 с.

[2] **Мезенов А.В., Сомс Л.Н., Степанов А.И.** Термооптика твердотельных лазеров. Л.: Машиностроение, 1986. 199 с.

[3] **Ханин Я.И.** Основы динамики лазеров. М.: Наука, Физматлит, 1999. 360 с.

[4] **Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А.** Влияние степени однородного уширения контура усиления на спектр генерации YAG : Nd-лазера // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 1 (189) С. 48–53.

[5] **Зверев Г.М., Голяев Ю.Д., Шалаев Е.А., Шокин А.А.** Лазеры на алюмоиттриевом гранате с неодимом. М.: Радио и связь, 1985. 144 с.

[6] **Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А.** Стационарное решение системы уравнений Танга – Статца – Демарса для YAG:Nd-лазера // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 3 (201). С. 74–80.

[7] **Карлов Н.В.** Лекции по квантовой электронике. М.: Наука, 1983. 319 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОЛОВКОВ Олег Леонидович – *кандидат физико-математических наук, докторант кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, начальник бюро ОАО «Государственный Рязанский приборный завод».*

390000, Российская Федерация, г. Рязань, Семинарская ул., 32

golovkow@mail.ru

КУПЦОВА Галина Александровна – *аспирантка кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина.*

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46

СТЕПАНОВ Владимир Анатольевич – *доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина.*

390000, Российская Федерация, г. Рязань, ул. Свободы, 46

Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. NONRADIATIVE TRANSITIONS BETWEEN THE SUBLEVELS OF THE WORKING LOWER MULTIPLET OF THE YAG:Nd LASER: EFFECTS ON THE GENERATION SPECTRUM.

The article presents the stationary solution of the Tang–Statz–DeMars system of equations describing the generation spectrum of YAG : Nd laser at a wavelength of 1064.2 nm in terms of seven lines of amplification of the transition $^4F_{3/2} \rightarrow {}^4I_{11/2}$. The line broadening effect, due to temperature increase, on the generation spectrum of YAG : Nd laser has been calculated. Moreover, the effect of population distribution over the $^4I_{11/2}$ multiplet sublevels on the laser generation spectrum was also calculated. The generation spectrum shift to the region of 1066 nm with temperature increase was found to result from variations in the population of the $^4I_{11/2}$ multiplet sublevels.

YAG : Nd LASER, GENERATION SPECTRUM, NONRADIATIVE TRANSITION, POPULATION DISTRIBUTION, TANG–STATZ–DEMARS SYSTEM OF EQUATIONS.

REFERENCES

[1] **A.A. Kaminskij,** Lazernye kristally [Laser crystals], Nauka, Moscow, 1975.

[2] **A.V. Mezenov, L.N. Soms, A.I. Stepanov,** Termooptika tverdotel'nykh lazerov [Thermal optics of solid-state lasers], Mashinostroenie, Leningrad, 1986.

[3] **Ya.I. Khanin,** Osnovy dinamiki lazerov [The basics of laser dynamics], Nauka, Moscow, Fizmatlit. 1999.

[4] **O.L. Golovkov, G.A. Kuptsova, V.A. Stepanov,** Influence of the extent of uniform broadening of an amplification line on the generation spectrum of YAG : Nd laser, St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. 1 (189) (2014) 48–53.

[5] **G.M. Zverev, Yu.D. Golyaev, E.A. Shalaev, A.A. Shokin,** Lazery na alyumoittrievom granate s neodimom [YAG:Nd lasers]. Moscow, Radio i svyaz', 1985. 144 s.

[6] **O.L. Golovkov, G.A. Kuptsova, V.A. Stepanov,** Stationary solution of the Tang – Statz – Demars system of equations for YAG:Nd-laser, St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. 3 (201) (2014) 74–80.

[7] **N.V. Karlov,** Lektsii po kvantovoj elektronike [Lectures on quantum electronics], Nauka, Moscow, 1983.

THE AUTHORS

GOLOVKOV Oleg L.
Ryazan State University named for S.A. Yesenin
46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation
golovkow@mail.ru

KUPTSOVA Galina A.
Ryazan State University named for S.A. Yesenin
46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation

STEPANOV Vladimir A.
Ryazan State University named for S.A. Yesenin
46 Svobody St., Ryazan, 390000, Russian Federation

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.9
УДК 615.012.8

Н.В. Скворцов [1], О.Л. Власова [2], А.Г. Болдырев [1], И.В. Ларионов [1]

[1] ГосНИИ особо чистых биопрепаратов

[2] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ СОРБЕНТА СФЕРОЦЕЛЛ С80 В ДИНАМИЧЕСКОМ РЕЖИМЕ

Реализованы процессы адсорбционного связывания эндотоксина из физиологического и альбуминсодержащего растворов с помощью сорбента Сфероцелл С80. Оценены его гидродинамические характеристики и сорбционные свойства при связывании эндотоксина в динамическом режиме из модельных сред. Показано, что Сфероцелл С80 по своим гидродинамическим и емкостным характеристикам удовлетворяет как процессам финишной очистки биопрепаратов, так и процессу гемосорбции.

СОРБЕНТ, ЭНДОТОКСИН, БИОПРЕПАРАТЫ, ГЕМОСОРБЦИЯ.

В XXI веке одной из актуальных проблем современной медицины остается лечение сепсиса. По данным исследований, проводившихся в двадцати странах мира, наблюдается тенденция к росту частоты заболеваний и возникновению инфекционно-септических осложнений со стабильно высокой летальностью. Несмотря на прогресс в соответствующей области знаний, который проявляется во внедрении в лечебную практику новых антибактериальных препаратов с широким спектром действия, в развитии современных представлений в сфере реаниматологии и интенсивной терапии, в совершенствовании методик экстракорпоральной гемокоррекции, сепсис и септический шок остаются по-прежнему основными причинами смерти пациентов во всем мире. Течение сепсиса в 58 % случаев завершается септическим шоком, и летальность при септических состояниях составляет, по данным различных авторов, 20 – 50 % [1].

В качестве главного фактора, определяющего развитие шоковых состояний и, далее, полиорганной недостаточности, выступает появление в кровяном русле эндотоксина. Радикальный путь борьбы с этим состоянием – элиминация этого компонента в кровотоке.

По своей химической природе эндотоксин представляет собой липополисахарид (ЛПС). Это структурный элемент бактериальной стенки грамотрицательных бактерий. Ричард Пфайфер в 1892 году определил биологическое действие открытого им эндотоксина. Практически все звенья гомеостаза прямым или косвенным образом атакуются этим токсичным веществом. Циркулируя в кровотоке, оно активирует множество биологических защитных систем. В результате активации последних возникает тяжелая воспалительная реакция, с дальнейшим формированием полиорганной недостаточности. Высокая биологическая активность ЛПС бактериальной

стенки вызывает тяжелые осложнения в результате интоксикации организма.

В качестве факторов, способствующих развитию системной эндотоксинемии, медики выделяют антибактериальную терапию с применением препаратов бактерицидного действия; повреждение естественных защитных барьеров; замедление и шунтирование портального кровотока, приводящие к недостаточности детоксицирующей функции печени; повреждение элиминационных функций почек и легких. Формирующаяся системная энтодоксинемия является мощным стимулятором генерализованной тяжелой воспалительной реакции. На этом фоне селективное удаление эндотоксина из крови представляется крайне перспективной процедурой, способной прекратить или, по крайней мере, ослабить стимуляцию выработки воспалительных медиаторов [2].

В России имеется опыт лишь единичных процедур плазмафереза с использованием селективных колонок для связывания эндотоксина у тяжелой категории больных с инфекционно-септическими осложнениями [3]. Такие процессы реализуются с помощью специальной аппаратуры и сорбентов зарубежных фирм. Отечественные разработки в настоящее время неконкурентоспособны в связи с их низкой эффективностью.

Все вышеизложенное дает основание полагать, что разработка высокоэффективных сорбентов для элиминации эндотоксина представляет собой актуальную задачу.

Цель данного исследования – оценка эффективности гемосовместимого сорбента для элиминации эндотоксина (Сферо-целл С80) в белковых препаратах терапевтического применения и плазме крови. И, в связи с этим, изучение кинетики и динамики взаимодействия эндотоксина с гидрофобными сорбентами различной структурной организации, с таким расчетом, чтобы разработать сорбционный метод элиминации эндотоксина.

По физиологическому действию эндотоксин относится к группе пирогенов – соединений, вызывающих пирогенные эффекты (лихорадку). По химической структуре эндотоксин представляет собой олигомер, в состав которого входят три различных по составу и функциональному поведению фрагмента: липидный участок (липид А), 0-полисахарид (0-антиген) и олигосахарид, их соединяющий (рис. 1) [4].

Существенными для процесса элиминации ЛПС являются жесткие требования к его остаточной концентрации. Фармакопеи Всемирной организации здравоохранения требуют лимитировать содержание эндотоксина в лекарственных формах внутривенного применения пределом

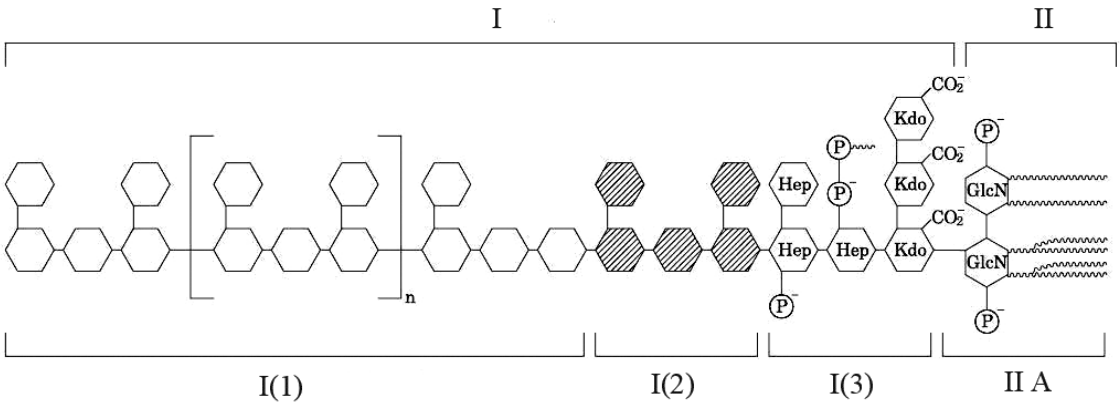


Рис. 1. Схематическая структура бактериального липополисахарида:
Hep – гептоза; Kdo – 2-кето-3-деоксиоктоновая кислота; Glcn – N-ацетилглюкозамин; P – фосфат;
I, II – полисахаридная и липидная составляющие; I (1) – О-специфическая цепь (высоковариабельный участок); I (2) – внешнее ядро (умеренно вариабельный участок); I (3) – внутреннее ядро (низковариабельный участок); IIA – липид А (почти невариабельный участок)

0,05 ppm (млн$^{-1}$). Согласно [5], превышение этого предела в препарате может приводить к развитию септического шока у пациентов.

Сопоставительный анализ современных методов элиминации с точки зрения минимальной остаточной величины концентрации целевого компонента (ЛПС) показывает, что наилучшего результата можно достичь в рамках применения адсорбционного метода. В случае использования эфферентной терапии, многократное повторение элементарного акта сорбции оказывается естественным образом включенным в терапевтическую процедуру [6].

Таким образом, магистральным путем решения сформулированной задачи является создание селективного высокоэффективного (с очень высоким значением равновесного коэффициента распределения (КР)) сорбента для связывания эндотоксина. При этом также важен выбор матрицы носителя для корректной иммобилизации и доступности аффинанта и реализации эффективного внутридиффузионного переноса ЛПС.

Поблочное рассмотрение структуры молекулы ЛПС показывает следующее:

О-специфическая (гидратируемая) часть абсолютно бесперспективна в плане эффективности адсорбционного связывания;

ядерная часть адсорбционно активна, но не обладает достаточной степенью селективности и способна обеспечить КР $\leq$ 5;

липидная часть (невариабильный участок) в гидрофильных биологических системах, напротив, представляется в высшей степени специфичной и пригодной для селективного связывания ЛПС. К аналогичному выводу пришли авторы статьи [7], которые провели компьютерное моделирование процесса сорбции.

В качестве экспериментального гидрофобного сорбента использовался синтезированный в ходе выполнения работы сорбент Сфероцелл С80 на основе регенерированной целлюлозы (микросферическая форма, макропористый вариант). Гидрофобные радикалы, выбранные в качестве аффинантов, по существу представляют собой функциональный аналог алифатического фрагмента молекулы ЛПС и потому характеризуются повышенным сродством к этому фрагменту.

Как показано в работе [8], кратность снижения равновесной концентрации ЛПС в физиологическом растворе в интервале исходных концентраций 10 – 10 000 нг/мл в КР для данного сорбента находится в диапазоне 1 800 – 3 000. Однако в тех же условиях, в присутствии 10 %-го альбумина, кратность понижается до уровня 50 – 280. По-видимому, таким образом проявляется конкуренция сорбатов за центры сорбции. Максимальная емкость сорбента по ЛПС в условиях конкуренции с альбумином превосходит 37 000 нг/мл сорбента. Величина КР позволяет оценить степень понижения содержания ЛПС в модельной среде, в том числе предельную; емкость – эффективность применения сорбента при очень высоких концентрациях ЛПС в средах.

Эксперименты показали, что при хроматографии на Сфероцелле С80 потери базового белка не превосходят 5 % [8], в то время как соответствующие потери в процессах с использованием сорбента Полимиксин Б сефарозы составляют более 25 % [4].

Одна из важнейших эксплуатационных характеристик сорбента – это его гидродинамическая жесткость, ограничивающая скорость потока в хроматографических процессах (что особенно существенно для процессов гемосорбции). Поэтому в работе изучали гидродинамическое сопротивление сорбента. Помимо этого, контролировали состояние гранул матрицы сорбента Сфероцелл после динамического процесса. Гидродинамические характеристики сорбента определяли в экспериментах *in vitro* с использованием массообменного устройства фирмы «Покард». Экспериментальные результаты представлены на рис. 2.

Линейная скорость перфузии определялась по величине объемной скорости фильтрации с учетом сечения колонки; она составила 30 мл/см^2. Для определения максимально возможной скорости перфу-

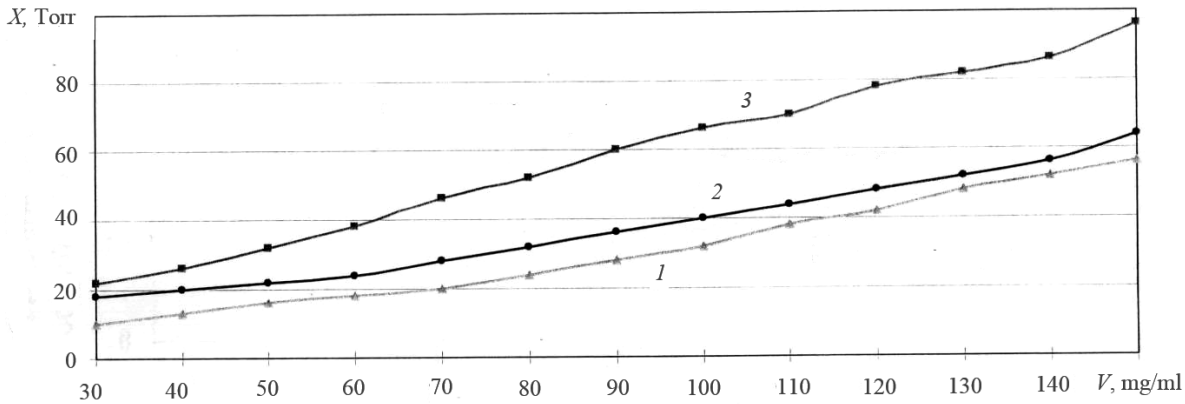


Рис. 2. Гидродинамические характеристики сорбента в экспериментах *in vitro*, полученные при перфузии 0,9 %-го раствора NaCl при различных значениях гидродинамического коэффициента, Торр: 0,33 (*1*), 0, 43 (*2*), 0,65 (*3*).
Условия эксперимента: *1* – пустая колонка; *2*, *3* – колонка с сорбентом, перфузия сверху вниз и снизу вверх, соответственно

зии сорбент Сфероцелл С80 (фракционный состав – 500 – 800 мкм) загружали в стеклянную колонку объемом 50 мл и пропускали 0,9 %-й раствор NaCl на скоростях 100 – 400 мл/мин. При значениях до 300 мл/мин наблюдался равномерный поток раствора, при повышении же скорости свыше 300 мл/мин равномерность нарушалась: поток сохранялся по величине, но возникали пульсации, что свидетельствует о переходе к нестационарному режиму течения. Таким образом экспериментально установлено, что сорбент обладает приемлемыми гидродинамическими характеристиками в диапазоне скоростей 0 – 300 мл/мин.

Поскольку в дальнейшем предполагается использование сорбента в неньютоновских жидкостях (плазма крови), особое внимание уделялось анализу его деформационно-прочностных характеристик. После извлечения сорбента из колонки образцы были изучены под микроскопом для выявления деформации и разрушения зерен сорбента. Констатировали отсутствие деформированных и разрушенных гранул.

Особенность поровой структуры носителя Сфероцелл состоит в бимодальном распределении пор по размерам. Для него характерны как поры с размером 0,1 – 3,0 мкм (транспортные поры), так и «хроматографические поры» с размерами 5 – 30 нм, при этом каждый тип пор дает определенный удельный вклад в суммарный объем порового пространства: 0,8 – 0,9 для транспортных пор и 0,35 – 0,40 для пор хроматографического масштаба [8].

Ввиду большого количества транспортных пор, сорбент обеспечивает эффективный массоперенос в каждом зерне для крупномолекулярных объектов, а гидрофобные аффинанты конкурентным образом разрушают ассоциаты ЛПС. Такая структура носителя позволяет эффективно сорбировать молекулярные компоненты в широком интервале размеров: от индивидуальных молекул до крупномасштабных ассоциатов без потери емкости сорбента; эта характеристика существенна при работе с крупномасштабными субстратами, в частности, с ассоциирующимся ЛПС.

Динамические характеристики взаимодействия эндотоксина с гидрофобным сорбентом оценивали с использованием лабораторных колонок различного размера. Исследовали влияние скорости и времени перфузии на эффективность связывания ЛПС гидрофобным сорбентом Сфероцелл С80.

В рамках этих экспериментов 20 мл сорбента Сфероцелл С80 (фракция 125 – 315 мкм) помещали в хроматографическую колонку. Через нее в режиме рециркуляции пропускали водный раствор эндотоксина с концентрацией 10 нг/мл в течение полутора

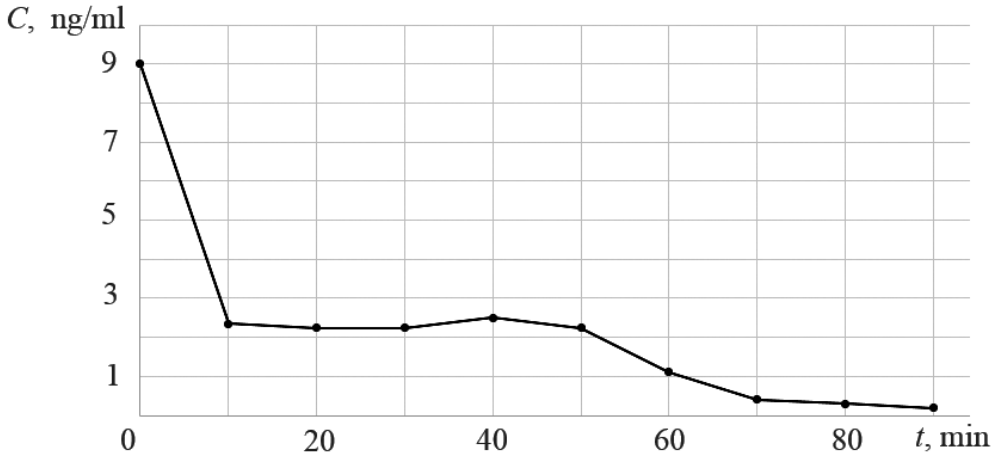


Рис. 3. Зависимость концентрации эндотоксина (ЛПС) на выходе хроматографической колонки от времени перфузии водного раствора эндотоксина (10 нг/мл) через сорбент Сфероцелл С80; скорость 1 мл/с

часов, на скорости 1 мл/с (60 мл/мин) общим объемом 500 мл. В ходе эксперимента через каждые 10 мин отбирали пробы по 100 мкл для анализа. В отобранных пробах хромогенным тестом LAL [9] определяли содержание эндотоксина. Результаты описанного эксперимента приведены на рис. 3. Видно, что концентрация эндотоксина снизилась более чем в 40 раз.

Исследования, направленные на оценку сорбции эндотоксина в условиях конкуренции с сывороточным альбумином проводили с помощью хроматографической колонки объемом 5 мл, заполненной 2 мл сорбента крупной фракции (500 мкм). Через нее пропускали 500 мл раствора эндотоксина в концентрации 100 нг/мл в 10 %-м сывороточном альбумине человека. Поток обеспечивался перистальтическим насосом. Скорость потока выбиралась исходя из требований к процессу экстракорпоральной гемокоррекции (120 мл/мин). Опыт прово-

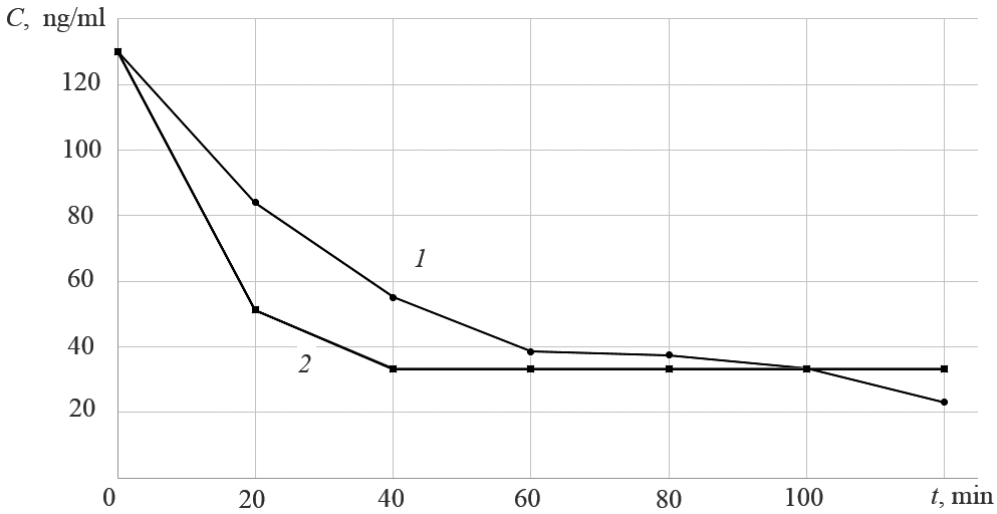


Рис. 4. Сравнение эффективностей сорбента С80 (*1*) и гемосорбента на основе ПС-ДВБ (*2*) по динамике перфузии раствора смеси эндотоксина с сывороточным альбумином (100 нг/мл + 10 %).
Представлены зависимости, аналогичные приведенной на рис. 3

дили при постоянной температуре. Пробы для анализа отбирали каждые 20 мин в течение двух часов. Количество эндотоксина в отобранных пробах определяли хромогенным тестом LAL [9]. Результаты приведены на рис. 4 (кривая *1*). Анализ полученных результатов показал, что по истечении 120 мин перфузии концентрация эндоксина в пробе снизилась в 5,7 раза, по сравнению с исходной.

Сравнительный эксперимент с использованием макропористого гидрофобного гемосорбента отечественной разработки на основе полистиролдивинилбензола (ПС-ДВБ), проведенный аналогичным образом, показал, что концентрация ЛПС в пробе за два часа перфузии снижается лишь в 3,9 раза (рис. 4, кривая *2*).

В результате проведенного исследования показано, что при использовании сорбента Сфероцелл С80 в ходе сорбционного процесса, реализованного в режиме, характерном для финишной очистки биопрепаратов генно-инженерного генеза, концентрация липополисахарида снижается в 40 раз, тогда как в ходе такого процесса, реализованного в режиме, характерном для процессов гемосорбции, концентрация липополисахарида снижается более чем в 5 раз.

Таким образом, реализованный процесс показывает, что сорбент Сфероцелл С80 в силу своих селективных, емкостных и гидродинамических характеристик с успехом обеспечивает переход к динамическому режиму и по эффективности элиминации ЛПС не уступает конвенциональным сорбентам, обеспечивая при этом необходимый уровень элиминации ЛПС как в биопрепаратах, так и в биологических жидкостях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Зулькарнаев А.Б.** Селективная сорбция эндотоксина грамотрицательных бактерий при хирургическом сепсисе. Автореф. дис. ... канд. мед. наук. Москва, 2010.

[2] **Яковлев М.Ю.** Кишечный липополисахарид: системная эндотоксинемия – эндотоксиновая агрессия – SIR-синдром и полиорганная недостаточность как звенья одной цепи // Бюлл. ВНЦ РАМН. 2005. № 1. С. 15–18.

[3] **Ярустовский М.Б.** Современные методы экстракорпоральной терапии в комплексном лечении сепсиса // Интенсивная терапия. 2008. № 1. С. 6–10.

[4] **Гусаров Д.А.** Способы очистки биофармацевтических белков от эндотоксинов клеточной стенки // Биофармацевтический журнал. 2009. Т. 1. № 3. С. 10–17.

[5] Комитет экспертов ВОЗ по стандартизации биологических препаратов: сорок шестой доклад: пер. с англ. Всемирная организация здравоохранения, Комитет экспертов. Женева: ВОЗ, 1998. 120 с.

[6] **Ronco C., Piccini P., Rosner M.H.** (eds). Ebdotoxemia and Endotoxin Shock: Disease, Diagnosis and Therapy// Contrib. Nephrol. 2010. Vol. 167. Pp. 25–34.

[7] **Ronco C., Piccini P., Rosner M.H.** (eds). Ebdotoxemia and Endotoxin Shock: Disease, Diagnosis and Therapy// Contrib. Nephrol. 2010. Vol. 167. Pp. 45–54.

[8] **Скворцов Н.В., Самойлов В.О., Ларионов И.В., Болдырев А.Г.** Эффективный сорбент для элиминации эндотоксина в биопрепаратах генно-инженерного генеза и биологических жидкостях // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 3(177). С. 177–181.

[9] Associates of Cape Cod, Inc. Описание фирменного LAL теста и инструкция по работе с ним.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СКВОРЦОВ Никита Владиславович – *научный сотрудник Государственного научно-исследовательского института особо чистых биопрепаратов.*

197110, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Пудожская ул., 7

aelu@yandex.ru

ВЛАСОВА Ольга Леонардовна – *доктор физико-математических наук, заместитель заведующего кафедрой медицинской физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

olvlasova@yandex.ru

БОЛДЫРЕВ Александр Георгиевич — *кандидат физико-математических наук, научный консультант Государственного научно-исследовательского института особо чистых биопрепаратов.*
197110, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Пудожская ул., 7
Doc.Boldyrev@yandex.ru

ЛАРИОНОВ Иван Владимирович — *начальник лаборатории медицинских нанотехнологий Государственного научно-исследовательского института особо чистых биопрепаратов.*
197110, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Пудожская ул., 7
larionov_ivanvl@mail.ru

Skvortsov N.S., Vlasova O.L., Boldyrev A.G., Larionov I.V. PERFORMANCE EVALUATION OF SFEROCELL S80 SORBENT IN THE DYNAMIC MODE.

The crucial factor of septic shock and subsequent multiple organ failure is the contamination of circulating blood with a bacterial endotoxin. The most straightforward approach to mitigating this condition is to remove the endotoxin from the bloodstream.

The hydrophobic Spherocel S80 sorbent has been used as an experimental one in the present work. It was synthesized on the basis of regenerated cellulose. The dynamic characteristics of endotoxin interactions with the hydrophobic sorbent under flow conditions were studied using chromatographic columns of different sizes. The effects of the rate and perfusion duration on LPS binding by Spherocel S80 were evaluated. The endotoxin quantity in every taken sample of the perfusate was determined through a chromogenic LAL test.

The implemented process showed that the sorbent Spherocel S80 proved successful under flow conditions due to its selective, capacitive, and hydrodynamic characteristics. Moreover, the sorbent was as efficient in LPS elimination as the conventional ones, ensuring the required degree of LPS elimination both in biotechnological preparations and biological liquids.

SORBENT, ELIMINATION, ENDOTOXIN, BIOLOGICAL PRODUCTS, HEMOSORPTION.

REFERENCES

[1] **A.B. Zul'karnaev**, Selektivnaya sorbtsiya endotoksina gramotritsatel'nykh bakterij pri khirurgicheskom sepsise. Avtoref. dis. ... kand. med. nauk [Selective adsorption of gram-negative bacteria endotoxin during surgical sepsis]. Moscow, 2010.

[2] **M.Yu. Yakovlev**, Kishechnyj lipopolisakharid: sistemnaya endotoksinemiya — endotoksinovaya agressiya — SIR — sindrom i poliorgannaya nedostatochnost', kak zven'ya odnoj tsepi [Intestinal lipopolysaccharide: systemic endotoxemia — endotoxin aggression — SIR-syndrome and multiple organ failure as links in a chain], Byull. VNTs RAMN. 1 (2005) 15—18.

[3] **M.B. Yarustovsky**, Sovremennye metody ekstrakorporal'noj terapii v kompleksnom lechenii sepsisa [Modern methods of extracorporeal therapy in treatment of sepsis], Intensive Care Journal. 1 (2008) 6—10.

[4] **D.A. Gusarov**, Methods of bacterial endotoxines removal from protein solutions, Russian Journal of Biopharmaceuticals. 1 (3) (2009) 10—17.

[5] WHO Expert committee on biological standardization technical report series: 46th report: Number 872. WHO, Geneva, 1998.

[6] **C. Ronco, P. Piccini, M.H. Rosner**, Ebdotoxemia and Endotoxin Shock: Disease, Diagnosis and Therapy. Contrib. Nephrol. 167 (2010) 25—34.

[7] **C. Ronco, P. Piccini, M.H. Rosner**, Ebdotoxemia and Endotoxin Shock: Disease, Diagnosis and Therapy. Contrib. Nephrol. 167 (2010) 45—54.

[8] **N.V. Skvortsov, V.O. Samoilov, I.V. Larionov, A.G. Boldyrev**, An effective sorbent for elimination endotoxin in biological products of genetically engineered genesis and biological liquids, St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. 3(177) (2013) 177—181.

[9] Associates of Cape Cod, Inc. LAL Methodology & Applications. Available at: http://www.acciusa.com/lal/index.html.

THE AUTHORS

SKVORTSOV Nikita S.
State Research Institute of Pure Biochemicals
7, Pudozhskaya St., St. Petersburg, 197110, Russian Federation
aelu@yandex.ru

VLASOVA Olga L.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29, Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
olvlasova@yandex.ru

BOLDYREV Alexander G.
State Research Institute of Pure Biochemicals
7, Pudozhskaya St., St. Petersburg, 197110, Russian Federation
Doc.Boldyrev@yandex.ru

LARIONOV Ivan V.
State Research Institute of Pure Biochemicals
7, Pudozhskaya St., St. Petersburg, 197110, Russian Federation
larionov_ivanvl@mail.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.10
УДК: 539.126.3

М.В. Малаев [1,2], В.Г. Рябов [1,2], Ю.Г. Рябов [1,2], Я.А. Бердников [2,1], В.М. Самсонов [1,2]

[1] Петербургский институт ядерной физики им Б.П. Константинова

[2] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ФАКТОРЫ ЯДЕРНОЙ МОДИФИКАЦИИ φ-МЕЗОНОВ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР СВИНЦА В ЭКСПЕРИМЕНТЕ ALICE НА БОЛЬШОМ АДРОННОМ КОЛЛАЙДЕРЕ

В статье представлены результаты измерения факторов ядерной модификации φ-мезонов, а также отношения выходов протонов и φ-мезонов в зависимости от поперечного импульса в (Pb + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 2,76 ТэВ. Результаты основаны на анализе данных, полученных в эксперименте ALICE на Большом адронном коллайдере. Представлено сравнение полученных результатов с факторами ядерной модификации для других идентифицированных адронов.

КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА, МЕЗОН, ТЯЖЕЛОЕ ЯДРО, КВАРК, ГЛЮОН, БОЛЬШОЙ АДРОННЫЙ КОЛЛАЙДЕР.

Введение

Одной из основных задач современной физики высоких энергий является изучение фазовой диаграммы состояния сильно взаимодействующей материи. Предполагается, что ядерная материя при высокой температуре и/или барионных плотностях испытывает переход от адронных к партонным степеням свободы [1, 2]. Изучение фазового перехода должно давать ключ к пониманию таких аспектов квантовой хромодинамики (КХД), как конфайнмент и нарушение киральной симметрии, не имеющих исчерпывающего объяснения на данный момент.

В лабораторных условиях достижение сверхвысоких плотностей энергии и барионных плотностей возможно только при изучении центральных столкновений релятивистских тяжелых ядер. В таких столкновениях кинетическая энергия налетающих частиц рассеивается в сравнительно большом объеме ядерного вещества, вовлеченном в реакцию. Нагревание и сжатие ядерного вещества может приводить к фазовому переходу материи из состояния бесцветных адронов в состояние свободных кварков и глюонов, получившее название кварк-глюонной плазмы (КГП) [3].

В 2005 году все коллаборации, работающие на релятивистском коллайдере тяжелых ионов (RHIC – Relativistic Heavy Ion Collider) [4] в Брукхейнвенской национальной лаборатории (БНЛ, США), сделали заявление об экспериментальном обнаружении нового состояния вещества – сильновзаимодействующей КГП [1, 2]. Обнаруженное вещество вело себя как идеальная жидкость с высокими плотностями энергии и цветовых зарядов, обладающая высокой температурой и партонными степенями свободы.

Вывод об образовании нового состояния ядерного вещества в центральных столкновениях тяжелых ядер при энергиях коллай-

дера RHIC основан на совокупности полученных экспериментальных результатов и их интерпретации в рамках современных представлений КХД. Одним из основных доводов в пользу образования КГП стало обнаружение эффекта подавления выхода адронов в области больших поперечных импульсов, получившего название эффекта гашения струй [5, 6]. Подавление выходов адронов происходит вследствие энергетических потерь высокоэнергетичных партонов при прохождении через цветозаряженную среду, образующуюся при столкновении двух релятивистских ядер [7, 8]. Измерение степени подавления выхода адронов позволяет оценивать энергетические потери партонов в среде и таким образом изучать ее свойства. При этом во взаимодействиях легких и тяжелых ядер не ожидается образования промежуточной среды и эффект гашения струй не проявляется.

Измерения, выполненные для легких адронов в ядро-ядерных взаимодействиях при энергиях коллайдера RHIC, показали, что выход адронов действительно подавлен более чем в пять раз в центральных столкновениях тяжелых ядер золота (Au + Au) [6]. При этом эффекта подавления не наблюдали для тех же частиц во взаимодействиях легких и тяжелых ядер (d + Au) [9], а также для высокоэнергетичных прямых фотонов, не участвующих в сильных взаимодействиях [10]. Это позволило сделать вывод об экспериментальном обнаружении эффекта гашения струй и получить оценки для плотности цветовых зарядов и плотности энергии в образующейся среде, которую в настоящее время ассоциируют с КГП. Несмотря на то, что на настоящий момент существует большое число теоретических моделей, которые успешно описывают степень подавления выхода легких адронов в центральных столкновениях тяжелых ядер, они не могут объяснить равную степень подавления выхода адронов, содержащих легкие (u, d)-кварки, и более тяжелых адронов, содержащих (c, b)-кварки. Очевидно, что разрешение данного кризиса требует более углубленного изучения эффекта гашения струй, систематического измерения выходов и степени подавления для большего числа идентифицированных адронов, расширения исследований на сектор частиц, содержащих в своем составе промежуточные по массе странные кварки.

Еще одним важным открытием, сделанным на RHIC, стало обнаружение избыточного выхода барионов по отношению к мезонам в области промежуточных поперечных импульсов в центральных столкновениях тяжелых ядер [11]. Отношение выходов протонов и пионов (p/π), измеренное в столкновениях тяжелых ионов в диапазоне поперечных импульсов 2 – 5 ГэВ/c, оказалось в несколько раз большим аналогичного отношения, измеренного в протон-протонных взаимодействиях при той же энергии. Для объяснения экспериментально обнаруженного эффекта, получившего название «барионная аномалия» [12], требуется привлечение механизмов рождения адронов, отличных от фрагментации. Существует ряд моделей [13, 14], которые пытаются описать избыточный выход барионов через рекомбинацию структурных кварков, при которой барионы, состоящие из трех кварков, получают большую прибавку к поперечному импульсу по сравнению с мезонами, состоящими только из двух кварков, что и приводит к появлению барионной аномалии. Рекомбинационные сценарии предполагают образование теплового источника партонов, что может означать образование КГП. Необходимо отметить, что альтернативные модели [15 – 17], отдающие предпочтение гидродинамическим эффектам и развитию потоков для описания барионной аномалии, также имеют право на существование. В последнем случае различие в поведении барионов и мезонов определяется в основном различием в массах частиц. Очевидно, что для дискриминации тех или иных предположений о доминирующих механизмах рождения адронов необходимо провести систематическое измерение свойств различных идентифицированных адронов в области промежуточных поперечных импульсов. При этом основной акцент должен делаться на измерение выходов барионов и мезонов, обладающих сходными массами.

В 2010 году началась реализация программы по изучению взаимодействий релятивистских тяжелых ядер на LHC [18] в Европейском центре ядерных исследований (ЦЕРН, Швейцария). Все открытия, сделанные на RHIC, были подтверждены экспериментами на LHC.

В данной работе в качестве инструмента для изучения свойств плотной и горячей среды, образующейся в центральных столкновениях тяжелых ядер на LHC, используются φ-мезоны. Данные частицы как по массе, так и по кварковому составу занимают промежуточное положение между более легкими (u, d) и более тяжелыми (c, b) частицами. Измерение выхода φ-мезонов в центральных столкновениях тяжелых ядер и степени его подавления в области больших поперечных импульсов позволит дополнить существующую картину и провести систематическое изучение эффекта гашения струй. Помимо этого, φ-мезон, обладающий массой, близкой к массе протона, можно рассматривать как идеального кандидата для изучения барионной аномалии.

В данной статье представлены результаты измерения инвариантных спектров рождения φ-мезонов в (p + p)-столкновениях при энергии $\sqrt{S}$ = 2,76 ТэВ и в (Pb + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 2,76 ТэВ. Результаты измерений используются для определения факторов ядерной модификации для φ-мезонов в (Pb + Pb)-столкновениях при различных центральностях столкновений. Обсуждается значение полученных результатов для определения свойств плотной и горячей среды, образующейся в центральных столкновениях тяжелых ядер, а также доминирующих механизмов рождения адронов в различных диапазонах по поперечному импульсу (p_T).

Измерение инвариантных спектров рождения φ-мезонов

Результаты, представленные в данной статье, были получены при анализе данных эксперимента ALICE на LHC. Детальное описание детекторной установки, а также цели и задачи эксперимента описаны в статье [19].

Восстановление φ-мезонов производилось в канале распада на два заряженных каона: $\varphi \to K^+K^-$. Треки заряженных частиц восстанавливались с использованием двух основных трековых детекторов эксперимента ALICE, а именно TPC (Time Projection Chamber – время-проекционная камера) и ITS (Inner Tracking System – внутренняя трековая система). В связи с большой множественностью частиц, образующихся в центральных столкновениях релятивистских тяжелых ядер при энергиях LHC, выделение сигнала в области малых значений поперечного импульса без использования идентификации частиц невозможно из-за высокого уровня комбинаторного фона. В то же время в области больших поперечных импульсов целесообразность использования идентификации частиц пропадает. В связи с этим все результаты, представленные в данной работе, были получены с использованием идентификации частиц для p_T < 3 ГэВ/c и без использования области p_T > 3 ГэВ/c. Идентификация частиц производилась с использованием детекторов TPC, где она осуществляется через измерение ионизационных потерь заряженной частицы, и TOF (Time Of Flight – время-пролетный детектор), в котором масса частицы определяется через измерения времени пролета и импульса частицы. Для улучшения отношения сигнал/фон были разработаны и оптимизированы следующие критерии отбора треков заряженных частиц:

допустимый диапазон значений по псевдобыстроте трека должен быть $|\eta| < 0{,}8$, что гарантирует нахождение трека в аксептансе детектора TPC);

минимальное число точек, измеренных вдоль сегмента трека заряженной частицы, восстановленного в TPC, должно быть равно 70;

каждый трек, восстановленный в TPC, должен быть ассоциирован с сегментом трека, восстановленным во внутреннем трекере ITS. Использование в анализе гибридных треков, восстановленных как в TPC, так и в ITS, позволяет улучшить импульсное разрешение и подавить вклады в комбинаторный фон от частиц, рождаю-

щихся не в первичной вершине взаимодействия ядер;

ограничение на минимальное значение поперечного импульса для отбираемых треков. В связи со значительным увеличением множественности рождающихся частиц в событии, для случая столкновения тяжелых ядер применялся более жесткий критерий, чем для случая столкновения легких. Анализ без идентификации частиц для наиболее центральных (Pb + Pb)-столкновений проводился для частиц при условии $p_T >$ 0,75 ГэВ/*c*. Для остальных центральностей использовали отбор $p_T > 0{,}50$ ГэВ/*c*. Анализ с использованием идентификации частиц для всех центральностей требовал выполнения условия $p_T > 0{,}15$ ГэВ/*c*.

Для измерения сигнала от распада φ-мезонов строили распределение инвариантных масс пар треков противоположного знака – K^+K^-. Полученное распределение пар отобранных для анализа треков противоположного знака содержало, помимо полезного сигнала, комбинаторный фон. Для оценки формы и величины некоррелированного фона от случайных пар треков использовался метод смешивания событий. Для смешивания отбирались однотипные события, имеющие одинаковые центральности столкновения ($|\Delta C| < 10\%$) и *z*-координаты вершины взаимодействия ядер ($|\Delta z| < 2$ см). После вычитания некоррелированного фона итоговое распределение инвариантных масс пар треков аппроксимировалось сложной функцией, которая включала в себя свертку функций Брейта – Вигнера (для учета сигнала) и функции Гаусса (для учета массового разрешения детектора). Кроме того, функция содержала полином второй степени для описания оста-

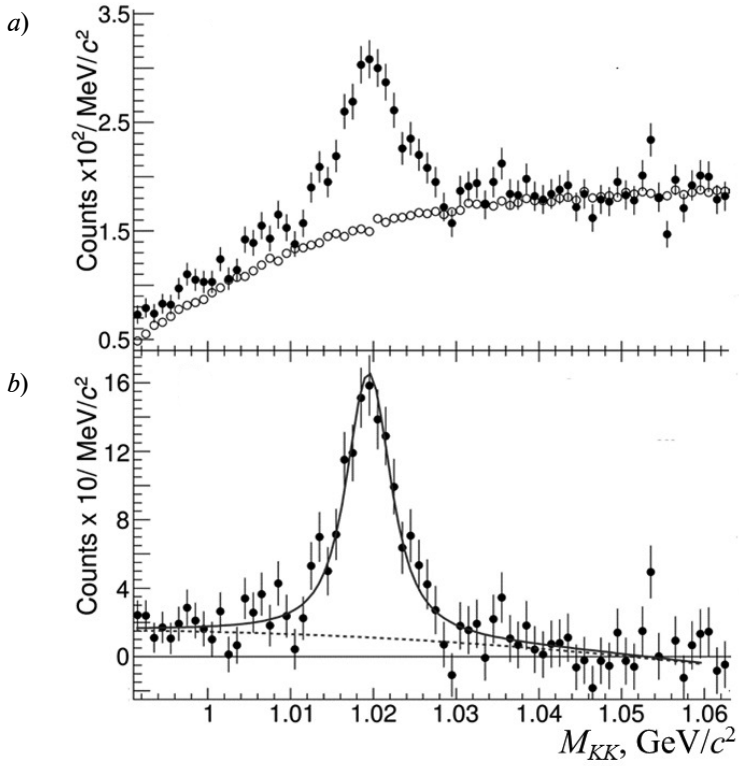


Рис. 1. Распределение инвариантных масс пар противоположно заряженных каонов в (Pb + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 2,76 ТэВ до (*a*) и после (*b*) вычета комбинаторного фона.
Черные точки – эксперимент; открытыми маркерами обозначен комбинаторный фон, оцененный методом смешивания событий; сплошная линия – аппроксимация распределения сложной функцией, прерывистая – часть функции, отвечающая за остаточный коррелированный фон

точного фона. На рис. 1 представлены примеры распределений инвариантных масс пар треков противоположного знака до и после вычитания комбинаторного фона.

Для оценки эффективности восстановления φ-мезонов в экспериментальной установке и массового разрешения трековой системы применялась симуляция Монте-Карло. В качестве генераторов событий использовались программы Pythia для (p + p)-столкновений и HIJING для (Pb + Pb). Прохождение сгенерированных частиц через экспериментальную установку моделировалось с использованием программного пакета GEANT3.

Оценка массового разрешения производилась путем сравнения по поперечному импульсу сгенерированных и восстановленных масс φ-мезона для каждого из изучаемых промежутков. Полученные распределения с разницей масс аппроксимировались функцией Гаусса, а значение ширины распределения Гаусса, полученное из аппроксимации, принималось равным разрешению по массе.

Эффективность восстановления φ-мезонов для каждого анализируемого промежутка по поперечному импульсу определялась как отношение N_{rec}/N_{gen}. В этом отношении N_{gen} – число сгенерированных φ-мезонов в данном промежутке по поперечному импульсу в изучаемом диапазоне значений быстрот, а N_{rec} – число восстановленных φ-мезонов после прохождения всех критериев отбора. Полученная таким образом эффективность демонстрирует быстрый рост с увеличением поперечного импульса частиц. В области $p_T > 8$ ГэВ/c она выходит на насыщение и значение эффективности восстановления (~ 0,45) уже не зависит от поперечного импульса.

Инвариантные дифференциальные спектры рождения φ-мезонов были получены с использованием следующей формулы:

$$\frac{1}{2\pi N p_T}\frac{d^2N}{dp_T dy} = \frac{1}{2\pi}\frac{\varepsilon_{trig}}{N_{ev}}\frac{1}{p_T}\frac{1}{eff\cdot BR}\frac{N_\varphi}{\Delta y \Delta p_T},$$

где N_{ev} – количество событий, используемых для анализа; p_T – центр исследуемого диапазона по поперечному импульсу; BR – вероятность распада φ-мезона на два заряженных каона (принята равной 48,9 % [20]); N_φ – измеренное значение выхода φ-мезонов в определенном диапазоне по быстроте и поперечному импульсу; eff – поправка, учитывающая ограниченность аксептанса и эффективность реконструкции детектора; ε_{trig} – поправка на эффективность триггера.

Основной вклад в систематическую погрешность измерений вносит неопределенность в эффективности восстановления треков заряженных частиц детекторами TPC и ITS. Данная неопределенность была оценена равной 5 % для каждого трека и 10 % для φ-мезона. Также большой вклад в систематическую ошибку измерений вносит неопределенность в определении выходов φ-мезонов из аппроксимации измеренных спектров инвариантной массы двух каонов. Данная погрешность оценивалась путем варьирования промежутка аппроксимации и использования различных функций для описания фона; она составила 4 – 12 % (в зависимости от значения поперечного импульса φ-мезонов). Общая систематическая ошибка измерений лежит в диапазоне от 12 до 17 % и определяется центральностью столкновений, при слабой зависимости от поперечного импульса φ-мезонов.

Результаты измерений

Инвариантные дифференциальные спектры рождения φ-мезонов были измерены в (p + p)- и в (Pb + Pb)-взаимодействиях при различных центральностях столкновения при энергиях $\sqrt{S} = \sqrt{S_{NN}} = 2,76$ ТэВ. Результаты измерений для второго случая представлены на рис. 2. Измерения выполнены в широком диапазоне поперечных импульсов (вплоть до 21 ГэВ/c) для случаев (p + p)- и (полу)центральных (Pb + Pb)-столкновений и в диапазоне до 6 ГэВ/c для случая периферийных (Pb + Pb)-столкновений. На рис. 2 и всех последующих статистические ошибки измерений показаны в виде «усов», систематические ошибки показаны с помощью прямоугольников. Для наглядности спектры для разных центральностей столкновения были помножены на масштабирующие коэффициенты (кратные 10).

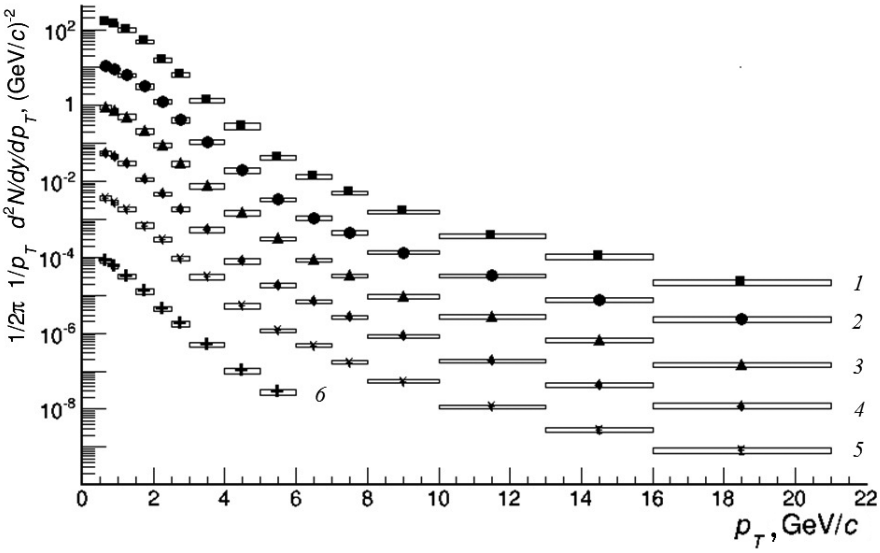


Рис. 2. Инвариантные дифференциальные спектры рождения φ-мезонов, измеренные в (Pb + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 2,76 ТэВ при центральностях столкновений 0 – 5 % (*1*), 10 – 20 % (*2*), 20 – 30 % (*3*), 30 – 40 % (*4*), 40 – 50 % (*5*), 60 – 80 % (*6*).

Спектры для разных центральностей столкновения помножены на масштабирующие коэффициенты: 10^2 (*1*), 10^1 (*2*), 10^0 (*3*), 10^{-1}(*4*), 10^{-2} (*5*), 10^{-3}(*6*). Вертикальными «усами» обозначены статистические ошибки, прямоугольниками – статистические ошибки измерений

Результаты измерений были использованы для определения факторов ядерной модификации для φ-мезонов в (Pb + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 2,76 ТэВ для различных центральностей столкновений. Фактор ядерной модификации R_{AB} определяется как

$$R_{AB} = \frac{dN^p_{AB}}{(T_{AB}) \times d\sigma^p_{NN}},$$

где dN^p_{AB} – дифференциальный выход частицы в (A + B)-взаимодействиях; $d\sigma^p_{NN}$ – сечение рождения частицы в (p + p)-столкновениях; T_{AB} – функции перекрытия ядер [21], получаемые с использованием модели Глаубера.

Факторы ядерной модификации для φ-мезонов в (Pb + Pb)-взаимодействиях представлены на рис. 3.

В центральных (Pb + Pb)-соударениях при больших значениях поперечного импульса выход φ-мезонов испытывает сильное подавление по отношению к (p + p)-взаимодействиям. Степень подавления совпадает с таковой для других идентифицированных адронов. При переходе от наиболее центральных столкновений к периферийным значения R_{AA} приближаются к единице. В области промежуточных величин поперечного импульса факторы ядерной модификации для φ-мезонов занимают промежуточное значение между этими факторами для протонов и каонов. В наиболее центральных (Pb + Pb)-столкновениях факторы ядерной модификации для φ-мезонов располагаются ближе к таковым для легких мезонов (K, π). В периферийных же столкновениях они расположены ближе к этим факторам для протонов.

На рис. 4 представлено отношение выходов p/φ для различных центральностей (Pb + Pb)-столкновений при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 2,76 ТэВ в зависимости от поперечного импульса. Результаты, полученные в периферийных (Pb + Pb)-столкновениях, в пределах неопределенностей измерений совпадают с результатами в (p + p)-столкновениях. В наиболее центральных (Pb + Pb)-столкновениях в диапазоне значений поперечного импульса p_T < 4 ГэВ/c отношение p/φ не зависит от величины поперечного импульса p_T.

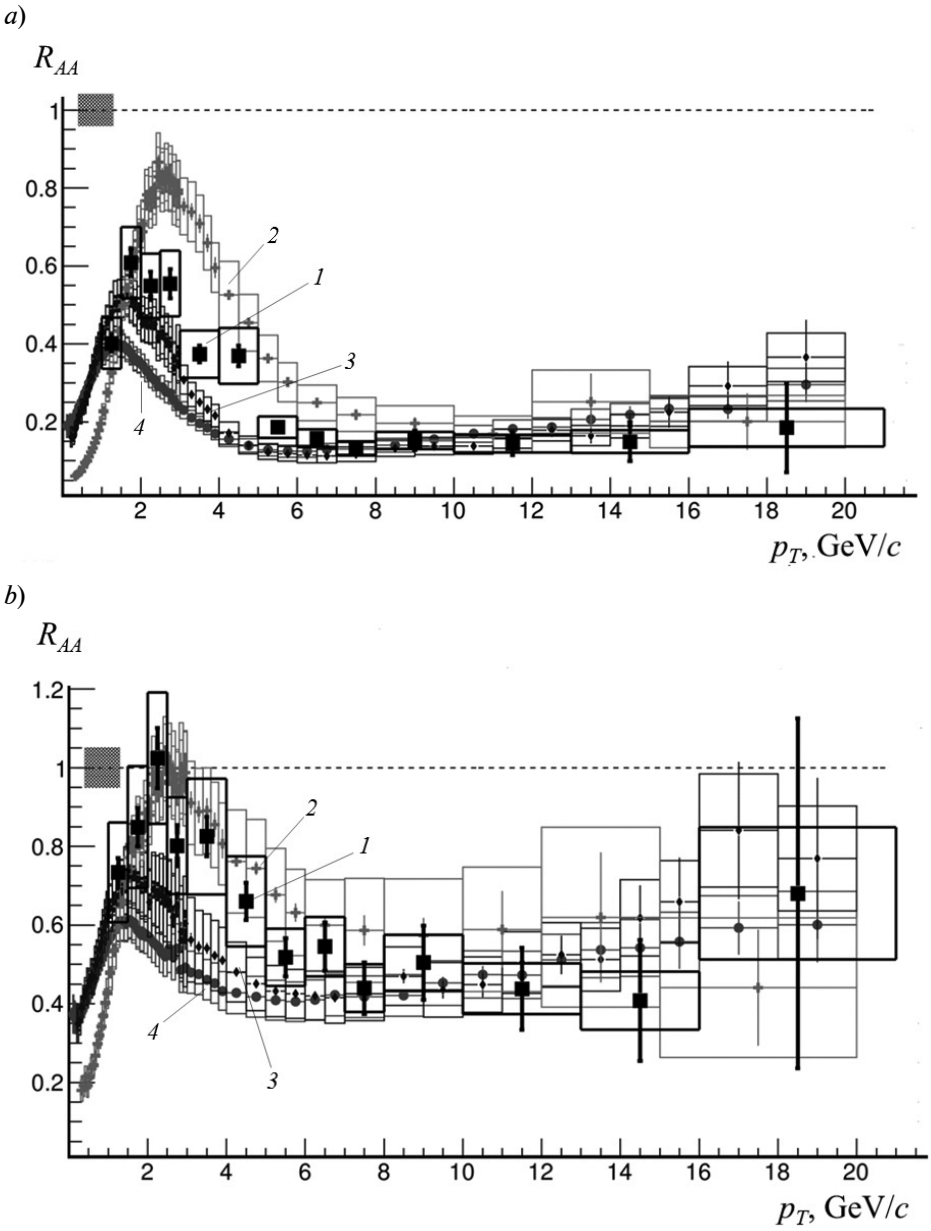


Рис. 3. Зависимость факторов ядерной модификации для φ-мезонов (*1*) от поперечного импульса в сравнении с другими адронами (*2* – протоны; *3*, *4* – заряженные каоны и пионы) в (Pb + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 2,76 ТэВ для центральностей столкновения 0 – 5 % (*a*) и 40 – 50% (*b*).
Вертикальными «усами» обозначены статистические ошибки, прямоугольниками – статистические ошибки измерений

Заключение

Анализ полученных результатов показал, что в области больших поперечных импульсов выход φ-мезонов испытывает сильное подавление в (полу)центральных (Pb + Pb)-взаимодействиях. Степень подавления для φ-мезонов в пределах неопределенностей измерений оказывается такой же, как и для остальных адронов (π, *K*, *p*). Данное подавление не может быть объяснено эффектами холодной ядерной материи или эффектами начального состояния

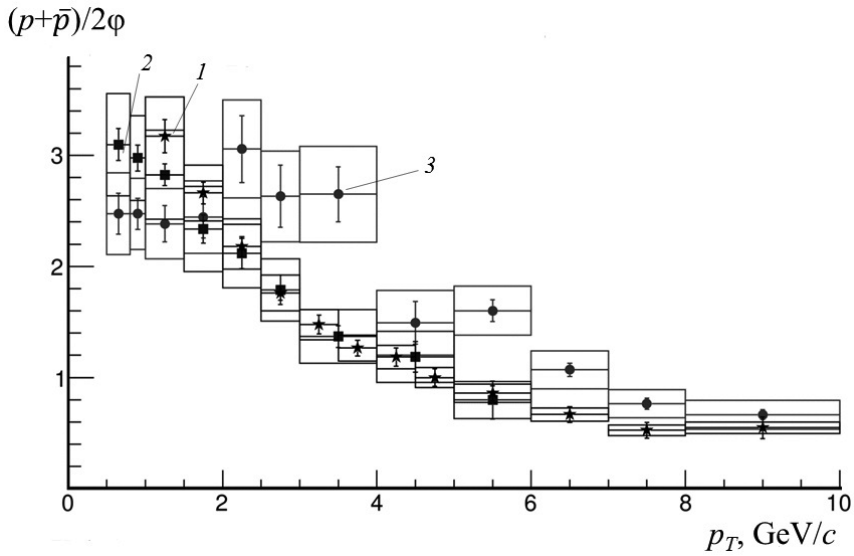


Рис. 4. Зависимость отношения выходов протонов и φ-мезонов от поперечного импульса при (p + p)-(*1*) и (Pb + Pb)-(*2*, *3*) взаимодействиях с энергией $\sqrt{S}$ = 2,76 ТэВ. Центральности столкновений ядер 60 – 80 % (*2*) и 0 – 5 % (*3*). Вертикальными усами обозначены статистические ошибки, прямоугольниками – статистические ошибки измерений

и может свидетельствовать об образовании кварк-глюонной плазмы.

Тот экспериментальный факт, что отношение p/φ в наиболее центральных (Pb + Pb)-взаимодействиях в области промежуточных значений поперечного импульса (вплоть до 4 ГэВ/c) остается постоянной величиной (см. рис. 4), приводит к заключению, что форма спектров рождения адронов в таких взаимодействиях определяется массой частицы. Это согласуется с предсказаниями гидродинамических моделей и не требует привлечения рекомбинационных моделей. Различное поведение факторов ядерной модификации, измеренных для φ-мезонов и протонов в наиболее центральных (Pb + Pb)-взаимодействиях, можно объяснить разницей между референсными спектрами рождения этих частиц в (p + p)-взаимодействиях.

Представленные в данной статье результаты могут быть использованы при изучении признаков и свойств горячей и плотной ядерной материи, образующейся в столкновениях релятивистских тяжелых ионов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Adcox K., Adler S.S., Afanasiev S., et al.** Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX collaboration // Nucl. Phys. A. 2005. Vol. 757. No. 1-2. Pp. 184–283.

[2] **Wang Z.M., Aggarwal M.M., Ahammed Z., et al.** Experimental and theoretical challenges in the search for the quark-gluon plasma: The STAR Collaboration's critical assessment of the evidence from RHIC collisions// Nucl. Phys. A. 2005. Vol. 757. No. 1-2. Pp. 102–183.

[3] **Shuryak E.V.** Quantum chromodynamics and the theory of superdence matter // Phys. Rept. 1980. Vol. 61. No. 2. Pp. 71–158.

[4] **Baym G.** RHIC: From dreams to beams in two decades // Nucl. Phys. A. 2002. Vol. 698. No. 1-4. Pp. 23–32.

[5] **Adcox K., Adler S.S., Ajitanand N.N., et al.** Suppression of hadrons with large transverse momentum in central Au+Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 130 GeV // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 88. No. 2. Pp. 022301 – 022307.

[6] **Adler S.S., Afanasiev S., Aidala C., et al.** Suppressed pion production at large transverse momentum in central Au + Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91. No. 7. Pp. 072301–072307.

[7] **Gyulassy M.** Gluon shadowing and jet

quenching in A +A collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 68. No. 10. Pp. 1480–1483.

[8] **Baier R., Schiff D., Zakharov B.G.** Energy loss in perturbative QCD // Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 2000. Vol. 50. Pp. 37–69.

[9] **Adler S.S., Afanasiev S., Aidala C., et al.** Nuclear effects on hadron production in *d*+Au and *p*+*p* collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV // Phys. Rev. C. 2006. Vol. 74. No. 2. Pp. 024904–024917.

[10] **Arleo F.** Hard pion and prompt photon at RHIC, from single do double inclusive production // JHEP. 2006. Vol. 06. No. 9. Pp. 15–46.

[11] **Adler S.S., Afanasiev S., Aidala C., et al.** Scaling properties of proton and anti-proton production in $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV Au + Au collisions // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91. No. 17. Pp. 172301–172307.

[12] **Velkovska J.** Can phi meson give an answer to the baryon puzzle at RHIC? // Eur. Phys. J. C. 2005. Vol. 43. No. 1-4. Pp. 317–322.

[13] **Hwa R., Yang C.** Recombination of shower partons at high p_T in heavy-ion collisions // Phys. Rev. C. 2004. Vol. 70. No. 2. Pp. 024905–024916.

[14] **Greco V., Ko C., Levai P.** Parton coalescence and the antiproton/pion anomaly at RHIC // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. No. 20. Pp. 202302–202306.

[15] **Qiu Z., Shen C., Heinz U.** Hydrodynamic elliptic and triangular flow in Pb-Pb collisions at $\sqrt{S}$ = 2.76 ATeV // Phys. Lett. B. 2012. Vol. 707. No. 1. Pp. 151–155.

[16] **Shen C., Heinz U., Huovinen P., Song H.** Radial and elliptic flow in Pb+Pb collisions at the Large Hadron Collider from viscous hydrodynamics // Phys. Rev. C. 2011. Vol. 84. No. 4. Pp. 044903–044915.

[17] **Bozek P., Wyskiel-Piekarska I.** Particle spectra in Pb-Pb collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 2.76 TeV // Phys. Rev. C. 2012. Vol. 85. No. 6. Pp. 064915–064921.

[18] **Evans L., Bryant P.** LHC Machine // JINST. 2008. Vol. 3. No. 8. Pp. S08002.

[19] **Aamodt K., Abrahantes Quintana A., Achenbach R., et al.** The ALICE experiment at the CERN LHC // JINST. 2008. Vol. 3. No. 8. S08002.

[20] **Beringer J., Arguin J.F., Barnett R.M., et al.** Review of Particle Physics // Phys. Rev. D. 2012. Vol. 86. No. 1. Pp. 1–1528.

[21] **Abelev B., Adam J., Adamova D., et al.** Centrality determination of Pb-Pb collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 2.76 TeV with ALICE // Phys Rev. C. 2013. Vol. 88. No. 4. Pp. 044909–044931.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МАЛАЕВ Михаил Владимирович – *младший научный сотрудник Петербургского института ядерной физики им Б.П. Константинова, ассистент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
mmalayev@gmail.com

РЯБОВ Виктор Германович – *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Петербургского института ядерной физики им Б.П. Константинова, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
riabovvg@gmail.com

РЯБОВ Юрий Германович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Петербургского института ядерной физики им Б.П. Константинова, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
yuriy.riabov@gmail.com

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович – *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, старший научный сотрудник Петербургского института ядерной физики им Б.П. Константинова.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
berdnikov@spbstu.ru

САМСОНОВ Владимир Михайлович – *доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией релятивистской ядерной физики Петербургского института ядерной физики им Б.П. Константинова, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща

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

samsonov@pnpi.spb.ru

Malaev M.V., Riabov V.G., Ryabov Yu.G., Berdnikov Ya.A., Samsonov V.M. PHI MESON NUCLEAR MODIFICATION FACTORS AT THE LEAD NUCLEI COLLISIONS IN THE ALICE EXPERIMENT AT THE LHC.

Hadron spectra measurements in proton-proton and nucleus-nucleus collisions at the LHC provide the means to study the mechanisms of particle production and properties of the medium formed in relativistic heavy ion collisions. Phi meson is a very rich probe since it is sensitive to several aspects of the collision such as strangeness enhancement, chiral symmetry restoration and parton energy loss. Due to its small inelastic cross-section, phi meson is not strongly affected by the late hadronic rescattering and is sensitive to the initial evolution of the system. With a mass similar to that of the proton, it is interesting to see how the phi meson fits within the meson/baryon pattern of observables. Being a pure $s\bar{s}$ state, it further constrains the energy loss and recombination pictures. This article presents recent results on phi meson invariant yields and nuclear modification factors measured in a wide range of transverse momentum up to 21 GeV/c^2 in (p + p) and (Pb + Pb) collisions at different centralities. The proton-to-(phi meson) yield (p/phi) ratio as a function of transverse momentum in (Pb + Pb) collisions at an energy of $\sqrt{S_{NN}}$ = 2.76 TeV is also presented.

NUCLEAR MODIFICATION FACTOR, QUARK-GLUON PLAZMA, MESON, HEAVY NUCLEOUS, PROTON, ALICE, LHC.

REFERENCES

[1] **K. Adcox, S.S. Adler, S. Afanasiev, et al.**, Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX collaboration, Nucl. Phys. A., 757 (2005) 184–283.

[2] **Z.M. Wang, M.M. Aggarwal, Z. Ahammed, et al**, Experimental and theoretical challenges in the search for the quark–gluon plasma: The STAR Collaboration's critical assessment of the evidence from RHIC collisions, Nucl. Phys. A., 757 (2005)102–183.

[3] **E.V. Shuryak**, Quantum chromodynamics and the theory of superdence matter, Phys. Rept., 61 (1980) 71–158.

[4] **G. Baym**, RHIC: From dreams to beams in two decades, Nucl. Phys. A., 698 (2002) 23–32.

[5] **K. Adcox, S.S. Adler, N.N. Ajitanand, et al.**, Suppression of hadrons with large transverse momentum in central Au+Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 130GeV, Phys. Rev. Lett., 88 (2001) 022301 – 022307

[6] **S.S. Adler, S. Afanasiev, C. Aidala, et al**, Suppressed pion production at large transverse momentum in central Au + Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV, Phys. Rev. Lett., 91 (2003) 072301–072307.

[7] **M. Gyulassy**, Gluon shadowing and jet quenching in A +A collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV, Phys. Rev. Lett., 68 (1992) 1480–1483.

[8] **R. Baier, D. Schiff, B.G. Zakharov**, Energy loss in perturbative QCD, Ann. Rev. Nucl. Part. Sci., 50 (2000) 37–69.

[9] **S.S. Adler, S. Afanasiev, C. Aidala, et al.**, Nuclear effects on hadron production in d+Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV revealed by comparison with p+p data, Phys. Rev. C., 74 (2006) 024904–024917.

[10] **F. Arleo**, Hard pion and prompt photon at RHIC, from single do double inclusive production, JHEP, 0609 (2006) 15–46

[11] **S. Adler, S. Afanasiev, C. Aidala, et al.**, Scaling properties of proton and anti-proton production in $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV Au + Au collisions, Phys. Rev. Lett., 91 (2003) 172301–172307.

[12] **J. Velkovska**, Can phi meson give an answer to the baryon puzzle at RHIC?, Eur. Phys. J. C., 43 (2005) 317–322.

[13] **R. Hwa, C. Yang**, Recombination of shower partons at high pT in heavy-ion collisions, Phys. Rev. C., 70 (2004) 024905-024916.

[14] **V. Greco, C. Ko, P. Levai**, Parton Coalescence and the Antiproton/Pion Anomaly at RHIC, Phys. Rev. Lett., 90 (2003) 202302–202306.

[15] **Z. Qiu, C. Shen U. Heinz**, Hydrodynamic elliptic and triangular flow in Pb-Pb collisions at

$\sqrt{S}$ = 2.76 ATeV, Phys. Lett. B, 707 (2012) 151–155.

[16] **C. Shen, U. Heinz, P. Huovinen, H. Song**, Radial and elliptic flow in Pb+Pb collisions at the Large Hadron Collider from viscous hydrodynamics, Phys. Rev. C, 84 (2011) 044903.

[17] **P. Bozek, I. Wyskiel-Piekarska**, Particle spectra in Pb-Pb collisions at sqrt{S_NN} = 2.76 TeV, Phys. Rev. C, 85 (2012) 064915.

[18] **L. Evans, P. Bryant**, LHC Machine, JINST, 3 (2008) S08001.

[19] **K. Aamodt, A. Abrahantes Quintana, R. Achenbach, et. al**, The ALICE experiment at the CERN LHC, JINST, 3 (2008) S08002.

[20] **J. Beringer, J.F. Arguin, R.M. Barnett, et al.**, Review of Particle Physics, Phys. Rev. D, 86 (2012) 010001.

[21]. **B. Abelev, J. Adam, D. Adamova, et. al.**, Centrality determination of Pb-Pb collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 2.76 TeV with ALICE, Phys Rev. C., 88 (2013) 4, 044909.

THE AUTHORS

MALAEV Mikhail V.
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russia
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
mmalayev@gmail.com

RIABOV Victor G.
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russia
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
riabovvg@gmail.com

RYABOV Yuri G.
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russia
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
yuriy.riabov@gmail.com

BERDNIKOV Yaroslav A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russia
berdnikov@spbstu.ru

SAMSONOV Vladimir M.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russia
vladimir.samsonov@cern.ch

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.11
УДК: 539.126.3

М.В. Малаев[1,2], В.Г. Рябов [1,2], Ю.Г. Рябов[1,2], Я.А. Бердников[2,1], В.М. Самсонов[1,2]

[1] Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

[2] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФАКТОРОВ ЯДЕРНОЙ МОДИФИКАЦИИ φ-МЕЗОНОВ ВО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯХ ПРОТОНОВ С ЯДРАМИ СВИНЦА В ЭКСПЕРИМЕНТЕ ALICE НА БОЛЬШОМ АДРОННОМ КОЛЛАЙДЕРЕ

В данной статье представлены инвариантные дифференциальные спектры рождения φ-мезонов во взаимодействиях протон – ядро свинца (p + Pb) при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 5,02 ТэВ при различных центральностях столкновений. На основе полученных результатов были определены факторы ядерной модификации для φ-мезонов в (p + Pb)-взаимодействиях при энергии, указанной выше. Представлено также сравнение факторов ядерной модификации, полученных для φ-мезонов, с аналогичными результатами для других идентифицированных адронов.

КВАРК-ГЛЮОННАЯ ПЛАЗМА, ХОЛОДНАЯ ЯДЕРНАЯ МАТЕРИЯ, ТЯЖЕЛОЕ ЯДРО, ПРОТОН, СВИНЕЦ, БОЛЬШОЙ АДРОННЫЙ КОЛЛАЙДЕР, ЭКСПЕРИМЕНТ ALICE.

Введение

Квантовая хромодинамика (КХД) предсказывает фазовый переход от обычной ядерной материи к состоянию свободных кварков и глюнов, которую принято называть кварк-глюонной плазмой (КГП) [1 – 3]. В лабораторных условиях подобный переход изучают, в основном, путем анализа столкновений релятивистских тяжелых ионов. На это (в том числе) направлены эксперименты на RHIC (Relativistic Heavy Ion Collider – Релятивистский коллайдер тяжелых ионов) [4] и на LHC (Large Hadron Collider – Большой адронный коллайдер) [5]. Но интерпретация результатов, полученных в столкновениях тяжелых ионов, невозможна без изучения более легких систем, таких как протон-протонные и протон-ядерные. Сравнение результатов, полученных для тяжелых и более легких систем, должно помогать разделению вкладов в полученные результаты от разных эффектов. В частности, на результаты влияют эффекты начального состояния и/или холодной ядерной материи и эффекты, связанные с образованием горячей и плотной материи.

Одним из основных наблюдений, сделанных на RHIC, предопределившим заявление об образовании КГП, было обнаружение подавления выходов адронов при больших значениях поперечного импульса p_T в столкновениях тяжелых ядер [6, 7]. Такое подавление нельзя было объяснить эффектами холодной ядерной материи, поскольку в результате всех предыдущих измерений ядерных эффектов при больших значениях поперечного импульса (p_T > 2 ГэВ/c) в (p + A)- и (A + A)-столкновениях при более низких значениях энергии $\sqrt{S_{NN}}$ были получены величины сечений даже выше, чем в случае точечного масштабирования [8]. Это явление («эффект Кронина» [9]) объясняется многократным мягким рассеянием налетающих партонов в ядерной среде перед жестким столкновением.

Изучение легких векторных мезонов позволяет более детально понять механизмы образования адронов и исследовать свойства плотной и горячей среды, образующейся в центральных столкновениях тяжелых ультрарелятивистских ядер. Одним из наиболее полезных объектов для исследований являются φ-мезоны, так как их свойства чувствительны к таким эффектам, как по-

вышенный выход странности, восстановление киральной симметрии, энергетические потери партонов, сопровождающие фазовый переход. Для изучения перечисленных эффектов необходимо измерять рождение мезонов не только в столкновениях тяжелых ядер, но и в протон-протонных и протон-ядерных взаимодействиях. Столкновение легких ядер с тяжелыми позволяет оценить эффекты холодной ядерной материи для более точной интерпретации эффектов горячей ядерной среды.

В данной статье представлены инвариантные дифференциальные спектры рождения φ-мезонов по поперечному импульсу в (p + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 5,02 ТэВ при различных центральностях столкновений. На основе полученных данных определены факторы ядерной модификации для φ-мезонов в (p + Pb)-взаимодействиях.

Измерение инвариантных спектров рождения φ-мезонов

Результаты, представленные в данной статье, основаны на анализе данных, полученных экспериментом ALICE на LHC в 2013 году при изучении (p + Pb)-столкновений при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 5,02 ТэВ. Подробное описание детекторной установки, целей и задач эксперимента ALICE представлены в работе [10].

С целью получения инвариантных спектров рождения φ-мезонов в (p + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 5,02 ТэВ было отобрано порядка 100 млн. событий. Каждое из них проверялось на срабатывание триггера (на основе информации с *V*0-детектора), отмечающего факт столкновения. Проведена также проверка возможной записи нескольких событий в качестве одного. Выявленные случаи исключались из анализа. Дополнительным критерием достоверности полученных результатов служило наличие восстановленной вершины взаимодействия в событии. Данная вершина должна была лежать в допустимом диапазоне вдоль оси пучка: $|Z_{vrtx}| < 10$ см.

Анализ проводился для канала распада φ-мезонов на два противоположно заряженных каона: K^+, K^-. Треки заряженных частиц восстанавливались в основных трековых детекторах эксперимента ALICE: TPC и ITS. Для анализа были разработаны и оптимизированы критерии отбора треков заряженных частиц (было необходимо отбраковать треки низкого качества и повысить отношение сигнал/фон). В связи с высоким уровнем комбинаторного фона, определяемого большой множественностью рождающихся в событии частиц, выделение сигнала в области малых значений поперечного импульса предполагало максимальное использование ресурсов экспериментальной установки по идентификации частиц. В связи с этим получение результатов было ограничено идентификацией частиц в области поперечных импульсов p_T < 3 ГэВ/c; в области же p_T > 3 ГэВ/c ее не проводили. Проводимое исследование частиц основывалась на информации, получаемой с детекторов TPC (измерение ионизационных потерь) и TOF (измерение времени лета на известной базе).

После отбора треков для анализа, для каждого интервала поперечного импульса строилось распределение инвариантных масс пар противоположно заряженных частиц. Полученное распределение содержало, кроме полезного сигнала, комбинаторный фон. Вычитание последнего основывалось на его оценке методом смешивания событий. Для смешивания выбирались такие события, которые были топологически близки по центральности и вершине взаимодействия. Для измерения выходов φ-мезонов распределение, остаточное после вычитания комбинаторного фона, аппроксимировалось комбинацией функций. В комбинацию входили свертка функций Брейта – Вигнера (для учета сигнала) и функции Гаусса (для учета массового разрешения детектора), а также полином второй степени для учета остаточного коррелированного фона. На рис. 1 представлено распределение инвариантных масс противоположно заряженных треков для одного из анализируемых диапазонов по поперечному импульсу вместе с примером аппроксимации комбинацией функций.

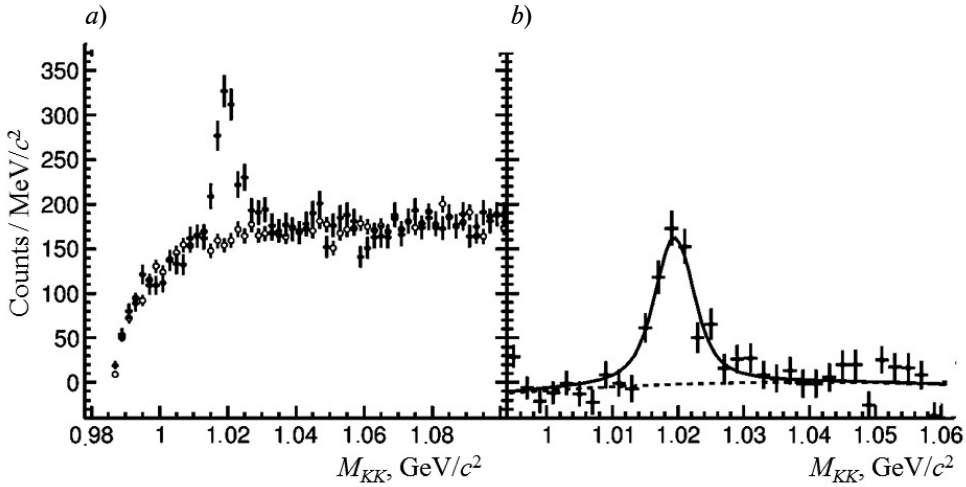


Рис. 1. Распределение инвариантных масс пар противоположно заряженных каонов в (p + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 5,02 ТэВ до (*a*) и после (*b*) вычета комбинаторного фона.

Черные точки – эксперимент; открытыми маркерами обозначен комбинаторный фон, оцененный методом смешивания событий (*a*); сплошная линия – аппроксимация распределения сложной функцией, прерывистая – часть функции, отвечающая за остаточный коррелированный фон (*b*)

Для определения эффективности реконструкции φ-мезонов в эксперименте ALICE, а также для оценки массового разрешения детекторной установки использовалось моделирование Монте-Карло. В качестве генератора событий использовалась программа DPMJET. Детекторная установка и процессы прохождения частиц через вещество моделировались с использованием программного пакета GEANT. Эффективность быстро возрастала с увеличением поперечного импульса частиц и насыщалась в области импульсов $p_T > 6$ ГэВ/*c*. Таким образом, диапазон измерения выходов φ-мезонов в области малых поперечных импульсов ограничен быстро уменьшающейся эффективностью восстановления частиц, а в области больших поперечных импульсов – интегральной светимостью накопленных экспериментальных данных.

Инвариантные дифференциальные спектры рождения φ-мезонов были получены с использованием формулы:

$$\frac{1}{2\pi N p_T}\frac{d^2N}{dp_T dy} = \frac{1}{2\pi}\frac{\varepsilon_{trig}}{N_{ev}}\frac{1}{p_T}\frac{1}{eff\cdot BR}\frac{N_\varphi}{\Delta y \Delta p_T},$$

где N_{ev} – количество событий, используемых для анализа; p_T – центр исследуемого диапазона по поперечному импульсу; BR – вероятность распада φ-мезона на два заряженных каона (48,9 % [11]); N_φ – измеренное значение выхода φ-мезонов в определенном диапазоне по быстроте и поперечному импульсу; eff – поправка, учитывающая ограниченность аксептанса и эффективность реконструкции детектора; ε_{trig} – поправка на эффективность триггера.

Систематическая погрешность измерений составила 7 – 13 % и зависела от значения поперечного импульса. К наиболее значимым источникам систематической погрешности необходимо отнести следующие неопределенности:

в эффективности восстановления треков заряженных частиц в детекторах TPC и ITS (3 % для одного трека и 6 % для φ-мезонов) [12];

в определении выходов φ-мезонов путем аппроксимации измеренных распределений инвариантных масс пар противоположно заряженных треков (3 – 11 % в зависимости от значения поперечного импульса).

Результаты измерений в эксперименте ALICE

Инвариантные дифференциальные спектры рождения φ-мезонов были измерены в (p + Pb)-взаимодействиях при

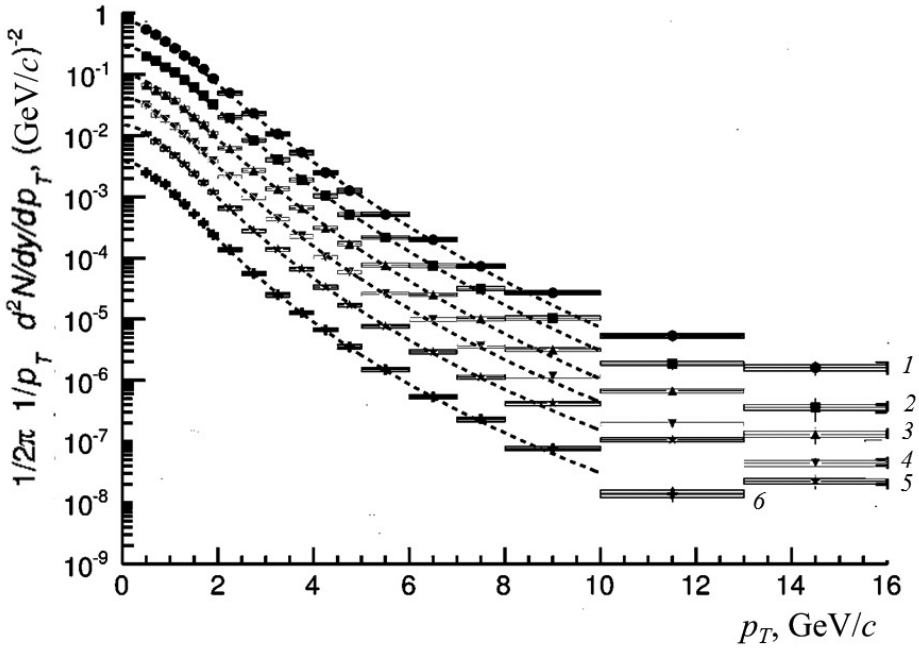


Рис. 2. Инвариантные дифференциальные спектры рождения φ-мезонов, измеренные в (p + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 5,02 ТэВ при центральностях столкновений: 0 – 5 % (*1*), 5–10 % (*2*), 10–20 % (*3*), 20 – 40 % (*4*), 40 – 60 % (*5*), 60 – 80 % (*6*). Спектры для разных центральностей столкновения помножены на масштабирующие коэффициенты: 10 (*1*), 5 (*2*), 2 (*3*), 1(*4*), 0,5 (*5*), 0,2 (*6*). Вертикальными «усами» обозначены статистические ошибки, прямоугольниками – статистические ошибки измерений

энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 5,02 ТэВ при различных центральностях столкновений. При центральностях 0 – 100 % результаты были получены в области поперечных импульсов до 21 ГэВ/*c*. В случае анализа узких интервалов по центральности столкновений результаты были получены в диапазоне до 16 ГэВ/*c* для всех центральностей, за исключением наиболее периферийных столкновений, в которых измерения были выполнены только до 13 ГэВ/*c*. Все спектры были измерены в области центральных быстрот ($-0{,}5 < y_{cms} < 0$). Полученные результаты представлены на рис. 2. Спектры для разных центральностей были помножены на масштабирующие коэффициенты для наглядности представления данных.

Поскольку на LHC на данный момент не было проведено цикла набора по изучению (p + p)-столкновений при энергии $\sqrt{S}$ = 5,02 ТэВ, для получения референсного спектра для определения факторов ядерной модификации φ-мезонов в (p + Pb)-взаимодействиях были использованы инвариантные спектры рождения φ-мезонов, полученные в (p + p)-взаимодействиях при энергиях $\sqrt{S}$ = 2,76 и 7,00 ТэВ.

Для измерения инвариантного сечения рождения φ-мезонов в протон-протонных взаимодействиях при энергии $\sqrt{S}$ = 5,02 ТэВ была использована интерполяция между полученными значениями для случаев протон-протонных взаимодействий при энергиях $\sqrt{S}$ = 2,76 и 7,00 ТэВ. Данная интерполяция производилась отдельно для каждого исследуемого промежутка по поперечному импульсу и основывалась на предположении о степенной зависимости сечения рождения частиц от энергии сталкивающихся ядер в системе центра масс. Статистическая ошибка определялась в процессе интерполяции, а в качестве относительной систематической ошибки выбиралась наибольшая относительная ошибка, полученная для сечений рождения φ-мезонов в (p + p)-взаимодействиях при энергиях $\sqrt{S}$ = 2,76 и 7,00 ТэВ.

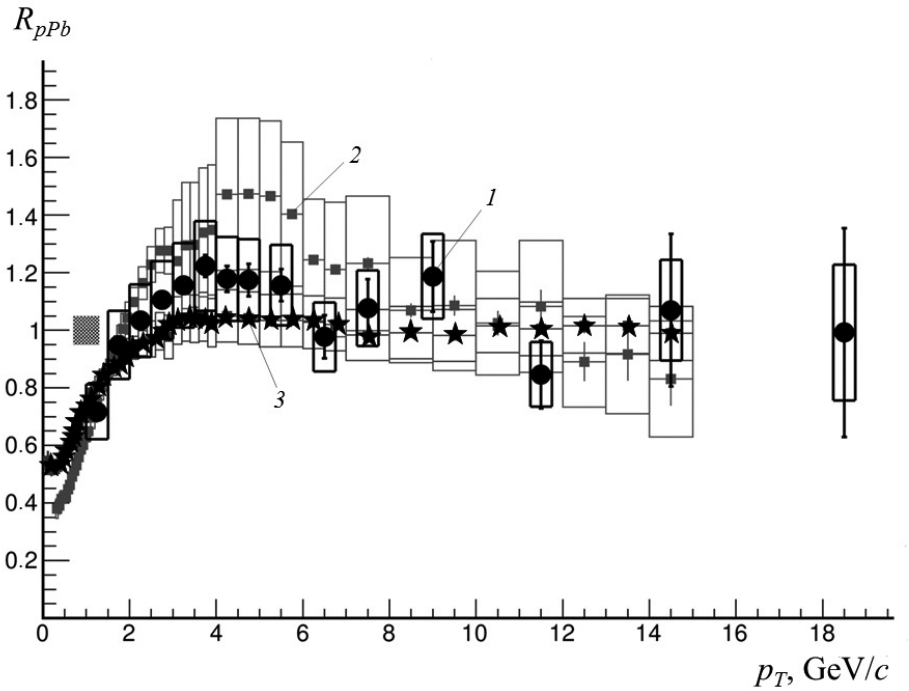


Рис. 3. Зависимость факторов ядерной модификации для φ-мезонов (*1*) от поперечного импульса в сравнении с другими адронами (*2* – протоны, *3* – заряженные пионы) в (p + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 5,02 ТэВ.
Вертикальными «усами» обозначены статистические ошибки, прямоугольниками – статистические ошибки измерений

На основе результатов для (p + p)- и (p + Pb)-взаимодействий при указанных выше значениях энергии были определены факторы ядерной модификации для φ-мезонов в (p + Pb)-взаимодействиях при энергии $\sqrt{S_{NN}}$ = 5,02 ТэВ. Фактор ядерной модификации R_{AB} определяется как

$$R_{AB} = \frac{dN^{p}_{AB}}{(T_{AB}) \times d\sigma^{p}_{NN}},$$

где dN^{p}_{AB} – дифференциальный выход частицы в (A + B)-взаимодействиях, $d\sigma^{p}_{NN}$ – сечение рождения частицы в (p + p)-столкновениях, T_{AB} – функции перекрытия ядер [13].

На рис. 3 представлены полученные факторы для φ-мезонов в сравнении с другими идентифицированными адронами для случая центральности 0–100 %. Видно, что при больших значениях поперечного импульса выход φ-мезонов (а также других адронов) не испытывает подавления в (p + Pb)-взаимодействиях, так как значения факторов ядерной модификации совпадают с единицей в пределах ошибок измерений. В области промежуточных значений поперечного импульса наблюдается повышенный выход адронов в (p + Pb)-взаимодействиях в сравнении с элементарными (p + p)-столкновениями. Данное превышение выходов слабо выражено для мезонов и более существенно – для барионов.

Заключение

Представленные результаты демонстрируют, что в области больших поперечных импульсов выходы φ-мезонов, как и других адронов, не испытывают подавления в (p + Pb)-взаимодействиях, по сравнению с результатами, полученными в (p + p)-столкновениях. Этот факт подтверждает выдвинутую гипотезу, что подавление выходов адронов в центральных столкновениях тяжелых ядер, наблюдаемое на LHC, нельзя объяснить эффектами холодной ядерной материи, и таким образом

может служить признаком образования КГП.

При промежуточных значениях поперечного импульса наблюдается повышенный выход φ-мезонов. Такой результат можно качественно объяснить эффектом Кронина, ранее наблюдавшимся на RHIC [14]. В то же время следует отметить, что указанный эффект оказывается более выраженным при энергиях RHIC, чем LHC (разные коллайдеры).

Результаты, представленные в данной статье, могут быть использованы для оценки вкладов в процессы рождения частиц от эффектов холодной ядерной материи, что необходимо для интерпретации результатов, полученных в столкновениях релятивистских тяжелых ядер.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Adcox K., Adler S.S., Afanasiev S., et al.** Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX collaboration // Nucl. Phys. A. 2005. Vol. 757. No. 1-2. Pp. 184–283.

[2] **Wang Z.M., Aggarwal M.M., Ahammed Z., et al.** Experimental and theoretical challenges in the search for the quark-gluon plasma: The STAR Collaboration's critical assessment of the evidence from RHIC collisions// Nucl. Phys. A. 2005. Vol. 757. No. 1-2. Pp. 102–183.

[3] **Shuryak E.V.** Quantum chromodynamics and the theory of superdence matter // Phys. Rept. 1980. Vol. 61. No. 2. Pp. 71–158.

[4] **Baym G.** RHIC: From dreams to beams in two decades // Nucl. Phys. A. 2002. Vol. 698. No. 1-4. Pp. 23–32.

[5] **Evans L., Bryant P.** LHC Machine // JINST. 2008. Vol. 3. No. 8. Pp. S08002.

[6] **Adcox K., Adler S.S., Ajitanand N.N., et al.** Suppression of hadrons with large transverse momentum in central Au+Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 130 GeV // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 88. No. 2. Pp. 022301–022307.

[7] **Adler S.S., Afanasiev S., Aidala C., et al.** Suppressed pi0 production at large transverse momentum in central Au + Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91. No. 7. Pp. 072301–072307.

[8] **Adler S.S., Afanasiev S., Aidala C., et al.** Nuclear effects on hadron production in d+Au and p+p collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV // Phys. Rev. C. 2006. Vol. 74. No. 2. Pp. 024904–024917.

[9] **Cronin J**. Production of hadrons at large transverse momentum at 200, 300 and 400 GeV// Phys. Rev. D. 1975. Vol. 11. Pp. 3105–3123.

[10] **Aamodt K., Abrahantes Quintana A., Achenbach R., et al.** The ALICE experiment at the CERN LHC // JINST. 2008. Vol. 3. No. 8. S08002.

[11] **Beringer J., Arguin J.F., Barnett R.M., et al.** Review of particle physics // Phys. Rev. D. 2012. Vol. 86. No. 1. P. 010001.

[12] **Abelev B. Adam J., Adamova D., et al.** Transverse momentum distribution and nuclear modification factor of charged particles in p-Pb collisions at $\sqrt{(s_NN)}$ = 5.02 TeV// Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 110. No. 8. P. 082302.

[13] **Toia A.** ALICE measurements in p-Pb collisions: Charged particle multiplicity, centrality determination and implications for binary scaling // Nucl. Phys. A. 2014. Vol. 926. Pp. 78–84.

[14] **Adare A., Afanasiev A., Aidala C., et al.** Nuclear modification factors of φ mesons in d+Au, Cu+Cu and Au+Au collisions at sqrt(S_NN) =200 GeV// Phys. Rev. C. 2011. Vol. 83. No. 2. P. 024909.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

МАЛАЕВ Михаил Владимирович – *младший научный сотрудник лаборатории релятивистской ядерной физики Петербургского института ядерной физики им Б.П. Константинова, ассистент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
mmalayev@gmail.com

РЯБОВ Виктор Германович – *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории релятивистской ядерной физики Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
riabovvg@gmail.com

РЯБОВ Юрий Германович – *кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории релятивистской ядерной физики Петербургского института ядерной физики им Б.П. Константинова, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
yuriy.riabov@gmail.com

БЕРДНИКОВ Ярослав Александрович – *доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, старший научный сотрудник лаборатории релятивистской ядерной физики Петербургского института ядерной физики им Б.П. Константинова.*

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

САМСОНОВ Владимир Михайлович – *доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией релятивистской ядерной физики Петербургского института ядерной физики им Б.П. Константинова, профессор кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

188300, Российская Федерация, Ленинградская область, Гатчина, Орлова Роща
samsonov@pnpi.spb.ru

Malaev M.V., Riabov V.G., Ryabov Yu.G., Berdnikov Ya.A., Samsonov V.M.

DETERMINATION OF PHI MESON NUCLEAR MODIFICATION FACTORS IN THE PROTON – LEAD NUCLEOUS INTERACTIONS IN THE ALICE EXPERIMENT AT THE LHC.

Hadronic resonances are among the most interesting probes of the hot and dense matter created in Pb + Pb collisions. Due to their short lifetime, they are sensitive to the anticipated chiral symmetry restoration as well as to suppression and regeneration due to hadronic interactions in the final state. At intermediate and high transverse momenta (p_T) resonances which cover the range of masses between the light pions and heavier protons contribute in systematic study of the baryon puzzle and parton energy loss in the dense medium. Studies in p + Pb collisions are important for the interpretation of heavy ion results as they allow to decouple and understand the cold nuclear matter effects from final state effects.

The systematic study of the phi (1020) meson production at mid-rapidity in p + Pb collisions at LHC energies has been performed. In this article the most recent results of these studies including p_T spectra and nuclear modification factor distributions in p + Pb collisions at an energy of $\sqrt{S_{NN}}$ = 5.02 TeV are presented.

QUARK-GLUON PLAZMA, COLD NUCLEAR MATTER, HEAVY NUCLEOUS, PROTON, LEAD, LARGE HADRON COLLIDER, ALICE EXPERIMENT.

REFERENCES

[1] **K. Adcox, S.S. Adler, S. Afanasiev, et al.**, Formation of dense partonic matter in relativistic nucleus-nucleus collisions at RHIC: Experimental evaluation by the PHENIX collaboration, Nucl. Phys. A., 757 (2005) 184–283

[2] **Z.M. Wang, M.M. Aggarwal, Z. Ahammed, et al**, Experimental and theoretical challenges in the search for the quark–gluon plasma: The STAR Collaboration's critical assessment of the evidence from RHIC collisions, Nucl. Phys. A., 757 (2005)102–183

[3] **E.V. Shuryak**, Quantum chromodynamics and the theory of superdence matter, Phys. Rept., 61(1980) 71-158

[4] **G. Baym**, RHIC: From dreams to beams in two decades, Nucl. Phys. A., 698 (2002) 23–32

[5] **L. Evans, P. Bryant**, LHC Machine, JINST, 3 (2008) S08001

[6] **K. Adcox, S.S. Adler, N.N. Ajitanand, et al.**, Suppression of hadrons with large transverse momentum in central Au+Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 130GeV, Phys. Rev. Lett., 88 (2001) 022301–022307

[7] **S.S. Adler, S. Afanasiev, C. Aidala, et al**, Suppressed pion production at large transverse

momentum in central Au + Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV, Phys. Rev. Lett., 91 (2003) 072301–072307

[8] **S.S. Adler, S. Afanasiev, C. Aidala, et al.**, Nuclear effects on hadron production in d+Au collisions at $\sqrt{S_{NN}}$ = 200 GeV revealed by comparison with p+p data, Phys. Rev. C., 74 (2006) 024904–024917

[9] **J. Cronin**, Production of hadrons at large transverse momentum at 200, 300 and 400 GeV, Phys. Rev. D., 11 (1975) 3105–3123

[10] **K. Aamodt, A. Abrahantes Quintana, R. Achenbach, et. al.**, The ALICE experiment at the CERN LHC, JINST, 3 (2008) S08002

[11] **J. Beringer, J.F. Arguin, R.M. Barnett, et al.**, Review of Particle Physics, Phys. Rev. D, 86 (2012) 010001

[12] **B. Abelev, J. Adam, D. Adamova, et. al**, Transverse momentum distribution and nuclear modification factor of charged particles in p-Pb collisions at sqrt(s_NN) = 5.02 TeV, Phys. Rev. Lett., 110 (2013) 8, 082302

[13] **A. Toia**, ALICE Measurements in p-Pb Collisions: Charged Particle Multiplicity, Centrality Determination and implications for Binary Scaling, Nucl. Phys. A., 926 (2014) 78–84

[14] **A. Adare, A. Afanasiev, C. Aidala, et al.**, Nuclear modification factors of φ mesons in d+Au, Cu+Cu and Au+Au collisions at sqrt(S_NN) =200 GeV, Phys. Rev. C., 83 (2011) 024909

THE AUTHORS

MALAEV Mikhail V.
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
mmalayev@gmail.com

RIABOV Victor G.
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
riabovvg@gmail.com

RYABOV Yuri G.
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
yuriy.riabov@gmail.com

BERDNIKOV Yaroslav A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
berdnikov@spbstu.ru

SAMSONOV Vladimir M.
Petersburg Nuclear Physics Institute
Orlova Roscha, Gatchina, 188300, Leningrad Oblast, Russian Federation
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
vladimir.samsonov@cern.ch

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.12
УДК 519.216.2

Т.А. Алексеева

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Санкт-Петербургский филиал

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ДОРОЖНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ДИНАМИКИ МОБИЛЬНЫХ МАШИН

В работе представлена методика моделирования случайных дорожных возмущений на основе метода неканонического разложения случайных функций в виде детерминированных функций, зависящих только от трех случайных величин при любых законах распределения их вероятностей.

СЛУЧАЙНОЕ ВОЗМУЩЕНИЕ, НЕКАНОНИЧЕСКОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ СЛУЧАЙНЫХ ФУНКЦИЙ, КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ, СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ, ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЙ МЕТОД.

Одной из основных задач при исследовании низкочастотных колебаний мобильных машин, в частности колесных тракторов, является учет случайных воздействий со стороны микрорельефа поля (дороги). Микрорельеф представляет собой поверхность поля или дороги со случайным расположением неровностей. Его принято рассматривать как случайную функцию, удовлетворяющую следующим требованиям: функция стационарна, ординаты микропрофиля подчиняются нормальному закону распределения, длины неровностей ограничены по верхнему и нижнему пределам, микропрофиль меняется случайным образом только в вертикальной продольной плоскости [8, 12 – 14].

Существуют различные методы представления случайных функций: с помощью обобщенных рядов Фурье, методами К. Карунена, В.С. Пугачева, В.А. Котельникова и др. [1–5]. Эти методы представления позволяют построить для любой случайной функции бесконечный функциональный ряд, коэффициентами которого являются нормированные некоррелированные случайные величины. Однако все эти представления случайной функции обладают рядом существенных недостатков. В частности, для получения приемлемой точности необходимо использовать достаточно большое число членов ряда. Кроме того, линейная форма этих представлений мало пригодна при исследовании нелинейных колебательных систем.

В данной работе в основу методики моделирования случайных дорожных возмущений положено неканоническое представление случайной функции, предложенное В.И. Чернецким [6]. Оно отличается от других тем, что дает точное совпадение случайной функции и ее представления в рамках корреляционной теории при использовании для стационарной случайной функции всего трех случайных величин. Такое представление случайной функции имеет широкий спектр применения, в частности используется для анализа электрических цепей [7], а также представления реализаций случайных процессов сложной структуры [8–11].

Согласно принятым допущениям, достаточными статистическими характеристиками случайной функции дорожного

возмущения являются корреляционная функция и спектральная плотность. В результате анализа применяемых на практике выражений для аппроксимации корреляционных функций была выбрана функция следующего вида [12, 13]:

$$R_h(\tau) = D_h\left(A_0 e^{-\alpha_0|\tau|}(1+\alpha_0|\tau|) + \right.$$
$$\left. + \sum_{i=1}^{N} A_i e^{-\alpha_0|\tau|}\left(\cos\beta_i\tau + \frac{\alpha_i}{\beta_i}\sin\beta_i|\tau|\right)\right). \quad (1)$$

Соответствующая ей спектральная плотность имеет вид

$$S_h(\omega) = D_h\left(\frac{4A_0\alpha_0^3}{(\omega^2+\alpha_0^2)^2} + \right.$$
$$\left. + \sum_{i=1}^{N}\frac{4A_i\alpha_i\omega_{0i}^2}{(\omega^2-\omega_{0i}^2)^2+4\alpha_i^2\omega^2}\right), \quad (2)$$

где A_0, A_i — безразмерные коэффициенты, учитывающие величину спектральной плотности микрорельефа в точках максимума; D_h, см^2 — дисперсия возмущения; τ, с — время; N — число максимумов спектральной плотности; ω, с$^{-1}$ — частота.

Корреляционные коэффициенты α_0, α_i, β_i связаны со скоростью движения машины v соотношениями:

$$\alpha_0 = \alpha_{0\text{ед.}}v; \quad \alpha_i = \alpha_{i\text{ед.}}v; \quad \beta_i = \beta_{i\text{ед.}}v, \quad (3)$$

где $\alpha_{0\text{ед.}}, \alpha_{i\text{ед.}}, \beta_{i\text{ед.}}$ — коэффициенты, соответствующие единичной скорости.

Такой выбор корреляционной функции обусловлен тем, что, во-первых, она позволяет учитывать наличие периодической составляющей в случайной функции возмущения, во-вторых, на основе экспериментальных исследований [12, 13] были получены значения коэффициентов в выражении (1) для ряда основных типов микропрофилей. Это явилось основой для построения реализаций случайных функций возмущения в аналитической форме.

Из-за сложности проблемы построения реализаций случайных функций возмущений по их статистическим характеристикам, обычно в выражении для корреляционной функции (1) используют одно или два слагаемых.

В данной работе решена задача построения реализаций случайных дорожных возмущений при удержании в указанном выражении пяти и более членов, что позволяет учесть максимумы спектральных плотностей и получить более достоверную информацию о спектральном составе микрорельефа.

Эта методика используется для построения реализаций случайных функций возмущений $h_1(t)$ и $h_2(t)$, входящих в систему дифференциальных уравнений, моделирующих колебания мобильных машин. Эти функции имеют вид:

$$h_1(t) = m_{h_1} + \lambda_1\sin\omega t + \lambda_2\cos\omega t; \quad (4)$$

$$h_2(t) = m_{h_2} + \lambda_1\sin\omega(t-t_0) + \lambda_2\cos\omega(t-t_0), \quad (5)$$

где $t_0 = l / v$ (l — база мобильной машины, v — скорость движения); m_{h_1}, m_{h_2} — математические ожидания случайных функций; λ_1, λ_2, ω — независимые случайные величины.

Необходимые для построения реализаций вероятностные характеристики случайных функций $h_1(t)$ и $h_2(t)$ заданы: их математические ожидания равны нулю, а корреляционная функция определяется выражением (1).

Законы распределения вероятностей случайных величин λ_1 и λ_2 произвольны, а плотность распределения случайной величины ω определяется по корреляционной функции (1):

$$f(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{R_h(\tau)}{D_h}e^{-i\omega\tau}d\tau = \frac{2A_0\alpha_0^3}{\pi(\alpha_0^2+\omega^2)^2} + \sum_{i=1}^{N}\frac{2A_i\alpha_i\omega_{0i}^2}{\pi(\omega_{0i}^2-\omega^2)^2+(2\alpha_i\omega)^2}. \quad (6)$$

При интерполяционном методе анализа необходимая выборка значений случайных величин λ_1, λ_2, ω рассчитывается при помощи соответствующего ψ-преобразования и специальных таблиц стандартных узлов типа Чебышева для любых законов распределения вероятностей случайных величин.

Для случайных величин λ_1 и λ_2 были использованы таблицы узлов типа Чебышева нормального распределения. Рабочие

узлы λ_{1k_1} и λ_{2k_2} для всевозможных индексов $k_1 = 1, 2, \ldots, q_1$, $k_2 = 1, 2, \ldots, q_2$ рассчитываются по формулам:

$$\lambda_{1k_1} = M(\lambda_1) + \sigma_{\lambda_1} x_{k_1}; \ \lambda_{1k_2} = M(\lambda_2) + \sigma_{\lambda_2} x_{k_2};$$

$$\sigma_{\lambda_1} = \sigma_{\lambda_2} = \sqrt{D_h}; \ M(\lambda_1) = M(\lambda_2) = 0,$$

где x_{k_1}, x_{k_2} — стандартные узлы Чебышева для нормального распределения.

Для случайной величины ω по указанной плотности распределения вероятностей (6) построено ψ-преобразование к равномерному закону распределения:

$$\frac{x+1}{2} = \int_{-\infty}^{\omega} \left(\frac{2A_0\alpha_0^3}{\pi(\alpha_0^2 + \omega^2)^2} + \right.$$
$$\left. + \sum_{i=1}^{N} \frac{2A_i\alpha_i\omega_{0i}^2}{\pi(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + (2\alpha_i\omega)^2} \right) d\omega. \quad (7)$$

Полученное уравнение не дает возможности выразить ω в явной форме в зависимости от x. Поэтому решение этого уравнения было сведено к численному интегрированию дифференциального уравнения

$$\frac{d\omega}{dx} = (1/2) \left(\frac{2A_0\alpha_0^3}{\pi(\alpha_0^2 + \omega^2)^2} + \right.$$
$$\left. + \sum_{i=1}^{N} \frac{2A_i\alpha_i\omega_{0i}^2}{\pi(\omega_{0i}^2 - \omega^2)^2 + (2\alpha_i\omega)^2} \right)^{-1} \quad (8)$$

при начальных условиях $x = 0$, $\omega = 0$.

В результате получены рабочие узлы ω_{k_3}, соответствующие стандартным узлам x_{k_3} ($k_3 = 1, 2, \ldots, q_3$).

Аналогично строится ψ-преобразование для случайной величины ω с плотностью распределения (6); при этом используются таблицы стандартных узлов типа Чебышева для нормального и экспоненциального законов распределения.

При расчетах для случайных величин λ_1 и λ_2 выбрано по два узла, а для случайной величины ω — пять узлов интерполирования, т. е. $q_1 = 2$, $q_2 = 2$, $q_3 = 5$; $k_1 = 1, 2$; $k_2 = 1, 2$; $k_3 = 1, 2, 3, 4, 5$. В этом случае необходимо рассчитать по 20 значений λ_{k_1}, λ_{k_2}, ω_{k_3}, $n = q_1 q_2 q_3 = 2 \cdot 2 \cdot 5 = 20$.

Такой выбор числа узлов интерполирования обеспечивает сочетание требуемой точности и минимального объема вычислений в рамках интерполяционного метода.

При программном синтезе реализаций случайных дорожных возмущений по заданной корреляционной функции (1) корреляционные коэффициенты α_i и β_i варьировались в зависимости от скорости движения машины в соответствии с выражением (3).

По разработанной методике были рассчитаны таблицы рабочих узлов типа Чебышева λ_{k_1}, λ_{k_2}, ω_{k_3} случайных величин λ_1, λ_2, ω для восьми основных фонов дорог при различных скоростях движения, что является исходным материалом для исследования динамики мобильных машин.

Итак, разработанная методика математического моделирования случайных дорожных возмущений дает точное представление случайной функции возмущения в рамках корреляционной теории при использовании всего трех случайных величин, позволяет получить более достоверную информацию о спектральном составе микрорельефа, упростить исследование динамики мобильных машин и сократить объем вычислений по сравнению с другими методами. Компьютерная модель не критична к программному средству и может быть реализована в средах, допускающих стохастическое моделирование.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Пугачев В.С.** Теория случайных функций и ее применение к задачам автоматического управления. М.: Физматгиз, 3-е изд., 1962. 883 с.

[2] **Karhunen K.** Uber lineare Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung // Ann. Acad. Sci. Fennicae. Ser. A. I. Math.-Phys. 1947. No. 37. Pp. 1—79.

[3] **Свешников А.А.** Прикладные методы теории случайных функций. М.: Наука, 1968. 463 с.

[4] **Фурунжиев Р.И.** Проектирование оптимальных виброзащитных систем. Монография. Минск: Вышейшая школа, 1971. 320 с.

[5] **Ламперти Дж.** Случайные процессы. Обзор математической теории. Киев: Вища школа, 1983. 227 с.

[6] **Чернецкий В.И.** Анализ точности нелинейных систем управления. М.: Машиностроение, 1968. 246 с.

[7] **Мищенко Т.Н., Михаличенко П.Е., Костин Н.А.** Вероятностные характеристики случайной функции напряжения на токоприемнике первого украинского электровоза ДЭ-1 // Научные журналы НТУ «ХПИ». Электротехника и электромеханика. 2003. № 2. С. 43–46.

[8] **Фурунжиев Р.И.** Автоматизированное проектирование колебательных систем. Монография. Минск: Вышейшая школа, 1977. 452 с.

[9] **Чернецкий В.И.** Математическое моделирование стохастических систем. Петрозаводск: Петрозаводский гос. ун-т, 1994. 486 с.

[10] **Перов С.Н., Скворцов Ю.В.** Представление случайных процессов с помощью неканонического разложения // Вестник Самарского государственного аэрокосмического ун-та. 2008. № 1 (14). С. 226–235.

[11] **Павлюк Ю.С., Сакулин В.Д.** Нелинейная динамика механических систем при случайном воздействии // Динамика, прочность и износостойкость машин. 1995. № 1. С. 33–43.

[12] **Росляков В.П.** Аппроксимация корреляционных функций случайных процессов в задачах динамики сельхозмашин // Механизация и электрификация социалистического сельского хозяйства. 1969. № 8. С. 15–19.

[13] **Росляков В.П.** Статистические характеристики рельефов обрабатываемых полей // Труды Курского СХИ. Воронеж. 1969. Вып. 3.

[14] **Хачатуров А.А.** Динамика системы дорога-шина-автомобиль-водитель. М.: Машиностроение, 1976. 535 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

АЛЕКСЕЕВА Татьяна Анатольевна – *кандидат физико-математических наук, доцент департамента прикладной математики и бизнес-информатики Санкт-Петербургского филиала Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики».*

190008, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. Союза Печатников, 16

tatyanalexeeva@gmail.com

Alexeeva T.A. SIMULATION OF OCCASIONAL ROAD DISTURBANCES FOR MOBILE VEHICLES DYNAMIC STUDIES.

This paper focuses on a simulation procedure of occasional road disturbances reasoning from non-canonical occasional functions analysis method in terms of determinate functions depending on only three casual quantities with any distribution law of their probabilities. A developed mathematical method for simulation of random road disturbances gives an accurate representation of the random function perturbations in the framework of the correlation theory using only three random variables. The proposed approach allows obtaining more reliable information about the spectral composition of the microrelief, simplifying studies of the mobile vehicles dynamics and reducing the computation amount as compared to other methods.

OCCASIONAL DISTURBANCE, NON-CANONICAL ANALYSIS OF OCCASIONAL FUNCTIONS, CORRELATIONAL FUNCTION, SPECTRAL DENSITY, INTERPOLATION METHOD.

REFERENCES

[1] **V.S. Pugachev,** Teoriya sluchajnykh funktsij i ee primenenie k zadacham avtomaticheskogo upravleniya [The theory of random functions and its application to problems of automatic control], Fizmatgiz, Moscow, 3rd ed., 1962.

[2] **K. Karhunen,** Uber lineare Methoden in der Wahrscheinlichkeitsrechnung, Ann. Acad. Sci. Fennicae, Ser. A. I. Math.-Phys. 37 (1947) 1–79.

[3] **A.A. Sveshnikov,** Prikladnye metody teorii sluchajnykh funktsij [Applied methods of the theory of random functions], Nauka, Moscow, 1968.

[4] **R.I. Furunzhiev,** Proektirovanie optimal'nykh vibrozashchitnykh system [Designing optimal vibration isolation systems], Vyshejshaya shkola, Minsk, 1971.

[5] **J. Lamperti,** Sluchajnye protsessy. Obzor matematicheskoj teorii [Random processes. Overview of the mathematical theory], Vishcha shkola, Kiev, 1983.

[6] **V.I. Chernetskij,** Analiz tochnosti nelinejnykh sistem upravleniya [Accuracy analysis of nonlinear control systems], Mashinostroenie, Moscow, 1968.

[7] **T.N. Mishchenko, P.E. Mikhalichenko, N.A. Kostin,** Veroyatnostnye kharakteristiki sluchajnoj funktsii napryazheniya na tokopriemnike pervogo ukrainskogo elektrovoza DE-1 [Probabilistic characteristics of a random function of voltage in the current collector of the first Ukrainian electric locomotive DE-1], Nauchnye zhurnaly NTU «KhPI». Elektrotekhnika i elektromekhanika. 2 (2003) 43–46.

[8] **R.I. Furunzhiev,** Avtomatizirovannoe proektirovanie kolebatel'nykh sistem, [Computer-aided

design of vibrating systems], Minsk: Vyshejshaya shkola, 1977.

[9] **V.I. Chernetskij,** Matematicheskoe modelirovanie stokhasticheskikh system [Mathematical modeling of stochastic systems], Petrozavodskij gos. un-t, Petrozavodsk, 1994.

[10] **S.N. Perov, Yu.V. Skvortsov,** Predstavlenie sluchajnykh protsessov s pomoshch'yu nekanonicheskogo razlozheniya [Representation of stochastic processes using non-canonical decomposition], Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo un-ta. 1 (14) (2008) 226–235.

[11] **Yu.S. Pavlyuk, V.D. Sakulin,** Nelinejnaya dinamika mekhanicheskikh sistem pri sluchajnom vozdejstvii [Nonlinear dynamics of mechanical systems at accidental exposure], Dinamika, prochnost' i iznosostojkost' mashin. 1 (1995) 33–43.

[12] **V.P. Roslyakov,** Approksimatsiya korrelyatsionnykh funktsij sluchajnykh protsessov v zadachakh dinamiki sel'khozmashin [Approximation of correlation functions of random processes in dynamics problems of agricultural machinery], Mekhanizatsiya i elektrifikatsiya sotsialisticheskogo sel'skogo khozyajstva. 8 (1969) 15–19.

[13] **V.P. Roslyakov,** Statisticheskie kharakteristiki rel'efov obrabatyvaemykh polej [Statistical characteristics of the reliefs of cultivated fields], Trudy Kurskogo SKhI, Voronezh. 3 (1969).

[14] **A.A. Khachaturov,** Dinamika sistemy doroga-shina-avtomobil'-voditel' [Dynamics of a road-tire-car-driver system], Mashinostroenie, Moscow, 1976.

THE AUTHOR

ALEXEEVA Tatiana A.
National Research University Higher School of Economics
16 Soyuza Pechatnikov St., St. Petersburg, 190008, Russian Federation
tatyanalexeeva@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.13
УДК 519.226.2-519.248

Ю.А. Пичугин

Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена

ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРОВЕРКИ СЛОЖНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ГИПОТЕЗ В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Рассмотрены геометрические аспекты задачи проверки сложной статистической гипотезы о принадлежности вектора параметров модели некоторой области. Сформулирована и доказана основополагающая теорема для решения этой задачи. Теорема утверждает, что задача решается проверкой простой статистической гипотезы относительно точки максимального правдоподобия. Рассмотрены типовые примеры применения в математическом моделировании.

ГРАНИЧНАЯ ТОЧКА МАКСИМАЛЬНОГО ПРАВДОПОДОБИЯ, ЗАДАЧА ЛАГРАНЖА, ЭЛЛИПСОИД НАДЕЖНОСТИ, ОБОБЩЕННАЯ ЕВКЛИДОВА МЕТРИКА.

Введение

Процесс построения каких-либо математических моделей реальных процессов обычно содержит два неотъемлемых этапа: спецификация и идентификация. При учете факторов стохастической природы, которые естественно возникают на этапе идентификации, состоящем, главным образом, в оценке параметров, возникает необходимость проверки статистических гипотез. Обычно эти гипотезы относятся к значениям параметров. Например, в хорошо известных моделях эконометрики проверяются, в основном, гипотезы о равенстве нулю некоторых параметров модели. Это позволяет определять целесообразность как включения анализируемых переменных в модель, так и построения самой модели. Проверка таких статистических гипотез осуществляется посредством хорошо известного аппарата математической статистики. Однако на практике исследователь нередко сталкивается с ситуацией, когда интересен вопрос о принадлежности набора параметров, рассматриваемого как точка пространства или вектор, некоторой (наперед заданной) области. В этом случае возникает задача проверки сложной многомерной статистической гипотезы.

В работе [1], опубликованной в настоящем журнале, решалась задача проверки такой сложной гипотезы, в частности, речь шла о принадлежности вектора параметров модели Вольтерры (системы двух дифференциальных уравнений) некоторой области, что позволяло делать выводы об устойчивости решения. Представленное в упомянутой публикации и в ряде других работ (например, в [2]) решение содержало в качестве обоснования лишь лаконичную ссылку на геометрические свойства нормального распределения.

С учетом важности этой проблемы для математического моделирования в целом, настоящая работа ставит целью полностью обосновать предлагаемый метод проверки сложной статистической гипотезы и сделать все необходимые уточнения.

При этом делается акцент на геометрические аспекты развития общей идеи и обоснования этого метода, а также на указанные аспекты решения различных прикладных задач математического моделирования, с тем, чтобы показать диапазон применимости рассматриваемого математического аппарата. По убеждению автора, такое представление метода должно улучшить понимание его сути и прикладного значения.

Далее везде в статье предполагается, что исходные данные подчиняются многомерному нормальному распределению.

Граничная точка максимального правдоподобия и эллипсоид надежности

Хорошо известно, что когда одномер-

ный параметр θ оценивается статистически, например, как среднее значение по некоторой выборке, и проверяется $H_0 : \theta = \theta_0$, то доверительная область есть симметричный относительно θ_0 интервал, а критическая область есть внешность или дополнение этого интервала. Ширина доверительной области определяется выбором уровня значимости α (вероятность попадания в критическую область). При этом обычно используется распределение Стьюдента, симметрия функции плотности которого и приводит к симметрии доверительной области.

Однако при достаточно большом объеме выборки можно использовать нормальное стандартное распределение $N(0, 1)$. Именно так и поступали в эпоху статистических таблиц. Обобщение этой простой идеи на многомерный случай оказывается вполне конструктивным. Действительно, предположим, что объем выборки настолько велик, что можно использовать нормальное распределение и в многомерном случае. Пусть вектор параметров

$$\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2, ..., \theta_k)^T$$

(T – знак транспонирования) размерности k оценен по выборке $\{\boldsymbol{\theta}_i, i = 1, 2, ..., n\}$.

Как известно, несмещенные оценки математического ожидания $\boldsymbol{\theta}$ и матрицы взаимных ковариаций компонент этой оценки $\boldsymbol{\theta}$, соответственно, равны

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = n^{-1}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{\theta}_i, \quad \mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}} = n^{-1}\hat{\mathbf{V}}_{\boldsymbol{\theta}}, \qquad (1)$$

где

$$\hat{\mathbf{V}}_{\boldsymbol{\theta}} = (n-1)^{-1}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{\theta}_i - \hat{\boldsymbol{\theta}})(\boldsymbol{\theta}_i - \hat{\boldsymbol{\theta}})^T.$$

При проверке простой гипотезы $H_0 : \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_0$ доверительная область ω_0^α есть часть пространства, которая имеет вероятностную меру $(1 - \alpha)$ и ограничена эллипсоидом

$$W^\alpha = \{\boldsymbol{\theta} : f(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}) = c_\alpha\},$$

т. е. $P(\mathrm{Int}\, W^\alpha) = (1 - \alpha)$.

Этот эллипсоид W^α хорошо известен в литературе как эллипсоид рассеяния, а

$$f(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}) = (2\pi)^{-k/2}[\det \mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}]^{-1/2} \times$$
$$\times \exp(-0,5(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}_0)^T \mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1}(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}_0))$$

– плотность многомерного нормального распределения $N(\boldsymbol{\theta}_0, \mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}})$ [3].

Здесь и далее предполагается, что матрица $\mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}$ – невырожденная (определение функции плотности в вырожденном случае см. в монографии [3]).

Предположим, что мы хотим проверить сложную гипотезу вида $H_G : \boldsymbol{\theta} \in G$, где G – заданная область пространства параметров, которую, не уменьшая общности, будем считать замкнутой, так как при непрерывном распределении граница ∂G есть множество вероятностной меры нуль.

Будем рассматривать H_G как объединение простых гипотез вида $H_\tau : \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_\tau$, где $\boldsymbol{\theta}_\tau \in G$. Тогда доверительная область гипотезы H_G есть объединение $\bigcup_{\boldsymbol{\theta}_\tau \in G} \omega_\tau^\alpha$ доверительных областей гипотез H_τ, т. е.

$$\omega_\tau^\alpha = \{\boldsymbol{\theta} : f(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}_\tau, \mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}) < c_\alpha\},$$

а критическая область H_G есть пересечение $\bigcap_{\boldsymbol{\theta}_\tau \in G} c\omega_\tau^\alpha$ дополнений $c\omega_\tau^\alpha$ к ω_τ^α.

Границей раздела доверительной и критической областей будет огибающая (кривая, поверхность или гиперповерхность, соответственно при $k = 2$, 3 и более) семейства эллипсоидов

$$W_\tau^\alpha = \{\boldsymbol{\theta} : f(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta}_\tau, \mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}) = c_\alpha, \boldsymbol{\theta}_\tau \in \partial G\},$$

центры которых лежат на границе ∂G.

Проверку такой сложной гипотезы в первом приближении можно осуществить по следующему алгоритму, основанному на том, что в функции плотности распределения вероятностей аргумент и параметр сдвига занимают симметричное положение относительно друг друга.

Геометрическая интерпретация этого факта состоит в следующем. Пусть два эллипсоида W_1^α и W_2^α конгруэнтны и совпадают с точностью до параллельного переноса, т. е. определяются одним набором параметров $\{\mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}, c_\alpha\}$. Тогда, если центр W_1^α лежит на W_2^α, то и центр W_2^α лежит на W_1^α. Рассмотрим множество эллипсоидов, центры которых совпадают с $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, а форма определена матрицей $\mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}$. Один из эллипсоидов этого множества W^γ соприкасается с границей ∂G в некоторой точке $\boldsymbol{\theta}_*$. Значение c_γ для этого эллипсоида будет вычис-

ляться непосредственно как правдоподобие распределения $N(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$ в найденной точке $\boldsymbol{\theta}_*$, т. е. $c_\gamma = f(\boldsymbol{\theta}_*, \hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$. Тогда, если $c_\gamma > c_\alpha$, то следовательно, $P(\mathrm{Int}\, W^\gamma) < P(\mathrm{Int}\, W^\alpha)$ и точка $\boldsymbol{\theta}_*$ попадает в доверительную область одной из гипотез $\mathrm{H}_\tau : \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_\tau$. Это означает принятие общей гипотезы $\mathrm{H}_G : \boldsymbol{\theta} \in G$. При выполнении условия $c_\gamma < c_\alpha$, наоборот, точка $\boldsymbol{\theta}_*$ не попадает в доверительную область ни одной из гипотез $\mathrm{H}_\tau : \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_\tau$ и общая гипотеза H_G отвергается.

В часто встречающейся ситуации, когда оценка $\hat{\boldsymbol{\theta}} \notin G$ и мы заинтересованы отвергнуть гипотезу H_G, вероятностная мера пространства $P(\mathrm{Int}\, W^\gamma)$, ограниченного эллипсоидом W^γ, по распределению $N(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$, есть оценка меры надежности [4, 5], поэтому сам эллипсоид W_*^γ целесообразно именовать эллипсоидом надежности.

Решение задачи нахождения точки $\boldsymbol{\theta}_*$, как хорошо известно, дается методом Лагранжа. Геометрическая интерпретация и сама суть метода состоит в том, что в точке касания нормали к соприкасающимся поверхностям W_*^γ и ∂G коллинеарны. Решение сводится к дифференцированию по всем аргументам функции Лагранжа вида [1, 2]:

$$L(\boldsymbol{\theta}, \lambda) = \ln(f(\boldsymbol{\theta}, \hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}}) - \lambda\varphi(\boldsymbol{\theta}). \qquad (2)$$

Здесь предполагается, что граница ∂G задается уравнением $\varphi(\boldsymbol{\theta}) = 0$ для некоторой гладкой функции φ. Если граница ∂G является кусочногладкой, т. е. задается некоторым набором уравнений для системы гладких функций

$$\{\varphi_j(\boldsymbol{\theta}) = 0,\ j = 1, 2, ..., J\},$$

то вместо одной задачи (2) мы будем иметь систему задач и функций Лагранжа:

$$L_j(\boldsymbol{\theta}, \lambda) = \ln(f(\boldsymbol{\theta}, \hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}}) - \lambda\varphi_j(\boldsymbol{\theta}),\quad j = 1, 2, ..., J. \qquad (3)$$

Из всех решений системы (3) выбирается значение $\boldsymbol{\theta}_*$, которое доставляет максимум правдоподобия $f(\boldsymbol{\theta}_*, \hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$. Найденная таким образом точка $\boldsymbol{\theta}_*$, очевидно, является граничной точкой максимального правдоподобия и для распределения $N(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$.

Проверка простой гипотезы относительно граничной точки максимального правдоподобия

Рассмотрим простую гипотезу $\mathrm{H}_* : \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_*$. Ее проверку можно осуществить посредством следующих статистик. Если ортогональная матрица $\mathbf{Q}$ такова, что

$$\mathbf{Q}^T\mathbf{V}_{\hat{\theta}}\mathbf{Q} = \boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_k),$$

где $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ... \geq \lambda_k$, то тогда компоненты вектора

$$\mathbf{s} = (s_1, s_2, ..., s_k)^T = \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\mathbf{Q}^T(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*) \qquad (4)$$

будут иметь в точности распределение Стьюдента с числом степеней свободы $(n - 1)$, т. е.

$$s_j \sim t_{n-1}\ (j = 1, 2, ..., k).$$

Величина

$$r = (\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)^T\mathbf{V}_{\hat{\theta}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*) \qquad (5)$$

при верной гипотезе H_* имеет распределение, которое с увеличением объема выборки n асимптотически приближается к χ-квадрат с k степенями свободы, т. е. $r \sim \chi_k^2$.

Предположим, что вектор параметров оценивается по схеме линейной регрессии

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

где $\mathbf{Y}$ — вектор-столбец измерений размерности n, $\mathbf{X}$ — $(n \times k)$-матрица, $\boldsymbol{\varepsilon}$ — вектор-столбец погрешностей измерений размерности n.

В предположении независимости и нормального распределения погрешностей регрессии

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

где $\mathbf{0}$ — нулевой вектор-столбец, $\mathbf{I}$ — единичная матрица.

Оценка методом наименьших квадратов (МНК) $\boldsymbol{\theta}$ и матрица взаимных ковариаций этой оценки, соответственно, равны [3]:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y},\quad \mathbf{V}_{\hat{\theta}} = \hat{\sigma}^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}. \qquad (6)$$

Здесь несмещенная оценка σ^2 равна

$$\hat{\sigma}^2 = (n - k)^{-1}\sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{X}_i\hat{\boldsymbol{\theta}})^2,$$

где y_i — i-я компонента, а $\mathbf{X}_i$ — i-я строка, соответственно, вектора-столбца $\mathbf{Y}$ и матрицы $\mathbf{X}$ (см. [3]).

Тогда, при условии, что гипотеза H_* верна, величина

$$q = \frac{k^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)}{(n-k)^{-1}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \mathbf{X}_i\hat{\boldsymbol{\theta}})^2} = \\ = \hat{\sigma}^{-2}k^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*) = \\ = k^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)^T\mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*) = rk^{-1} \quad (7)$$

будет иметь в точности F-распределение со степенями свободы $(k, n-k)$, т. е. $q \sim F_{k,\,n-k}$.

Для критерия Стьюдента (см. выше) в этом случае число степеней свободы равно $n - k$. Здесь следует напомнить, что среднее арифметическое (см. раздел «Граничная точка максимального правдоподобия и эллипсоид надежности») также является МНК-оценкой.

При выполнении хотя бы одного из следующих неравенств, для некоторого, заранее заданного, значения α, т. е.

$$r > \chi_k^2(\alpha); \quad (8)$$

$$q > F_{k,\,n-k}(\alpha); \quad (9)$$

$$|s_j| > t_{n-k}^{\alpha/2},\ j = 1, 2, ..., k, \quad (10)$$

где $\chi_k^2(\alpha)$, $F_{k,\,n-k}(\alpha)$ и $t_{n-k}^{\alpha/2}$ – суть критические значения соответствующих распределений (здесь используется значение α/2, так как критерий Стьюдента относится к двусторонним), гипотеза H_* отвергается.

Для полноты общей картины линейного МНК-оценивания параметров рассмотрим случай, когда многомерный параметр представляет собой не вектор, а $(m \times h)$-матрицу $\boldsymbol{\Theta}$. При этом его оценка получается из системы линейных уравнений регрессии:

$$\mathbf{Y}_l = \mathbf{X}\,\boldsymbol{\theta}_l + \boldsymbol{\varepsilon}_l,\ l = 1, 2, ..., m \quad (11)$$

(как, например, в упомянутой выше работе [1], где эта матрица параметров обозначалась B, а сами параметры – β), т. е. общее число параметров $k = m \times h$ (m – число уравнений, h – число параметров в каждом уравнении).

В работе [1] рассматривался случай $m = h = 2$, $k = 4$, однако предложенная в данной работе методика легко обобщается на произвольные значения m и h. Единственное препятствие, состоящее в возможной вырожденности вычисляемых матриц (параметров многомерных распределений), преодолевается хорошо известными приемами. Как показано в статье [1], при оценке матрицы параметров

$$\boldsymbol{\Theta} = (\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, ..., \boldsymbol{\theta}_m),$$

где $\boldsymbol{\theta}_l$ – вектор параметров l-го уравнения системы (11), $l = 1, 2, ..., m$, следует переходить к центрированным переменным, когда в матрицу параметров не входят свободные члены, а входят только коэффициенты при переменных правой части (как правило, именно они и представляют главный интерес).

Действительно, пусть $\mathbf{Y}$ имеет размерность $(n \times m)$ (матрица, составленная из левых частей системы (11), т. е.

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2, ..., \mathbf{Y}_m),$$

а $\mathbf{X}$ – $(n \times h)$, и эти матрицы центрированы на средние по выборке значения переменных.

Тогда МНК-оценка матрицы параметров равна

$$\hat{\boldsymbol{\Theta}} = (\hat{\boldsymbol{\theta}}_1, \hat{\boldsymbol{\theta}}_2, ..., \hat{\boldsymbol{\theta}}_m) = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{Y}. \quad (12)$$

Если вместо матрицы рассматривать составной вектор параметров $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}_1^T, \boldsymbol{\theta}_2^T, ..., \boldsymbol{\theta}_m^T)^T$, то матрица взаимных ковариаций $\mathbf{V}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}}$ компонент оценки этого вектора

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\boldsymbol{\theta}}_1^T, \hat{\boldsymbol{\theta}}_2^T, ..., \hat{\boldsymbol{\theta}}_m^T)^T$$

строится следующим образом.

Пусть $\mathbf{R}$ – $(m \times m)$- и $\mathbf{W}$ – $(h \times h)$-ортогональные матрицы, приводящие к диагональному виду матрицы $\mathbf{Y}^T\mathbf{Y}$ и $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$, соответственно.

Тогда, как показано в статье [1],

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

где $\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_h$ – кронекеровское произведение $\mathbf{R}$ (см. [6]) на единичную матрицу порядка h, а $\mathbf{V}_{\hat{\xi}}$ – $[(m{\cdot}h) \times (m{\cdot}h)]$-блочно-диагональная матрица следующего вида:

$$\mathbf{V}_{\hat{\xi}} = \begin{pmatrix} \hat{\delta}_1^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} & \mathbf{0} & ... \\ ... & ... & ... \\ ... & \mathbf{0} & \hat{\delta}_m^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} \end{pmatrix}.$$

Здесь, как обычно, $\mathbf{0}$ – нулевой блок,

а коэффициенты диагональных блоков $\{\hat{\delta}_1^2, \hat{\delta}_2^2, ..., \hat{\delta}_m^2\}$ есть несмещенные оценки дисперсий погрешностей регрессии $\{\delta_1^2, \delta_2^2, ..., \delta_m^2\}$ на центрированные значения $\mathbf{X}$ также центрированных (см. ниже), но независимых переменных $\mathbf{Z}_l$ ($l = 1, 2, ..., m$), выборочная $(n \times m)$-матрица для которых равна

$$\mathbf{Z} = (\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, ..., \mathbf{Z}_m) = \mathbf{YR},$$

так как $\mathbf{Z}^T\mathbf{Z} = \mathbf{R}^T\mathbf{Y}^T\mathbf{YR}$ – диагональная матрица (см. выше).

Из структуры $\mathbf{V}_{\hat{\theta}}$ следует, что ортогональная матрица $\mathbf{Q}$, приводящая $\mathbf{V}_{\hat{\theta}}$ к диагональному виду, равна

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_h)(\mathbf{I}_m \otimes \mathbf{W}).$$

При этом имеет место следующее, легко проверяемое, соотношение:

$$(\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_h)(\mathbf{I}_m \otimes \mathbf{W}) = \mathbf{R} \otimes \mathbf{W} = \\ = (\mathbf{I}_m \otimes \mathbf{W})(\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_h),$$

означающее, что порядок перехода к независимым регрессорам и независимым компонентам отклика, когда $\mathbf{V}_{\hat{\theta}}$ принимает диагональный вид, не имеет принципиального значения.

Имея МНК-оценку

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\boldsymbol{\theta}}_1^T, \hat{\boldsymbol{\theta}}_2^T, ..., \hat{\boldsymbol{\theta}}_m^T)^T$$

и матрицу взаимных ковариаций $\mathbf{V}_{\hat{\theta}}$ компонент этого вектора, находим граничную точку максимального правдоподобия

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

для распределения $N(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$.

При этом для проверки H_* также получаются χ^2- и t-статистики вида (5) и (4) (т. е. величины r и $\mathbf{s}$). В работе [1] вместо общей F-статистики вида (7) (т. е. q) было предложено использование m F-статистик для каждого l-го уравнения ($l = 1, 2, ..., m$):

$$q_l = \frac{(h)^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_l - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{*l})^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})(\hat{\boldsymbol{\theta}}_l - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{*l})}{(n-h-1)^{-1}\sum_{i=1}^n (y_{l,i} - \mathbf{X}_i\hat{\boldsymbol{\theta}}_l)^2} = \\ = \hat{\sigma}_l^{-2}h^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_l - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{*l})^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})(\hat{\boldsymbol{\theta}}_l - \hat{\boldsymbol{\theta}}_{*l}), \quad (13)$$

которые, при верной гипотезе H_*, имеют распределение $F_{h,n-h-1}$ (здесь число степеней свободы не $(n - h)$, а $(n - h - 1)$, так как учитывается центрирование, приводящее к «исчезновению» свободного члена).

Однако следует заметить, что только при определенном условии, а именно при верной и легко проверяемой гипотезе

$$\mathrm{H}_0 : \delta_1^2 = \delta_2^2 = ... = \delta_m^2,$$

которая эквивалентна гипотезе для дисперсий погрешностей системы (11):

$$\mathrm{H}_0' : \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = ... = \sigma_m^2,$$

выполняется весьма важное соотношение:

$$r = (\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)^T\mathbf{V}_{\hat{\theta}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*) = h\sum_{l=1}^m q_l. \quad (14)$$

В противном случае в качестве q_l следует брать статистики

$$q_l = \frac{(h)^{-1}(\hat{\xi}_l - \xi_{*l})^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})(\hat{\xi}_l - \xi_{*l})}{(n-h-1)^{-1}\sum_{i=1}^n (z_{l,i} - \mathbf{X}_i\hat{\xi}_l)^2} = \\ = \hat{\delta}_l^{-2}h^{-1}(\hat{\xi}_l - \xi_{*l})^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})(\hat{\xi}_l - \xi_{*l}), \quad (15)$$

где

$$\hat{\xi} = (\hat{\xi}_1^T, \hat{\xi}_2^T, ..., \hat{\xi}_m^T)^T = (\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_h)^T\hat{\boldsymbol{\theta}},$$

$$\xi_* = (\xi_{*1}^T, \xi_{*2}^T, ..., \xi_{*m}^T)^T = (\mathbf{R} \otimes \mathbf{I}_h)^T\boldsymbol{\theta}_*.$$

Тогда условие (14) будет выполнено, т. е.

$$r = (\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)^T\mathbf{V}_{\hat{\theta}}^{-1}(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*) = h\sum_{l=1}^m q_l = \\ = (\hat{\xi} - \xi_*)^T\mathbf{V}_{\hat{\xi}}^{-1}(\hat{\xi} - \xi_*), \quad (16)$$

так как столбцы $\{\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2, ..., \mathbf{Z}_m\}$ матрицы $\mathbf{Z}$ не коррелируют между собой, а матрица взаимных ковариаций параметров регрессии для этих переменных $\mathbf{V}_{\hat{\xi}}$ имеет блочно-диагональную структуру (см. выше).

При верной гипотезе H_0 выражения (13) и (15) совпадают. Условие (14) (или (16)) является весьма существенным уточнением результатов работы [1].

При выполнении хотя бы одного из неравенств

$$q_l > F_{k,n-h-1}(\alpha) \quad (17)$$

для каждого l-го уравнения ($l = 1, 2, ..., m$) гипотеза H_* отвергается.

Обобщенная евклидова метрика и основная теорема

Теперь, когда выяснен алгоритм нахождения граничной точки максимального правдоподобия $\boldsymbol{\theta}_*$ и проверки простой гипотезы $\mathrm{H}_*: \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_*$, придадим задаче проверки сложной гипотезы $\mathrm{H}_G: \boldsymbol{\theta} \in G$ совершенно

строгий доказательный вид, отличный от предложенного в разделе «Граничная точка максимального правдоподобия и эллипсоид надежности». При этом мы не будем делать никаких существенных предположений относительно объема выборки *n*. Для всех рассмотренных выше оценок имеет место следующая теорема.

Теорема. *Пусть* $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ (*линейная МНК-оценка вектора параметров* $\boldsymbol{\theta}$) *не принадлежит замкнутой области G, и* $\mathbf{V}_{\hat{\theta}}$ *– матрица взаимных ковариаций компонент этой оценки.*

Тогда, если для граничной точки максимального правдоподобия $\boldsymbol{\theta}_*$ ($\boldsymbol{\theta}_* \in \partial G$) *по распределению* $N(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$ *на некотором уровне значимости* α *гипотеза* $\mathrm{H}_*: \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_*$ *отвергается по какому-либо критерию (*χ^2*, t или F), то и для любой другой точки* $\boldsymbol{\theta}_\tau \in G$ *на этом же уровне значимости* α *отвергается гипотеза* $\mathrm{H}_\tau: \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_\tau$*, а, следовательно, отвергается гипотеза* $\mathrm{H}_G: \boldsymbol{\theta} \in G$.

Доказательство. Введем в вещественном *k*-мерном пространстве R^k обобщенную евклидову метрику [7, 8]:

$$\mathrm{d}_2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sqrt{(\mathbf{u}-\mathbf{v})^T \mathbf{V}_{\hat{\theta}}^{-1} (\mathbf{u}-\mathbf{v})} \qquad (18)$$

($\mathbf{u}, \mathbf{v} \in R^k$), порожденную распределением $N(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$.

Напомним, что метризовать R^k мы можем посредством любой невырожденной, положительно определенной, симметричной матрицы **A**. Если определить скалярное произведение векторов по формуле

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{v},$$

то норма (длина) вектора, а также расстояние и угол между векторами определяются соответственно следующими формулами:

$$\|\mathbf{u}\|_2 = \sqrt{\mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{u}};$$

$$\mathrm{d}_2(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sqrt{(\mathbf{u}-\mathbf{v})^T \mathbf{A} (\mathbf{u}-\mathbf{v})};$$

$$\varphi = \arccos(\mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{v} / (\|\mathbf{u}\|_2 \cdot \|\mathbf{v}\|_2)).$$

Если матрица **A** не является положительно определенной (среди собственных значений есть отрицательные), то введенная посредством **A** метрика (типа d_2) называется индефинитной [7]. Тот факт, что невырожденная матрица $\mathbf{V}_{\hat{\theta}}$, как и обратная к ней, положительно определены, хорошо известен. Здесь как раз и рассматривается невырожденный случай.

Очевидно, что граничная точка $\boldsymbol{\theta}_*$ максимального правдоподобия является ближайшей из всех точек области *G*, включая границу, в метрике (18) к точке $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ (к полученной оценке вектора параметров по (1), (6), (12)). Следовательно, при выполнении неравенства (8) для $\boldsymbol{\theta}_*$, это неравенство будет выполняться и для любой другой точки $\boldsymbol{\theta}_\tau \in G$. То же самое утверждение справедливо и для неравенства (9), использующего *F*-тест, так как в этом случае (оценка по одному уравнению регрессии) мы имеем дело с эквивалентной метрикой

$$\mathrm{d}_2'(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = k^{-1/2} \mathrm{d}_2(\mathbf{u}, \mathbf{v})$$

(см. неравенство (9)).

Из равенства (4) непосредственно вытекает соотношение

$$\mathrm{d}_2(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta}_*) = \sqrt{(\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)^T \mathbf{V}_{\hat{\theta}}^{-1} (\hat{\boldsymbol{\theta}} - \boldsymbol{\theta}_*)} = \sqrt{\sum_{j=1}^{k} s_j^2}, \quad (19)$$

которое в свою очередь означает, что использование стьюдентовских статистик, с геометрической точки зрения, есть переход к обобщенной метрике

$$\mathrm{d}_\infty(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta}_*) = \max_{j \in \{1,2,\ldots k\}} |s_j| \cdot$$

Эта метрика совпадает с обычной метрикой d_∞ (максимум модуля компоненты) в пространстве, подвергнутом линейному пребразованию с матрицей оператора $\mathbf{\Lambda}^{-1/2}\mathbf{Q}^T$, которое, как всякое линейное преобразование, является аффинным, т. е. сохраняет все метрические соотношения. Следовательно, при выполнении какого-либо из неравенств (10) для $\boldsymbol{\theta}_*$ это неравенство будет выполняться и для любой другой точки $\boldsymbol{\theta}_\tau$ из области *G*.

Осталось рассмотреть случай применения статистик (13) и (15), когда параметры оцениваются по системе регрессионных уравнений, так как использование в этом случае статистик (5) и (4) (т. е. величин *r* и **s**) ничем принципиально не отличается от случая оценивания параметров как средних по выборке или по схеме одного уравнения линейной регрессии.

Представим пространство R^k в виде декартова произведения *m* подпространств размерности *h*, т. е.

$$R^k = R^h \underset{m \text{ сомножителей}}{\times} R^h \times \ldots \times R^h,$$

и в каждом подпространстве R^h введем следующую метрику.

Пусть

$$\tilde{\mathrm{d}}_{2,l}(\mathbf{g}, \mathbf{h}) = \sqrt{(\mathbf{g} - \mathbf{h})^T \mathbf{V}_l^{-1} (\mathbf{g} - \mathbf{h})},$$
$$(\mathbf{g}, \mathbf{h} \in R^h),$$

где

$$\mathbf{V}_l = \hat{\delta}_l^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1},$$
$$\hat{\delta}_l^2 = (n - h - 1)^{-1} \sum_{i=1}^n (z_{l,i} - \mathbf{X}_i \hat{\xi}_l)^2,$$

$\mathbf{X}_i$ – i-я строка центрированной матрицы $\mathbf{X}$.

Тогда

$$\mathrm{d}_{2,l}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_l, \boldsymbol{\theta}_{*l}) = \tilde{\mathrm{d}}_{2,l}(\hat{\boldsymbol{\xi}}_l, \boldsymbol{\xi}_{*l}) = \sqrt{h \cdot q_l}.$$

Последнее означает, как это следует из равенств (16), что аналогично равенству (19) выполняется и равенство

$$\mathrm{d}_2(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\theta}_*) = \sqrt{\sum_{l=1}^m \mathrm{d}_{2,l}^2(\hat{\boldsymbol{\theta}}_l, \boldsymbol{\theta}_{*l})}. \qquad (20)$$

Теперь, если в R^k ввести метрику

$$\mathrm{d}_{\infty(k/h)}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \max_{l \in \{1,2,\ldots,m\}} \mathrm{d}_{2,l}(\mathbf{u}_l, \mathbf{v}_l),$$

то из равенства (20) следует, что эта метрика так же, как и метрика $\mathrm{d}_\infty(\mathbf{u}, \mathbf{v})$, будет эквивалентна метрике $\mathrm{d}_2(\mathbf{u}, \mathbf{v})$.

Иными словами, метрика $\mathrm{d}_{\infty(k/h)}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ играет роль $\mathrm{d}_\infty(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ в метрическом факторпространстве размерности m ($R^k / R^h \cong R^m$), подвергнутом, за исключением случая верной гипотезы H_0, ортогональному, т. е. изометрическому, преобразованию с матрицей оператора $\mathbf{R}^T$. Вполне очевидно, что выполнение какого-либо из неравенств (17) для $\boldsymbol{\theta}_*$ влечет за собой непременное выполнение этого неравенства и для любой другой точки $\boldsymbol{\theta}_\tau$ из области G.

Таким образом, теорема доказана.

Примеры применения методики в различных областях математического моделирования

Рассматривая примеры применения разработанной методики проверки сложной многомерной гипотезы, мы для вектора параметров $\boldsymbol{\theta}$ иногда будем использовать и другие обозначения, соответствующие принятым в рассматриваемой предметной области. Остальные обозначения, по возможности, будем сохранять неизменными. Начнем с рассмотрения задач математической экономики.

Оценка экономической состоятельности предприятий по модели Альтмана. Оценка осуществляется сравнением значения линейной формы

$$\varphi(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

от выбранных Э. Альтманом экономических показателей [9], образующих вектор $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_5)^T$ размерности $k = 5$, с двумя значениями φ_C и φ_R ($\varphi_C > \varphi_R$). Коэффициенты $\varphi(\mathbf{x})$, образующие вектор (вектор Альтмана) $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \ldots, c_5)^T$, как и значения φ_C и φ_R, определяются статистическими методами. Вектор $\mathbf{c}$ есть нормаль к гиперплоскости, которая минимизирует сумму квадратов отклонений по данным экономически стабильных предприятий. При условии $\varphi(\mathbf{x}) > \varphi_C$ предприятие считается успешным (принадлежащим области стабильности G_C), а при $\varphi(\mathbf{x}) < \varphi_R$ – несостоятельным (принадлежащим области банкротства G_R). Двойное неравенство

$$\varphi_C \geq \varphi(\mathbf{x}) \geq \varphi_C$$

трактуется как неопределенность (область неопределенности G_N).

Пусть по выборке данных показателей какого-либо стабильного предприятия $\{\mathbf{x}_i, i = 1, 2, \ldots, n\}$ получены оценки

$$\bar{\mathbf{x}} = n^{-1} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i, \quad \mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}} = n^{-1} \hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}},$$

где $\hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}} = (n-1)^{-1} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T$.

Тогда, решив задачу Лагранжа для

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = \ln(f(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}}, \mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}}) - \lambda(\mathbf{c}^T \mathbf{x} - \varphi_C),$$

найдем точку максимального правдоподобия на граничной плоскости $\varphi(\mathbf{x}) = \varphi_C$.

Решение для этого случая имеет достаточно простой вид:

$$\mathbf{x}_C = \bar{\mathbf{x}} + \lambda \mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}} \mathbf{c}, \quad \lambda = (\varphi_C - \mathbf{c}^T \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{c}^T \mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}} \mathbf{c})^{-1}. \quad (21)$$

Используя в решении (21) значение φ_R, получаем точку $\mathbf{x}_R$. Как было отмечено в конце раздела «Граничная точка...», полученные значения не изменятся, если заме-

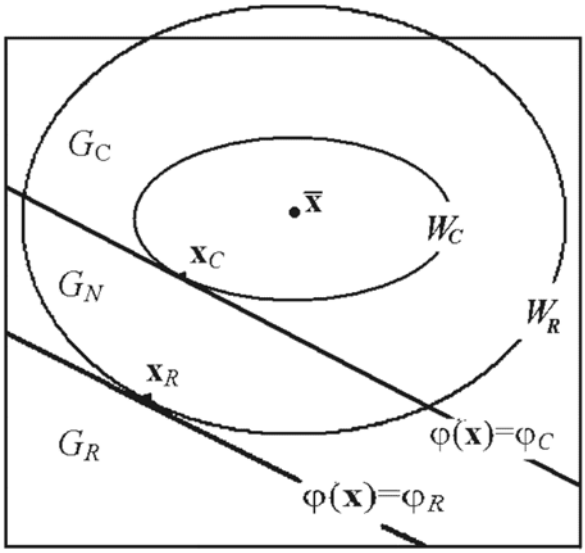


Рис. 1. Схема модели Альтмана для оценки экономической состоятельности предприятий: W_C – эллипсоид надежности; W_R – эллипсоид риска; G_C, G_N, G_R – области успешности, неопределенности и банкротства соответственно (остальные обозначения даны в тексте)

нить в (21) $\mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}}$ на $\hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}}$. Более того, для эллипсоида надежности имеют место равенства

$$W_C = \{\mathbf{x} : f(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}}, \mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}}) = f(\mathbf{x}_C, \bar{\mathbf{x}}, \mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}})\} =$$
$$= \{\mathbf{x} : f(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}}) = f(\mathbf{x}_C, \bar{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}})\},$$

как и для эллипсоида риска, определяемого точкой $\mathbf{x}_R$ (рис. 1).

Очевидно, что экономист предпочтет оценивать вероятностную меру надежности предприятия $P(\mathrm{Int}\, W_C)$ или меру риска $1 - P(\mathrm{Int}\, W_R)$ по распределению вектора самих показателей $\mathbf{x} \sim N(\bar{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}})$, а не по распределению оценки вектора его средних значений $\bar{\mathbf{x}}$ (с матрицей взаимных ковариаций $\mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}}$), так как последнее было бы с его точки зрения легкомысленным благодушием (если учесть, что область допустимых значений ограничена, эти величины можно вычислять в терминах условной вероятности). Аналогично дело обстоит с гипотезами потери стабильности и банкротства. Экономиста вряд ли будет интересовать формулировка этих гипотез в терминах математических ожиданий, т. е. H_N:$\mathrm{E}\mathbf{x} \notin G_C$ и H_R:$\mathrm{E}\mathbf{x} \in G_R$, соответственно. В последнем случае величины $\mathbf{x}_C - \bar{\mathbf{x}}$ и $\mathbf{x}_R - \bar{\mathbf{x}}$, соответственно, анализировались бы переходом к распределениям t_{n-1} или χ^2_5 (поскольку рассмотрено пять показателей, (см. выше)), от распределения $N(\bar{\mathbf{x}}, \mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}})$. Это означает, что при вычислении соответствующих статистик использовалась бы матрица $\mathbf{V}_{\bar{\mathbf{x}}}$ (см. формулы (4) и (5)). Однако, если учесть вышеизложенное, то следует использовать матрицу $\hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}}$. Иными словами, проверяется не возможность попадания средних значений экономических показателей в опасную область, а возможность попадания в опасную область текущих значений этих показателей.

При этом наши статистики уменьшаются, по сравнению с вышеуказанным случаем, на величины $\sqrt{n}$ и n, соответственно. Именно этот момент, собственно, и уменьшает излишнее благодушие. Гипотезы H_N:$\mathbf{x} \notin G_C$ и H_R:$\mathbf{x} \in G_R$ следует интерпретировать как случаи неизбежной, хоть и случайной потери стабильности и банкротства.

Относительно альтмановской модели можно сделать следующие замечания.

Замечание 1. Если по всей совокупности стабильных предприятий оценены параметры распределения $\mathbf{x} \sim N(\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}}, \mathbf{V}_{\mathbf{x}})$ то $\mathbf{c} = \mathbf{P}_5$, где $\mathbf{P}_5$ – последний столбец ортогональной матрицы $\mathbf{P}$, такой, что

$$\mathbf{P}^T\mathbf{V}_{\mathbf{x}}\mathbf{P} = \mathrm{diag}(d_1, d_2, ..., d_5)$$

и $d_1 \geq d_2 \geq .... \geq d_5$.

Действительно, сумма квадратов отклонений всех значений $\mathbf{x}$ от гиперплоскости $\mathbf{c}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} = \mathbf{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}}$ минимальна и равна $(N - 1)d_5$, где N – объем всей выборки стабильных предприятий, по которой производилась оценка параметров распределения $N(\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}}, \mathbf{V}_{\mathbf{x}})$. Кроме того, если определен уровень доверия $(1 - \alpha)$ области стабильности, то

$$\varphi_C = \mathbf{c}^T\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}} - (d_5)^{1/2} t^{\alpha/2}_{N-1},$$

а для значения φ_R уровень доверия (т. е. $t^{\alpha/2}_{N-1}$) берется предельно допустимым.

Следует отметить, что минимальное собственное значение d_5, с одной стороны, должно быть отлично от нуля (требование невырожденности или независимости показателей), а с другой стороны, оно должно быть относительно мало (существенно

меньше $\mathrm{tr}\mathbf{V}_{\mathbf{x}}/5$, где tr – след матрицы). Последнее означает, что эллипсоиды рассеяния распределения $N(\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}}, \mathbf{V}_{\mathbf{x}})$ должны быть сжатыми в направлении вектора $\mathbf{P}_5$, иначе модель Альтмана не имеет смысла.

Замечание 2. При оцененном распределении $\mathbf{x} \sim N(\boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}}, \mathbf{V}_{\mathbf{x}})$ можно рассматривать не плоскости, а эллиптические поверхности, задаваемые как

$$W_C^{\alpha} = \{\mathbf{x} : f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}}, \mathbf{V}_{\mathbf{x}}) = c_{\alpha}\}$$

или

$$W_C^{\alpha} = \{\mathbf{x} : (\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}})^T \mathbf{V}_{\mathbf{x}}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}}) = g_{\alpha}\},$$

где g_{α}, (так же, как и c_{α}) зависит от выбора уровня доверия $1 - \alpha$, так что

$$P(\mathrm{Int}\, W_C^{\alpha}) = 1 - \alpha$$

(W_R^{α} определяется аналогично, см. замечание 1).

При оценке отдельного предприятия функция Лагранжа примет вид

$$L(\mathbf{x}, \lambda) = (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}})^T \hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}}^{-1} (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}) -$$
$$- \lambda((\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}})^T \mathbf{V}_{\mathbf{x}}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\theta}_{\mathbf{x}}) - g_{\alpha}).$$

Замечание 3. Используя вектор $\mathbf{c} = \mathbf{P}_5$, можно ввести безразмерные показатели [10] относительной вариабельности

$$V_A = \{\mathbf{c}^T \hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}} \mathbf{c} (\mathbf{c}^T \mathbf{c})^{-1}\} / \mathrm{tr}\hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}}$$

и относительной стабильности

$$S_A = 1 - \{\mathbf{c}^T \hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}} \mathbf{c} (\mathbf{c}^T \mathbf{c})^{-1}\} / \lambda_1,$$

где λ_1 – наибольшее собственное значение матрицы $\hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}}$.

Показатель относительной вариабельности V_A есть отношение дисперсии в направлении вектора $\mathbf{c}$ к общей дисперсии (т. е. V_A определяет долю дисперсии в опасном направлении).

Показатель относительной стабильности S_A приближается к единице, когда дисперсия в направлении вектора $\mathbf{c}$ мала, по сравнению с дисперсией первой главной компоненты (к направлению максимальной дисперсии), и близок к нулю в противоположном случае. Ситуация $S_A \approx 0$ может иметь место, когда направление первой главной компоненты близко к направлению вектора $\mathbf{c}$ (существенные колебания в опасном направлении), или из-за того, что все собственные значения $\hat{\mathbf{V}}_{\mathbf{x}}$ мало различаются между собой (хаотичные колебания).

Здесь мы рассмотрели случай непосредственной оценки параметров распределения. Перейдем к рассмотрению примеров оценки параметров по регрессионной схеме.

Оценка параметров производственной функции. Указанная функция имеет вид

$$Y = aK^{\alpha_1} L^{\alpha_2},$$

где K – капиталовложения (фонды); L – людские ресурсы (труд); Y – выпуск, который осуществляется по данным наблюдений посредством перехода к уравнению линейной регрессии для логарифмов:

$$\ln Y_i = \ln a + \alpha_1 \ln K_i + \alpha_2 \ln L_i + \varepsilon_i \quad (i = 1, 2, \ldots, n). \tag{22}$$

Экономисты имеют твердое убеждение, что истинные значения параметров α_1 и α_2 удовлетворяют соотношению

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

т. е. в плоскости с координатами (α_1, α_2) они лежат на прямой (23).

Это убеждение они, как правило, выражают записью производственной функции в виде

$$Y = aK^{\alpha} L^{1-\alpha}.$$

Однако на практике нередко бывает так, что полученные МНК-оценки удовлетворяют неравенству $\hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2 < 1$. В этом случае в качестве окончательного результата в экономике принято брать значения [11]:

$$\alpha_1^e = \frac{\hat{\alpha}_1}{\hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2}, \quad \alpha_2^e = \frac{\hat{\alpha}_2}{\hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2},$$

которые на координатной плоскости (α_1, α_2) соответствуют точке пересечения прямой, проходящей через начало координат (0; 0) и точку $(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2)$, с прямой (23).

Полученная таким образом точка (вектор)

$$\boldsymbol{\alpha}^e = (\alpha^e{}_1, \alpha^e{}_2)^T$$

является центральной проекцией из начала координат.

Если из точки $(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2)$ опускать перпендикуляр на прямую (23) (ортогональная проекция), то получается точка

$$\boldsymbol{\alpha}^o = (\alpha^o{}_1, \alpha^o{}_2)^T$$

с координатами

$$\alpha_1^o = \frac{1+\hat{\alpha}_1-\hat{\alpha}_2}{2}, \quad \alpha_2^o = \frac{1+\hat{\alpha}_2-\hat{\alpha}_1}{2}.$$

В регрессионной модели (22) удобно перейти к центрированным значениям, когда член $\ln a$ отсутствует, что позволяет непосредственно получить (2×2)-матрицу $\mathbf{V}_{\hat{\alpha}}$ вектора МНК-оценок $\hat{\boldsymbol{\alpha}} = (\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2)^T$. В противном случае эта матрица представляла бы правый нижний блок аналогичной матрицы размера (3×3) для вектора

$$(\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1\ \hat{\alpha}_2)^T, \quad \alpha_0 = \ln a.$$

Если элементы матрицы $\mathbf{V}_{\hat{\alpha}}$ обозначить $v_{i,j}$ ($i = 1, 2$; $j = 1, 2$), то для координат граничной точки максимального правдоподобия, лежащей на прямой (23), из решения (21) получаются следующие удобные формулы:

$$\alpha_1^* = \hat{\alpha}_1 + \lambda(v_{1,1} + v_{1,2}),$$

$$\alpha_2^* = \hat{\alpha}_2 + \lambda(v_{2,1} + v_{2,2}),$$

$$\lambda = \frac{1-\hat{\alpha}_1-\hat{\alpha}_2}{v_{1,1}+v_{1,2}+v_{2,1}+v_{2,2}}.$$

В этой задаче мы столкнулись с ситуацией, когда при проверке гипотезы H_G: $\alpha \in G$ область G совпадает со своей границей $G = \partial G$, так как G — это прямая (23).

Конкретный пример. В табл. 1 приведены значения индексов выпуска, фондов и труда в СССР за период 1958 — 1990 гг.

В табл. 2 представлены результаты, полученные по данным табл. 1; графически они приведены на рис. 2.

Как видно из табл. 2, точки, полученные методами проектирования, не проходят статистическую проверку, т. е. отвергаются гипотезы H_e:$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}^e$ и H_0:$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}^o$ при $\alpha = 0{,}05$. Однако для точки максимального правдоподобия ни одно из неравенств (8), (9) и (10) не выполняется, а, следовательно, гипотеза H_*:$\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}^*$ принимается. Таким образом, условие (23) оказывается выполненным. При $\alpha = 0{,}01$ все остается на своих местах.

Такой, несколько неожиданный результат объясняется тем, что матрица $\mathbf{V}_{\hat{\alpha}}$ близка к вырожденной (т. е. и распределение вектора $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ близко к вырожденному). На это указывают величины собственных значе-

Таблица 1

Индексы выпуска, фондов и труда в СССР за период 1958 — 1990 гг. [12]

Год	Y	K	L
1958	43,20	30,83	61,97
1959	46,45	33,94	64,19
1960	50,17	38,10	68,74
1961	53,59	41,59	73,06
1962	56,63	44,97	75,72
1963	58,90	49,79	78,16
1964	64,38	54,31	81,26
1965	68,81	60,16	85,25
1966	74,39	68,11	88,36
1967	80,85	78,00	91,24
1968	87,55	86,68	94,35
1969	91,68	93,01	97,45
1970	100,00	100,00	100,00
1971	105,65	107,84	102,88
1972	109,81	116,64	105,54
1973	119,62	125,98	108,09
1974	125,98	135,32	110,64
1975	131,73	145,69	113,30
1976	139,48	156,78	115,52
1977	145,81	167,69	117,96
1978	153,32	179,45	120,40
1979	157,10	191,56	122,62
1980	164,82	203,74	124,72
1981	173,55	216,58	126,39
1982	186,64	230,20	127,72
1983	195,43	244,73	128,71
1984	203,11	259,80	129,49
1985	206,29	274,32	130,60
1986	211,03	288,73	131,37
1987	214,41	303,50	131,49
1988	223,85	318,14	129,93
1989	229,43	333,94	127,94
1990	220,26	349,49	125,17

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

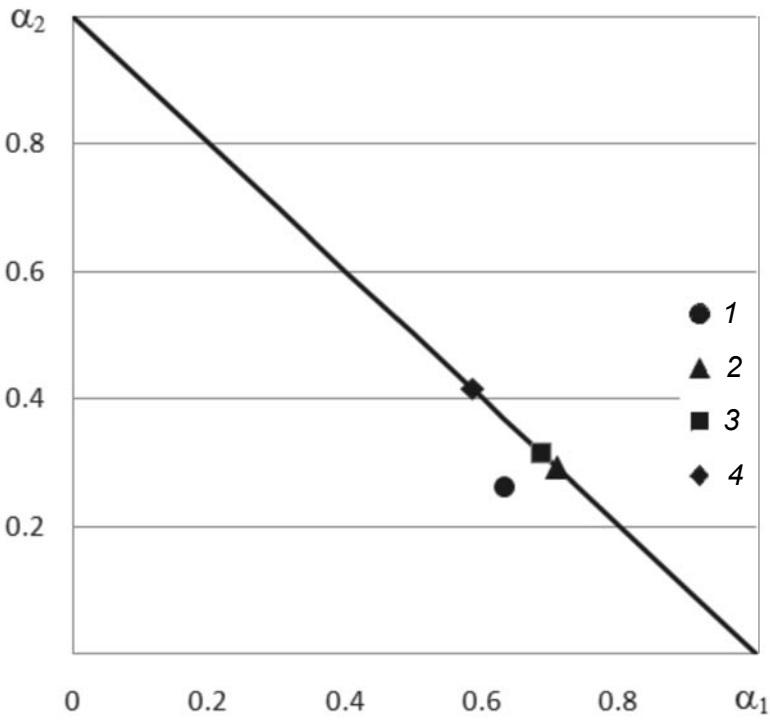


Рис. 2. Значения параметров производственной функции по данным табл. 1:
1 – МНК-оценка; *2*, *3* – центральная и ортогональная проекции;
4 – точка максимального правдоподобия

Таблица 2

Результаты обработки данных табл. 1

Параметр производственной функции	Значение показателя					
	α_1	α_2	r	q	$\lvert s_1\rvert$	$\lvert s_2\rvert$
МНК-оценка (n = 33)	0,63	0,26	–	–	–	–
Центральная проекция	0,71	0,29	252,86	126,43	0,08	15,9
Ортогональная проекция	0,69	0,31	169,83	84,91	0,39	13,03
Точка максимального правдоподобия	0,58	0,42	3,07	1,53	1,74	0,18
Для $\alpha = 0{,}05$ $\chi_2^2(\alpha) = 5{,}99$, $F_{2,30}(\alpha) = 3{,}32$, $t_{30}^{\alpha/2} = 2{,}36$						

ний этой матрицы, которые отличаются на два порядка: $\lambda_1 = 8{,}62 \cdot 10^{-3}$; $\lambda_2 = 2{,}7 \cdot 10^{-5}$, а, следовательно, оси эллипсоида рассеяния (или надежности, см. раздел «Граничная точка...») отличаются на порядок. Поэтому направленный отрезок ($\hat{\boldsymbol{\alpha}} \to \boldsymbol{\alpha}^*$), имеющий координаты (–0,046; 0,155), почти коллинеарен первому собственному вектору матрицы $\mathbf{V}_{\hat{\alpha}}$ (направлению максимальной дисперсии, т. е. первому столбцу **Q**, (см. формулу (4)), который имеет координаты (–0,294; 0,956).

Задача космической безопасности. Одна из таких задач состоит в оценке вероятности схода с орбиты космического объекта, каковыми являются спутники связи, спутники навигации и прочие. Рассмотрим в первом приближении самую простую модель движения космического объекта. Будем предполагать, в соответствии с законами Кеплера, что орбита является эллиптической и лежит в плоскости, проходящей через центр массы Земли, с которым совпадает один из фокусов эллипса орбиты. В этом случае она может быть описана в стандартных полярных координатах (ρ, φ) уравнением вида [13]

$$1 / \rho = \theta_0 + \theta_1 \cos\varphi + \theta_2 \sin\varphi.$$

Параметры орбиты образуют трехмерный вектор $\boldsymbol{\theta} = (\theta_0, \theta_1, \theta_2)^T$. Орбита, которая не пересекает и даже не касается сферы определенного радиуса R_G ($R_G > R_0$, R_0 — радиус Земли), будет считаться безопасной.

Предположим, что по выборке инструментальных наблюдений $\{(\rho_i, \varphi_i),\ i = 1, 2, \ldots, n\}$ и формулам (6) получена оценка вектора параметров орбиты $\hat{\boldsymbol{\theta}} = (\hat{\theta}_0, \hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2)^T$ и матрица взаимных ковариаций этой оценки $\mathbf{V}_{\hat{\theta}}$. В данном случае элементы регрессионной модели $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ таковы: вектор $\mathbf{Y}$ имеет размерность n, $\mathbf{X}$ — $(n \times 3)$-матрица, а компоненты вычисляются по формулам

$$y_i = 1/\rho_i,\ x_{i1} = 1,\ x_{i2} = \cos\varphi_i,$$
$$x_{i3} = \sin\varphi_i\ (i = 1, 2, \ldots, n),$$

соответственно.

Далее по формуле (21) находим граничную точку максимального правдоподобия $\boldsymbol{\theta}_*$ для распределения $N(\hat{\boldsymbol{\theta}}, \mathbf{V}_{\hat{\theta}})$. В этом случае формулы, как и в приведенных выше примерах, имеют простой, но принципиально отличный, зависящий от φ вид:

$$\boldsymbol{\theta}_*(\varphi) = \hat{\boldsymbol{\theta}} + \lambda \mathbf{V}_{\hat{\theta}} \mathbf{c}(\varphi),$$
$$\lambda = (c_G - \mathbf{c}(\varphi)^T \hat{\boldsymbol{\theta}})(\mathbf{c}(\varphi)^T \mathbf{V}_{\hat{\theta}} \mathbf{c}(\varphi))^{-1}, \qquad (24)$$

так как граница ∂G задается условием

$$\mathbf{c}(\varphi)^T \boldsymbol{\theta} = c_G,$$

где $\mathbf{c}(\varphi) = (1, \cos\varphi, \sin\varphi)^T$, $c_G = R_G^{-1}$.

Имея значения $\boldsymbol{\theta}_*(\varphi)$, можно вычислять эллипсоид надежности (см. раздел «Граничная точка...») и таким образом оценивать безопасность объекта в вероятностном смысле, или проверять гипотезу катастрофической ситуации

$$\mathrm{H}_G : \mathbf{c}(\varphi)^T \boldsymbol{\theta} \geq c_G.$$

При этом (при верной гипотезе H_G) мы имеем полный набор статистик (4), (5) и (7):

$$s_j \sim t_{n-3}\ (j = 1, 2, 3),\ r \sim \chi_3^2,\ q \sim F_{3,n-3}.$$

Зависимость точки $\boldsymbol{\theta}_*(\varphi)$ (24) от угловой координаты φ дает возможность определить момент наступления опасной ситуации. Наконец, напомним, что здесь показана лишь общая идея решения задачи, в то же самое время предполагается, что данное решение незначительно изменится, если усложнить модель учетом всех необходимых и существенных факторов.

Завершая краткий обзор задач, в которых может быть использован рассмотренный здесь метод проверки сложных многомерных статистических гипотез, отметим в самых общих чертах еще два достаточно важных направления.

Задача проектирования машин и механизмов. В указанной задаче при проведении серии испытаний экспериментального образца получаем выборку вектора замеренных параметров и соответствующие статистические оценки. Это позволяет оценить надежность соответствия образца техническим требованиям, выражающимся в принадлежности вектора его параметров некоторой области. Когда параметры измеряются непосредственно, не по схеме линейной регрессии, а оценки даются осреднением, задача отличается от модели Альтмана лишь тем, что границы области требуемых значений параметров определяются самой задачей, для решения которой и предназначен проектируемый механизм.

Математическое моделирование реальных процессов. Как было отмечено во введении, применение дифференциальных уравнений сталкивается с проблемой оценки параметров по данным наблюдений за моделируемым процессом. При этом возникает вопрос о принадлежности истинных значений вектора параметров той или иной

области, определяющей поведение системы, например, о принадлежности области устойчивости решения. Примером здесь может служить не раз упомянутая выше работа [1], которая, кроме того, может служить примером случая, когда параметры модели оцениваются по системе регрессионных уравнений. При этом следует обратить внимание на уточнение относительно *F*-статистик, сделанное в конце раздела «Проверка простой гипотезы относительно граничной точки максимального правдоподобия».

Заключение

Очевидно, что предложенный подход к проверке сложных статистических гипотез, относящихся к вектору параметров, позволяет решать достаточно широкий класс задач математического моделирования. Предлагаемый метод проиллюстрирован как в опубликованной ранее работе [1], так и в данной статье на ряде примеров.

Благодарности

Автор выражает глубокую признательность доктору физико-математических наук, профессору Л.А. Петросяну, декану факультета прикладной математики – процессов управления Санкт-Петербургского государственного университета, обратившему внимание автора на особую роль принципа максимального правдоподобия, а также доктору физико-математических наук, профессору О.А. Малафееву, заведующему кафедрой моделирования социально-экономических систем, и кандидату физико-математических наук А.В. Кондрашкову, доценту кафедры прикладных информационных технологий Санкт-Петербургского государственного экономического университета, за ознакомление с проблематикой примеров, рассмотренных в статье.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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

[2] **Пичугин Ю.А., Кондрашков А.В.** Геометрические аспекты проверки статистических гипотез в задачах математического моделирования // Некоторые актуальные проблемы современной математики и математического образования. Герценовские чтения – 2014: Материалы научной конференции, 14 – 18 апреля 2014. СПб.: РГПУ им. А.И. Герцена, 2014. С. 230–236.

[3] **Себер Дж.** Линейный регрессионный анализ. М.: Мир,1980. 456 с.

[4] **Пичугин Ю.А.** Вероятностные оценки риска и надежности в экономике // Научная сессия ГУАП. Сб. докл.: В 3-х ч. Ч. 1. Технические науки. СПб.: ГУАП, 2013. С. 195–196.

[5] **Пичугин Ю.А., Малафеев О.А.** Об оценке риска банкротства фирмы // VI Международная конференция «Динамические системы: устойчивость, управление, оптимизация (DSSCO'13)», посвященная 95-летию со дня рождения Е.А. Барбашина, 1–5 октября 2013 г., г. Минск. С. 204–206.

[6] **Магнус Я.Р., Нейдеккер Х.** Матричное дифференциальное исчисление с приложениями к статистике и эконометрике. М.: Физматлит, 2002. 496 с.

[7] **Вернер А.Л., Кантор Б.Е., Франгулов С.А.** Геометрия. Ч. 2. СПб.: Специальная литература, 1997. 322 с.

[8] **Пичугин Ю.А.** Проверка сложной статистической гипотезы в линейном регрессионном анализе // Научная сессия ГУАП. Сб. докл.: В 3-х ч. Ч 1. Технические науки. СПб.: ГУАП, 2014. С. 275–277.

[9] **Altman E.** Managing Credit Risk, 2-nd ed. John Wiley and Sons, 2008.

[10] **Пичугин Ю.А., Кондрашков А.В.** Многомерные критерии моделей математической экономики на основе альтмановского подхода // Развитие социально-культурной и экономической деятельности в России: региональный аспект. Материалы II Всерос. научно-практической конференции. СПб., 29–30 апреля 2014 г. СПб.: ГПА, 2014. С. 92–97.

[11] **Колемаев В.А.** Математическая экономика. Учебник для вузов. 3-е изд. М.: Юнити–Диана, 2005. 399 с.

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

[13] **Пичугин Ю.А., Кондрашков А.В.** Вероятностная оценка для одной из задач космической

безопасности на основе кеплеровской модели // Научная сессия ГУАП. Сб. докл.: В 3-х ч. Ч 1. Технические науки. СПб.: ГУАП, 2014. С. 273–275.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ПИЧУГИН Юрий Александрович – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры геометрии Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена.*

191186, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48

yury-pichugin@mail.ru

Pichugin Yu.A. GEOMETRICAL ASPECTS OF TESTING THE COMPLEX STATISTICAL HYPOTHESES IN MATHEMATICAL SIMULATION.

It is well known that mathematical simulation parameters often are obtained by statistical estimating. Therefore the problem of testing the complex statistical hypotheses such as the one about an adjunct of a vector of model parameters to some domain is of current concern. This article deals with the problem in geometrical aspects. The basic theorem to solve this problem has been stated and proved. The theorem asserts that the solution can be done through testing some simple statistical hypothesis concerning a boundary point of maximum likelihood. The theorem proof is based on the use of generalized Euclidean metric and an affine transformation of parameter space. Typical examples of its use for different mathematical models are also considered. They are the following: (*i*) Altman's model of the economic stability and risk estimating; an estimation of specific enterprise is treated in terms of the statistical hypotheses testing; (*ii*) the method to refine statistical estimations of production function parameters; (*iii*) the statistical estimation of the space object dynamic stability is considered on the basis of Kepler's model, as well.

BOUNDARY POINT OF MAXIMUM LIKELIHOOD, LAGRANGE TASK, ELLIPSOID OF RELIABILITY, GENERALIZED EUCLIDEAN METRIC.

REFERENCES

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

[2] **Yu.A. Pichugin, A.V. Kondrashkov**, Geometrical aspects of the statistical hypothesis testing in mathematical models, Proceedings of Scientific Conference "Herzen reading – 2014", Herzen State Pedagogical University of Russia, St. Petersburg, 2014, 230–236.

[3] **G.A.F. Seber**, Linear regression analysis, Mir, Moscow, 1980.

[4] **Yu.A. Pichugin,** Veroyatnostnyye otsenki riska i nadezhnosti v ekonomike [Probabilistic risk and reliability assessment in economics], Nauchnaya sessiya GUAP: Sb. dokl.: Ch. 1. Tekhnicheskiye nauki. SPb.: GUAP, St. Petersburg, 2013, pp. 195–196.

[1] **Yu.A. Pichugin, O.A. Malafeyev**, Ob otsenke riska bankrotstva firmy [On the assessment of the bankruptcy risk of a company]. VI Mezhdunarodnaya konferentsiya "Dinamicheskiye sistemy: ustoychivost, upravleniye, optimizatsiya" (DSSCO'13), posvyashchennaya 95-letiyu so dnya rozhdeniya Ye.A. Barbashina, 1–5 oktyabrya 2013 goda, Minsk, pp. 204–206.

[6] **Ya.R. Magnus, Kh. Neydekker**, Matrichnoye differentsialnoye ischisleniye s prilozheniyami k statistike i ekonometrike [Matrix differential calculation with applications in statistics and econometrics]. Fizmatlit, Moscow, 2002.

[7] **A.L. Verner, B.Ye. Kantor, S.A. Frangulov,** Geometriya, chast 2 [Geometry, part 2]. Spetsialnaya l-ra, Moscow, 1997.

[8] **Yu.A. Pichugin**, The testing of complex statistical hypothesis in linear regression analysis, Proceedings of Scientific Conference "Nauchhaya sessia GUAP" [Scientific session of SUAI], V. 1, Technical Sciences, St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, 2014, pp. 275–277.

[9] **E. Altman**, Managing Credit Risk, 2nd Edition. John Wiley and Sons, 2008.

[10] **Yu.A. Pichugin, A.V. Kondrashkov,** Mnogomernyye kriterii modeley matematicheskoy ekonomiki na osnove altmanovskogo podkhoda [Multidimensional models of mathematical economics criteria based on the Altman approach], in: Razvitiye sotsialno-kulturnoy i ekonomicheskoy deyatelnosti v Rossii: regionalnyy aspekt. Materialy II Vseross. nauchno-prakticheskoy konferentsii. (S.-Peterburg. 29-30 aprelya 2014 g.). GPA, St. Petersburg, 2014, pp. 92–97.

[11] **V.A. Kolemayev**, Matematicheskaya ekonomika: Uchebnik dlya vuzov [Mathematical economics. Textbook for universities]. 3rd ed.

Yuniti-Diana, Moscow, 2005.

[12] **V.A. Bessonov**, Problemy postroyeniya proizvodstvennykh funktsiy v rossiyskoy perekhodnoy ekonomike [Problems of constructing production functions in Russian transition economy], in: Bessonov V.A., Tsukhlo S.V. Analiz dinamiki rossiyskoy perekhodnoy ekonomiki. Institut ekonomiki perekhodnogo perioda, Moscow, 2002.

[13] **Yu.A. Pichugin, A.V. Kondrashkov**, The probabilistic estimate of the stability and hazard of the dynamics of a space object on the basis of Kepler's model, Proceedings of Scientific Conference "Nauchhaya sessia GUAP" [Scientific session of SUAI], V. 1, Technical Sciences, St. Petersburg State University of Aerospace Instrumentation, 2014, pp. 273–275.

THE AUTHOR

PICHUGIN Yury A.
Herzen State Pedagogical University of Russia
48, Moyka Emb., St.Petersburg, 191186, Russian Federation
yury-pichugin@mail.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.14
УДК: 004.021

Т.В. Лазовская, Д.А. Тархов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ПОСТРОЕНИЮ ПАРАМЕТРИЗОВАННОГО НЕЙРОСЕТЕВОГО РЕШЕНИЯ ЖЕСТКОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

На примере одной модельной задачи исследуются новые алгоритмы нейросетевого моделирования, такие как специальная перегенерация тестовых точек, использование дополнительной информации и гибридный метод. Приведенные в статье подходы можно естественно обобщить на системы обыкновенных дифференциальных уравнений, дифференциальные уравнения более высокого порядка и дифференциальные уравнения в частных производных.

НЕЙРОННАЯ СЕТЬ, ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ, ПАРАМЕТРИЗОВАННАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ, ГИБРИДНЫЙ АЛГОРИТМ.

Введение

Методология построения нейросетевых моделей по дифференциальным уравнениям и иным данным (краевые условия, измерения и т. п.), разработанная профессорами Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого А.Н. Васильевым и Д.А. Тарховым [3], обеспечивает решение сложных и некорректных задач математической физики [4 – 7]. Особенно перспективными представляются параметризованные нейросетевые модели, включающие один или несколько параметров задачи в качестве входных переменных [6 – 8] и позволяющие решать одновременно семейство задач, объединенных параметрами.

В данной работе на примере одной несложной модельной задачи поставлен и решен ряд новых принципиальных вопросов.

Во-первых, изучена возможность расширения интервала изменения параметра в рамках одной нейросетевой модели без потери точности, то есть увеличения множества одновременно решаемых задач.

Во-вторых, исследовано влияние на точность решения нового подхода к выбору тестовых точек, названного специальной перегенерацией тестовых точек.

В-третьих, продолжено исследование [3], направленное на уточнение решения с помощью гетерогенных дополнительных данных. Это точечные данные об искомой функции, в том числе неточные, что часто встречается в реальных моделях.

В данной статье новизна, по сравнению с прежними работами [3], заключается в том, что упомянутые точечные данные получены заведомо неточным численным методом. Кроме того, помимо точечных данных, используются дополнительные условия в виде уравнений, полученных с помощью асимптотического разложения.

Для поиска ответов на перечисленные выше вопросы было целесообразно в первую очередь взять простейшую модельную задачу, которая бы имела аналитическое решение, чтобы с ним сравнивать построенные приближенные решения и затем объективно оценить полученные результаты.

В качестве такой модельной задачи выбрано жесткое дифференциальное уравнение первого порядка [1]. Исследования [2 – 8] позволяют предположить, что выводы из сравнительного анализа изучаемых методов и алгоритмов останутся справедливыми и для более сложных задач, включая задачи математической физики; таким образом, рассмотрение столь простой задачи представляется оправданным.

Введение параметра в дополнительные данные задачи (они выражены с помощью

некоторого уравнения) позволяет, в частности, провести сравнение классической и неклассической постановок. В последнем случае условия накладываются на искомую функцию вне выбранной при решении области. В качестве отправной точки для такого условия используется естественная асимптотика изучаемой задачи. Роль неточных дополнительных точечных данных играет приближенное решение задачи, полученное одним из классических методов.

Нейронная сеть позволяет объединить информацию как в виде данных, так и уравнений с помощью функционала минимизации, характеризующего качество модели. Кроме того, в данной статье исследуется новая схема выбора пробных точек на разных этапах минимизации (процедура перегенерация тестовых точек) при различных типах исходных условий.

Нейросетевые модели с дополнительными данными

Особый интерес представляют задачи, которые обычно плохо решаются классическими явными методами или требуют большого количества итераций. Среди обыкновенных дифференциальных уравнений (ДУ) такими являются жесткие ДУ [1] .

В книге [1] рассматривается классический пример жесткого уравнения

$$y' = -50(y - \cos x) \qquad (1)$$

с начальным условием $y(0) = 0$.

При решении этой задачи явным методом Эйлера возникает критическое значение для шага сетки, равное 2/50, при превышении которого приближенное решение становится неустойчивым с сильными колебаниями (рис. 1, *a*). При этом ошибка оказывается слишком большой для меньшего шага.

Мы будем рассматривать обобщенную параметризованную задачу

$$y' = -\alpha(y - \cos x), \quad y(0) = 0, \qquad (2)$$

где $\alpha \in [5, 50]$ или $\alpha \in [0,5; 50]$, $x \in [0,1]$.

Жесткость задачи проявляется для переменной x в окрестности нуля, чем и обусловлен выбор соответствующего интервала. Пробные запуски показали, что качество нейросетевого решения сохраняется и для бо́льших промежутков. Задача решается сразу для всех рассматриваемых значений параметра α. Заметим, что такие интервалы изменения параметра существенно больше рассмотренных в работах [6, 8].

Приближенное решение ищется в виде выхода искусственной нейронной сети заданной архитектуры

$$y(x) = \sum_{i=1}^{n} c_i v(x, \alpha, \mathbf{a}_i),$$

веса которой $\{c_i, \mathbf{a}_i\}_{i=1}^{n}$ определяются в процессе минимизации функционала ошибки

$$\sum_{j=1}^{m} (y'(\xi_j) - F(\xi_j, y(\xi_j), \alpha_j))^2 + \delta y^2(0),$$

причем в нашем случае $F(x, y, \alpha) = -\alpha(y - \cos x)$.

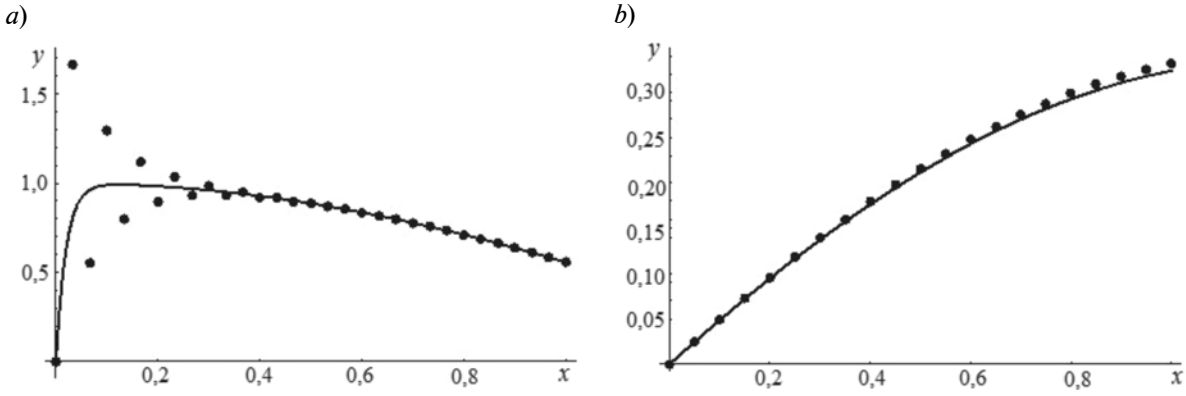


Рис. 1. Решения жесткого дифференциального уравнения (2) явным методом Эйлера при α = 50 (*a*) и 5 (*b*). Символы соответствуют поточечным решениям методом Эйлера, линии – истинным решениям

Пробные точки (ξ_j, α_j) выбираются случайными, распределенными равномерно в рассматриваемой области изменения переменной x и параметра α, их выбор повторяется после нескольких (трех-пяти) итераций алгоритма оптимизации. Новый случайный выбор тестовых точек на некотором шаге будем называть перегенерацией тестовых точек.

Оценка качества полученного решения производится по точному аналитическому решению уравнения (2) с начальным условием $y(0) = 0$, имеющему вид

$$y(x, \alpha) = \frac{\alpha^2(\cos x - \exp(-\alpha x)) + \alpha \sin x}{\alpha^2 + 1}. \quad (3)$$

В настоящей работе исследованы два типа моделей, соответствующих различным базисным функциям, при разном количестве нейронов в сети. В первом случае выбирались универсальные сигмоиды вида

$$\mathrm{th}[a(x - d)]\mathrm{th}[a_1(\alpha - d_1)],$$

во втором – асимметричные гауссианы вида

$$x \exp[-a(x - d)^2] \exp[-a_1(\alpha - d_1)^2],$$

которые заведомо удовлетворяют начальному условию.

Оптимизация функционала ошибки проводилась по алгоритму, сочетающему RProp и метод облака [2]; точки случайным образом перегенерировались каждые три шага, облако состояло из трех частиц.

Следует отметить, что сложность процесса оптимизации вызвана тем обстоятельством, что оптимизируемый функционал меняется после каждой перегенерации пробных точек; таким образом мы избегаем возможности получения хорошей аппроксимации в фиксированном наборе точек и плохой в других точках рассматриваемой области, что может произойти при применении метода коллокаций.

Необходимо подчеркнуть, что применяемая вычислительная процедура содержит двойную стохастичность: помимо указанной случайной перегенерации точек, случайными выбираются начальные веса нейронной сети.

Кроме того, были изучены алгоритмы построения модели, использующие дополнительные данные об искомом решении, оценен эффект такого уточнения для разных типов базисных функций и числа нейронов в сети. В качестве таких данных рассматривалось соответствие искомых решений уже найденным с помощью явного метода Эйлера для значений параметра α, равных 5 и 50. Отметим, что при $\alpha = 5$ уравнение перестает быть жестким и решается довольно точно (см. рис. 1, *b*). «Плохое» решение при $\alpha = 50$ позволяет изучить реакцию модели на неточные данные.

Введение в модель новой информации происходит с помощью добавления в функционал минимизации дополнительного слагаемого вида

$$\delta_1 \sum_{j=1}^{m} (f(x_j) - y(x_j))^2,$$

где $f(x_j)$ – поточечное решение Эйлера; вес δ_1 можно варьировать, при этом следует учитывать точность имеющихся данных или какие-либо специальные условия.

В первой модификации модели использовались описанные выше данные для $\alpha = 50$, во второй учитывались также данные для $\alpha = 5$. Некоторые результаты вычислительных экспериментов для функционала ошибки для двух типов нейронных сетей приведены в табл. 1. Рассматривались сети с разным числом нейронов и числом итераций, равным 200.

Очевидно, что при отсутствии дополнительных данных с лучшей стороны себя показал вариант с базисными функциями, удовлетворяющими начальному условию (гауссианы). Привлечение же дополнительной информации повышает точность только при использовании универсальных базисных функций (сигмоиды), тогда как в случае сети с подобранными под начальное условие функциями в основном происходит, наоборот, увеличение ошибки. Особенно заметен эффект от применения данных для сетей с высоким количеством нейронов ($n = 50$).

Что касается большой ошибки в графе $\delta_1 = 0$ (означает отсутствие дополнительных данных) в случае сети персептрон, ее можно объяснить особенностями соответ-

Таблица 1

Значения функционала ошибки с различным набором данных для двух типов нейронных сетей

n	Базовая модель ($\delta_1 = 0$)		1-я модификация ($\alpha = 50$)		2-я модификация ($\alpha = 5$; $\alpha = 50$)	
	Сигмоиды	Гауссианы	Сигмоиды	Гауссианы	Сигмоиды	Гауссианы
5	4,078	1,503	2,176	3,746	1,561	3,376
20	4,312	0,932	2,781	1,226	1,673	2,074
50	8,811	1,787	4,482	1,587	1,260	1,556

Обозначения: n – количество нейронов, α – параметр; δ_1 – вес дополнительных данных; при δ_1, отличном от нуля, использованы дополнительные данные при различных значениях α. Число итераций – 200.

ствующего функционала, чувствительного к резкому росту решения. Увеличение числа нейронов при этом не меняет ситуации. При отсутствии данных или их малом количестве большое число нейронов лишь замедляет обучение и ухудшает результат. Важно отметить, что результаты улучшаются при существенном увеличении числа итераций.

Таким образом, уточнение нейросетевого решения возможно при использовании в качестве дополнительной информации даже неточных данных, например приближенных численных решений, полученных классическими методами, в том числе такими слабыми, как явный метод Эйлера.

Модификации нейросетевой модели с помощью специальной перегенерации тестовых точек

Продолжим уточнение модели с дополнительными данными, используя новую процедуру перегенерации тестовых точек – выбор тестовых точек по определенному правилу на каждой итерации. Введем параметр d_t, принимающий значения 0; 0,3; 0,5; 0,7; 1,0 (вообще говоря, любые в промежутке от 0 до 1), отражающий долю точек, фиксирующихся от одной итерации к другой. Например, $d_t = 0$ означает полную перегенерацию, т. е. все точки заново выбираются случайным образом (распределены равномерно по рассматриваемому интервалу) перед каждой итерацией, $d_t = 1$ означает, что точки фиксируются с первой итерации и больше не изменяются. Для промежуточных значений параметра используется следующее правило: фиксируется $d_t \cdot m$ точек из всех m тестовых точек с наибольшими значениями функционала ошибки, а остальные перегенерируются случайным образом. При первой итерации во всех случаях точки выбираются так, чтобы они были случайно и равномерно распределены на рассматриваемой области.

В экспериментах использовалась сеть типа персептрон, показавшая себя в предыдущем исследовании как наиболее восприимчивая к появлению дополнительной информации о модели. Число нейронов в сети выбиралось равным двадцати ($n = 20$), использовались данные о соответствии искомого решения приближенному, полученному явным методом Эйлера при $\alpha = 5$ и 50, количество итераций составляло 300.

Для объективной оценки полученных результатов введем следующую меру. Поскольку для нашего уравнения существует решение в явном виде (3), мы имеем возможность сравнить решение, построенное с помощью нейронных сетей, с истинным. В качестве такой меры используется среднеквадратичное отклонение c, найденное в 100 тыс. точек (α, x), причем α и x равномерно распределены на соответствующих промежутках. Выбранное число точек позволяет говорить об устойчивости оценки относительно разных выборок.

Была проведена серия испытаний для различных значений параметра d_t. Качество построенных нейронной сетью решений определялось с помощью упомянутой выше среднеквадратичной оценки c. В табл. 2 представлены результаты экспериментов в

Таблица 2

Среднеквадратичная оценка качества построенной нейросетевой модели

Параметр перегенерации	$d_t = 0$	$d_t = 0{,}3$	$d_t = 0{,}5$	$d_t = 0{,}7$	$d_t = 1{,}0$
E_c, 10^{-2}	6,39	6,45	6,80	6,62	6,85
s^2 ,10^{-2}	0,96	0,59	0,48	0,92	1,25

Обозначения: E_c, s^2 – среднее и среднеквадратичное отклонения, d_t – введенный параметр, отражающий долю точек, фиксирующихся от одной итерации к другой. Число итераций – 300; число тестовых точек $m = 20$.

виде среднего (E_c) и среднеквадратичного (s^2) отклонений полученной выборки для c. Из данных таблицы видно, что среднее значение ошибки отличается лишь во втором знаке. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что в данном случае перегенерация по вышеописанному правилу при $d_t = 0{,}3$ и $d_t = 0{,}5$ обеспечивает более устойчивый результат нейросетевого моделирования.

Очевидно, что с увеличением размерности, т. е. при переходе к уравнениям в частных производных, данный эффект должен усилиться. Влияние перегенерации точек на результат мы продолжим рассматривать и в следующем разделе.

Уточнение нейросетевой модели с помощью асимптотического условия

Следует отметить, что при достаточно малых значениях α справедливо соотношение $y \cong \alpha \sin x$. Полученное таким образом асимптотическое условие будем считать дополнительной информацией о модели. Кроме того, будем учитывать данные о соответствии искомого решения приближенному, полученному методом Эйлера при $\alpha = 50$; другими словами, изучим использование в модели гетерогенных данных. Помимо этого, будем продолжать исследование эффекта перегенерации тестовых точек, описанной в предыдущем разделе.

Асимптотическое условие будем учитывать в модели добавлением в функционал минимизации слагаемого

$$\delta_2 \sum_{k=1}^{m} \left[y\left(x_k, \frac{\alpha_k}{M}\right) - \frac{\alpha_k}{M} \sin x_k \right]^2,$$

где M – достаточно большое фиксированное положительное число, а переменные x_k и α_k перегенерируются так же, как и ранее на рассматриваемых промежутках $\alpha \in [0,5; 50]$, $x \in [0,1]$.

Описанный выше подход был исследован для сети с двадцатью базисными функциями ($n = 20$) и с двадцатью и пятьюдесятью тестовыми точками ($m = 20$ и 50). Нейронная сеть применялась с асимптотическим условием для $M = 50$, 100 и 200. Отметим, что значение $1/M$ в этих случаях будет выходить за рамки интервала, в котором предполагается выполнение задачи (2), и можно говорить о решении неклассической задачи.

Для каждого набора параметров проводилась серия испытаний. Качество построенных нейронной сетью решений определялось с помощью упомянутой выше среднеквадратичной оценки. Результаты экспериментов приведены в табл. 3. Для модели с пятьюдесятью тестовыми точками представлен только случай использования асимптотического условия при $M = 50$, так как при других M значимых различий в результатах не выявлено. Очевидно, что при больших значениях параметра M задача является в большей степени неклассической, что выражается в ухудшении результатов при полной перегенерации для значения $m = 20$. В этих случаях лучше работает метод с частичной перегенерацией тестовых точек, а метод коллокаций дает наибольшую ошибку. Важно, что именно для модели с фиксированными точками для $m = 50$ мы получаем такой же хороший результат, как и при полной перегенерации для $m = 20$. При этом сильно возрастает время обучения (оно линейно зависит от числа тестовых

Таблица 3

Среднеквадратичная оценка качества нейросетевых моделей, построенных с учетом асимптотического условия при различных значениях параметра M и параметра перегенерации d_t

M	Перегенерация	$d_t = 0$	$d_t = 0{,}3$	$d_t = 0{,}5$	$d_t = 0{,}7$	$d_t = 1{,}0$
$m = 20$						
50	E_c, 10^{-2}	5,51	6,83	8,38	7,36	7,54
	s^2, 10^{-2}	0,41	0,99	0,32	0,83	1,24
100	E_c, 10^{-2}	7,03	6,84	8,13	6,87	9,12
	s^2, 10^{-2}	0,68	1,25	1,70	1,10	1,35
200	E_c, 10^{-2}	7,71	7,09	6,96	6,68	7,63
	s^2, 10^{-2}	1,49	0,96	1,27	1,01	1,95
$m = 50$						
50	E_c, 10^{-2}	6,13	6,05	6,23	6,96	5,62
	s^2, 10^{-2}	0,95	0,46	1,18	0,71	0,27

точек). Таким образом, при прочих равных условиях полная перегенерация позволяет сократить время работы алгоритма за счет уменьшения количества контрольных точек при сохранении точности результата.

Приведем явный вид полученного решения при $m = 20$ и $M = 50$:

$$
\begin{gathered}
u(x,\alpha) = 0{,}095 + 0{,}103\ \mathrm{th}[4{,}294\cdot 10^{11} \times \\
\times (3{,}941\cdot 10^{11} + x)]\ \mathrm{th}[0{,}086(-49{,}788 + \alpha)] + \\
+ 0{,}147\ \mathrm{th}[6{,}398(-0{,}37 + x)] \times \\
\times \mathrm{th}[0{,}112(-45{,}994 + \alpha)] + \\
+ 0{,}235\ \mathrm{th}[4{,}21(-0{,}76 + x)\ \mathrm{th}[0{,}025 \times \\
\times (-45{,}33 + \alpha)] - 0{,}787\ \mathrm{th}[1{,}88 \times \\
\times (-0{,}305 + x)]\ \mathrm{th}[0{,}046(-34{,}378 + \alpha)] + \\
+ 0{,}083\ \mathrm{th}[4{,}474(-0{,}643 + x) \times \\
\times \mathrm{th}[0{,}149(-31{,}034 + \alpha)] + \\
+0{,}579\ \mathrm{th}[1{,}523(-0{,}503 + x)\ \mathrm{th}[0{,}166 \times \\
\times (-26{,}922 + \alpha)] - 0{,}934\ \mathrm{th}[0{,}083 \times \\
\times (-0{,}054 + x)]\ \mathrm{th}[0{,}565(-26{,}823 + \alpha)] - \\
- 0{,}163\ \mathrm{th}[1{,}818(-0{,}533 + x)]\ \mathrm{th}[0{,}246 \times \\
\times (-25{,}466 + \alpha)] - 0{,}819\ \mathrm{th}[2{,}017 \times \\
\times (-0{,}88 + x)]\ \mathrm{th}[0{,}14(-23{,}668 + \alpha)] + \\
+ 0{,}577\ \mathrm{th}[0{,}938(-0{,}831 + x)]\ \mathrm{th}[0{,}237 \times \\
\times (-23{,}39 + \alpha)] - 0{,}012\ \mathrm{th}[27{,}835 \times \\
\times (-0{,}284 + x)\ \mathrm{th}[0{,}407(-22{,}059 + \alpha)] - \\
- 0{,}276\ \mathrm{th}[1{,}099\cdot 10^{62}(2{,}145\cdot 10^{65} + x)] \times \\
\times \mathrm{th}[0{,}091(-11{,}042 + \alpha)] - \\
- 0{,}317\ \mathrm{th}[1{,}464\ (-0{,}569 + x)] \times \\
\times \mathrm{th}[0{,}244(-9{,}012 + \alpha)] - 0{,}105\ \mathrm{th}[5{,}303 \times \\
\times(-0{,}489 + x)]\ \mathrm{th}[0{,}576(-3{,}596 + \alpha)] + \\
+ 0{,}893\ \mathrm{th}[1{,}588(-0{,}798 + x)]\ \mathrm{th}[0{,}105 \times \\
\times (-3{,}546 + \alpha)] + 0{,}23\ \mathrm{th}\ [1{,}061 \times \\
\times (-0{,}581 + x)]\ \mathrm{th}[0{,}341(-2{,}658 + \alpha)] + \\
+ 0{,}445\ \mathrm{th}[62{,}244(-0{,}025 + x)] \times \\
\times \mathrm{th}[(0{,}084(-1{,}548 + \alpha)] - \\
- 1{,}009\ \mathrm{th}[1{,}812(-0{,}976 + x)]\ \mathrm{th}[(0{,}121 \times \\
\times (-1{,}166 + \alpha)] - 0{,}026\ \mathrm{th}[1{,}222 \times \\
\times (-0{,}375 + x)]\ \mathrm{th}[(16{,}58(-0{,}559 + \alpha)] + \\
+ 0{,}849\ \mathrm{th}[0{,}595(-0{,}056 + x)] \times \\
\times \mathrm{th}[2{,}416(-0{,}55 + \alpha)].
\end{gathered}
$$

Увеличение ошибки при полной перегенерации 50 тестовых точек свидетельствует о некотором переобучении сети, то есть метод и число точек необходимо выбирать корректно относительно условий задачи. Частичную же перегенерацию можно успешно применять для неклассической задачи, позволяя тем самым дорабатывать модель на «сложных» точках.

Особый интерес представляет сравнение нейросетевых решений, построенных с использованием дополнительных данных разных типов при конкретных значениях среднеквадратичной ошибки. На рис. 2 изображены нейросетевые приближения для моделей с параметрами $m = 20$, $d_t = 0$ без применения асимптотического условия и с его использованием при $\alpha = 0{,}5$ и одной и той же среднеквадратичной ошибке. Представленные на рис. 2 результаты

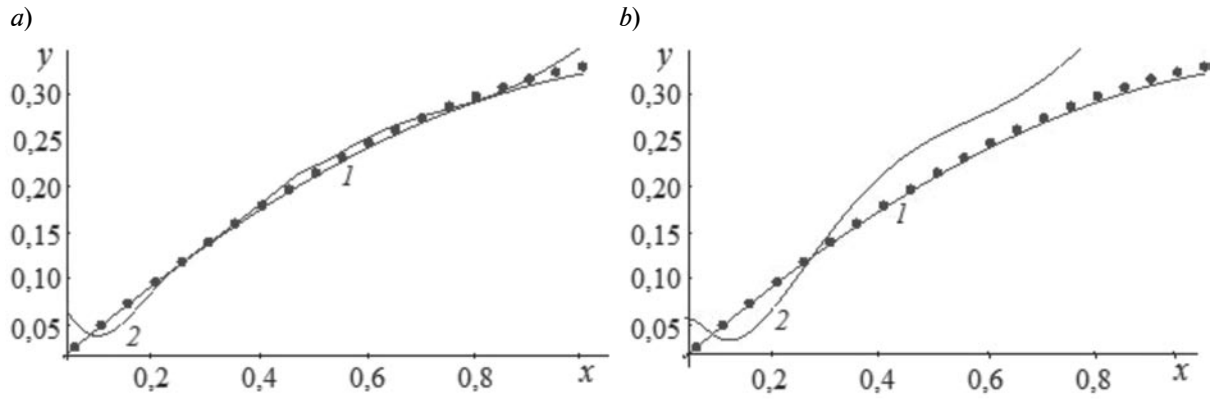


Рис. 2. Нейросетевые приближения решения, полученные при использовании точечных данных (*a*) и асимптотического условия (*b*) при α = 0,5 и одной и той же среднеквадратичной ошибке 0,027. Параметры моделей $m = 20$, $d_t = 0$. Символы – точечные решения методом Эйлера, линии *1*, *2* – истинное и нейросетевое решения соответственно

демонстрируют, что нейросетевая модель, построенная с использованием асимптотического условия, решает нежесткую задачу с меньшей точностью. При этом среднее значение оценки ошибки по всему промежутку изменения параметра у нее меньше (см. табл. 2 и 3), что говорит о более равномерном приближении к истинному решению на всем рассматриваемом интервале.

Отметим, что данный эффект сохраняется и для асимптотической модели при $M = 200$ (неклассическая задача), где приближение при малых значениях α еще грубее для равных значений среднеквадратичной оценки.

Таким образом, нейронная сеть успешно решает неклассические задачи, тогда как асимптотическая модель дает более равномерное приближение на всем интервале изменения параметра.

Способ сочетания нейросетевого и классического методов

Возможен еще один гибридный подход, который состоит в том, что нейросетевое приближение $u(x, \alpha)$ для решения задачи (2) используется при модификации неявного метода Адамса второго порядка точности для решения дифференциального уравнения $y' = f(x, y)$:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})).$$

При классическом подходе переменная y_{i+1} задается неявно и требует на каждом шаге применения некоторого метода решения данного нелинейного уравнения. Чаще всего в этом случае используется метод «предиктор-корректор», состоящий в двухэтапных вычислениях на каждом шаге. В качестве первого этапа применяется метод Эйлера, вычисляется

$$\hat{y}_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i),$$

а в качестве второго – формула метода Адамса:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, \hat{y}_{i+1})).$$

Используем нейросетевое приближение $u(x, \alpha)$ для замены двух формул одной:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, u(x_{i+1}, \alpha))).$$

Данный подход применялся и анализировался для нейросетевых моделей с сетью персептрон и базисными функциями-гауссианами для разного числа нейронов, а также при наличии и отсутствии дополнительных данных. Опишем наиболее интересные результаты.

Как и ожидалось, в условиях отсутствия дополнительных данных лучший результат и для рассматриваемого гибридного метода показывает применение нейронной сети с гауссианами. Число нейронов $n = 5$ оказы-

вается недостаточным, а при $n = 50$ возникает эффект переобучения. При $n = 20$ наблюдается значительное уменьшение ошибки при $\alpha = 50$, и таким образом, гибридный метод позволяет улучшить результат метода предиктор-корректор в жестком случае.

Что касается сети персептрон, эффект от применения гибридного метода проявляется в модели с использованием дополнительных данных для значений параметра $\alpha = 5$ и 50 (см. раздел «Нейросетевые модели с дополнительными данными»). Уже для сети с малым количеством нейронов число $n = 5$ дает улучшение результата для жесткого уравнения при $\alpha = 50$, по сравнению с нейросетевым и классическим методами, хотя для малых α этого не наблюдается. По-видимому, сказывается недостаток числа нейронов сети, так как при $n = 20$ и 50 сохраняется лучший результат для жесткого случая и достигается точность классических методов для уравнения при малых значениях параметра α.

Заключение

В результате проведенного исследования установлено, что нейросетевой подход при построении математической модели по разнородным данным, включающим дифференциальные уравнения, позволяет путем модификации функционала ошибки учитывать дополнительные условия различного типа без необходимости существенного изменения алгоритма.

Применение нейронных сетей дает возможность решать неклассические задачи, а также задачи построения моделей по неточным данным, что часто встречается в реальных приложениях. В рассмотренной задаче оказалось, что дополнительную информацию лучше воспринимает персептрон с сигмоидными базисными функциями, известными как универсальные аппроксиматоры.

Предложенный в статье алгоритм перегенерации тестовых точек обеспечивает экономию времени работы сети в простых задачах и уточнение модели при наличии сложной дополнительной информации.

При использовании нейронных сетей, дающих достаточно точные приближения, эффективен гибридный алгоритм, использующий в классических неявных методах приближенные нейросетевые решения. В этом случае он дает возможность значительно повысить точность приближенного решения в дискретном наборе точек.

Методология, представленная в книге [3], позволяет рассмотреть естественные обобщения приведенного в настоящей статье подхода на системы обыкновенных дифференциальных уравнений, уравнения более высокого порядка и уравнения в частных производных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №14-01-00660).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Хайрер Э., Ваннер Г.** Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. 685 с.

[2] **Тархов Д.А.** Нейросетевые модели и алгоритмы. М.: Радиотехника, 2014. 348 с.

[3] **Васильев А.Н., Тархов Д.А.** Нейросетевое моделирование. Принципы. Алгоритмы. Приложения. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2009. 528 с.

[4] **Васильев А.Н., Тархов Д.А.** Построение приближенных нейросетевых моделей по разнородным данным // Математическое моделирование. 2007. Т. 19. № 12. С. 43–51.

[5] **Васильев А.Н., Осипов В.П., Тархов Д.А.** Унифицированный процесс моделирования физико-технических объектов с распределенными параметрами // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2010. № 3(104). С. 39–52.

[6] **Васильев А.Н., Тархов Д.А.** Параметрические нейросетевые модели классических и неклассических задач для уравнения теплопроводности // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2012. Т. 3. № 153. С. 136–144.

[7] **Tarkhov D.A., Vasilyev A.N.** Mathematical models of complex systems on the basis of artificial neural networks // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2014. Vol. 17. No. 3. Pp. 327–335.

[8] **Васильев А.Н., Тархов Д.А.** Математические модели систем с интервально заданными

параметрами на основе гетерогенных нейронных сетей. Пористый катализатор // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2014. № 5. С. 3–7.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛАЗОВСКАЯ Татьяна Валерьевна – *старший преподаватель кафедры высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

tatianala@list.ru

ТАРХОВ Дмитрий Альбертович – *доктор технических наук, профессор кафедры высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

dtarkhov@gmail.com

Lazovskaya T.V., Tarkhov D.A. FRESH APPROACHES TO THE CONSTRUCTION OF PARAMETERIZED NEURAL NETWORK SOLUTIONS OF A STIFF DIFFERENTIAL EQUATION.

A number of new fundamental problems expanding Vasiliev's and Tarkhov's methodology worked out for neural network models constructed on the basis of differential equations and other data has been stated and solved in this paper. The possibility of extending the parameter range in the same neural network model without loss of accuracy was studied. The influence of the new approach to choosing test points and using the heterogeneous complementary data on the solution accuracy was analyzed.

The additional conditions in equation form derived from the asymptotic decomposition were used apart from the point data. The classical and non-classical definitions of the problem were compared by entering a parameter into the additional data. A new sampling scheme of test point choice at different stages of minimization (the procedure of test point regeneration) under various initial conditions was investigated. A way of combining two approaches (classical and neural-network) based on the Adams PECE method was considered.

NEURAL NETWORK, DIFFERENTIAL EQUATION, PARAMETRIZED MATHEMATICAL MODEL, HYBRID ALGORITHM.

REFERENCES

[1] **E. Hairer, G. Wanner,** Reshenie obyknovennykh differentsial'nykh uravnenij. Zhestkie i differentsial'no-algebraicheskie zadachi [The solution of ordinary differential equations. Stiff and differential algebraic problems], Mir, Moscow, 1999.

[2] **D.A. Tarkhov,** Nejrosetevye modeli i algoritmy [Neural network models and algorithms], Radiotekhnika, Moscow, 2014.

[3] **A.N. Vasiliev, D.A. Tarkhov,** Nejrosetevoe modelirovanie. Printsipy. Algoritmy. Prilozheniya [Neural network modeling. Principles. Algorithms. Applications], Polytechnical University Publishing House, St. Petersburg,, 2009.

[4] **A.N. Vasiliev, D.A. Tarkhov,** Postroenie priblizhennykh nejrosetevykh modelej po raznorodnym dannym [Construction of approximate neural network models according to heterogeneous data], Math. Models & Comp. Simulations. 19 (12) (2007) 43–51.

[5] **A.N. Vasiliev, V.P. Osipov, D.A. Tarkhov,** Unified process of modeling of physicotechnical objects with distributed parameters, St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. 3 (104) (2010) 39–52.

[6] **A.N. Vasiliev, D.A. Tarkhov,** Parametrical neural network models of classical and nonclassical problems for heat conduction equation, St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. 3 (153) (2012) 136–144.

[7] **D.A. Tarkhov, A.N. Vasiliev,** Mathematical models of complex systems on the basis of artificial neural networks, Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 17 (3) (2014) 327–335.

[8] **A.N. Vasiliev, D.A. Tarkhov**, Mathematical models of systems with interval representation of parameters on the basis of heterogeneous neural networks. Porous catalyst, Neurocomputers: design and applications. 5 (2014) 3–7.

THE AUTHORS

LAZOVSKAYA Tatiana V.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
tatianala@list.ru

TARKHOV Dmitry A.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politechnikheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
dtarkhov@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.15
УДК: 523.985.3

Ю.Е. Чариков[1,2], В. И. Глобина [3], А.Н. Шабалин[2], Е.П. Елфимова [1]

[1] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
[2] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
[3] Главная (Пулковская) астрономическая обсерватория РАН

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВРЕМЕННЫХ ЗАДЕРЖЕК ЖЕСТКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СОЛНЕЧНЫХ ВСПЫШКАХ

Исследованы временные задержки жесткого рентгеновского излучения (ЖРИ), зарегистрированного спектрометром BATSE во время солнечных вспышек. Для 82 вспышек получены спектры задержек: спадающие, возрастающие и *U*-образные с ростом энергии квантов. Интерпретация спектров задержек ЖРИ проведена на основе модели кинетики ускоренных электронов, которые распространяются во вспышечной петле. Решение нестационарного уравнения Фоккера – Планка позволило определить функцию распределения электронов вдоль петли во времени. Распределение яркости ЖРИ вдоль вспышечной петли использовано для построения спектров временных задержек. Показано, что спадающие спектры временных задержек поддаются интерпретации, если допустить пространственное разделение областей ускорения и инжекции электронов. Установлено различие спектров временных задержек ЖРИ из вершины и оснований вспышечной петли, поэтому необходимо проведение регулярных измерений ЖРИ с высоким пространственным разрешением.

СОЛНЦЕ, ВСПЫШКА, РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ, ЭЛЕКТРОН, ВРЕМЕННАЯ ЗАДЕРЖКА.

Введение

Анализ временных задержек вспышечного электромагнитного излучения в широком диапазоне энергий позволяет получать информацию не только о динамике энергетических спектров, но и об особенностях процессов ускорения и распространения электронов в петельных структурах магнитного поля во время солнечных вспышек. Впервые детальное исследование временных задержек ЖРИ было выполнено на основе измерений на спутнике Compton спектрометром BATSE [1, 2]. Высокое временное разрешение спектрометра BATSE позволило определить значения задержек, лежащих в пределах от миллисекунд до секунд, и проанализировать их энергетический спектр. В работах [1, 2] ставилась задача обнаружить зависимость спектра задержек от энергии ЖРИ конкретного вида $E^{-0,5}$ или $E^{1,5}$ (E – среднее значение энергии электронов в каждом канале), что соответствовало бы гипотезе (альтернативе) свободного пролета электронов во вспышечной петле либо захвата электронов в петле с последующим их высыпанием в конус потерь.

Следует отметить, что ожидаемые зависимости спектров задержек от энергии получены в упрощенных предположениях о переносе и излучении ускоренных электронов в плазме солнечных вспышек.

К тому же спектрометр BATSE не обладал пространственным разрешением и поэтому регистрировал излучение со всей петли в целом. На самом деле процессы ускорения электронов, их инжекция, перенос и тормозное излучение влияют на спектр задержек в целом, и поэтому маловероятно ожидать зависимостей, указанных выше. Кроме того, спектры задержек, скорее всего, должны быть различными в вершине петли и ее основаниях.

Исходя из вышеизложенного, в данной работе рассмотрена более реальная задача получения и интерпретации спектров временных задержек как из петли в целом, так и из ее различных частей.

Методика обработки временных рядов жесткого рентгеновского излучения солнечных вспышек

Методика обработки экспериментальных данных, полученных с помощью спектрометра BATSE для простых одноимпульсных событий, описана в статье [3]. Основа методики состоит в построении взаимной корреляционной функции (ВКФ) для всех пар временных рядов из рассматриваемого энергетического диапазона 20 кэВ – 2 МэВ с последующей интерполяцией трех точек вблизи ее максимума полиномом второй (четвертой) степени.

В настоящей работе, в отличие от методики работы [3], при построении спектров задержек солнечных вспышек по измерениям BATSE [4] проведена оценка ошибки значений времени задержки по методу Монте-Карло. Данные BATSE содержат массивы ошибок, связанных с определением скорости счета квантов для каждой вспышки. Вычисление ошибки значений задержек производится для $N = 100$ (N – число итераций). На основе данных BATSE на каждой итерации генерируются временные ряды с гауссовым разбросом числа отсчетов в каждом бине и определяется значение времени задержки. Затем полученные значения сортируются в порядке возрастания и нумеруются от 1 до 100 (в общем случае, от 1 до N). В качестве итогового значения времени задержки t_d берется величина, соответствующая номеру 50 ($N/2$). Нижняя и верхняя границы доверительного интервала на уровне 68 % определяются величинами, стоящими под номерами 16 ($N\cdot 0{,}16$) и 84 ($N\cdot 0{,}84$), соответственно ($t_{d\,\mathrm{dn}}$ и $t_{d\,\mathrm{up}}$). Ошибка находится по формуле

$$\Delta = \{(1/2)\cdot[(t_{d\,\mathrm{up}} - t_d)^2 + (t_{d\,\mathrm{dn}} - t_d)^2]\}^{1/2}.$$

Еще одним важным дополнением при изучении временных задержек ЖРИ солнечных вспышек по данным BATSE явилось рассмотрение многопиковых событий (ранее отбирались лишь однопиковые вспышки). В этом случае корреляционный анализ проводился как для всего временного ряда, так и для отдельных импульсов после разложения многопиковой структуры ЖРИ. При разложении комплексной временной структуры ЖРИ возникает проблема выбора формы импульса, на которые раскладывается исходный профиль. В данной работе нами выбрана форма, которая наблюдается чаще остальных среди единичных импульсов короткой длительности; она имеет резкий рост и плавный спад. Для описания такой формы импульса была выбрана следующая функция:

$$f = \begin{cases} y = y_0 + He^{-0{,}5\left(\frac{x-x_c}{w_1}\right)}(x < x_c); \\ y = y_0 + He^{-0{,}5\left(\frac{x-x_c}{w2}\right)}(x < x_c), \end{cases}$$

где $y(x)$ описывают контур кривой импульса; y_0 – уровень шума; H – высота максимума; w_1, w_2 – параметры формы импульса; x_c – положение на оси x.

Коэффициент, определяющий отношение параметров w_1 и w_2, которые обуславливают форму импульса, был найден из аппроксимации вспышки 2028 по каталогу BATSE (30.10.92, 22:53:31 UT). Далее на примере вспышки 1450 по каталогу BATSE (29.02.1992, 7:39:48 UT, рентгеновский класс GOES C1.7), мы рассмотрим разложение ЖРИ на отдельные импульсы. Временные профили выбранной вспышки представлены на рис. 1, *a*. Количество импульсов разложения выбирается конкретно для каждой вспышки так, чтобы интегральная кривая повторяла исходный временной профиль. Структурный профиль вспышки 1450 был разложен на пять импульсов (рис. 1, *b*).

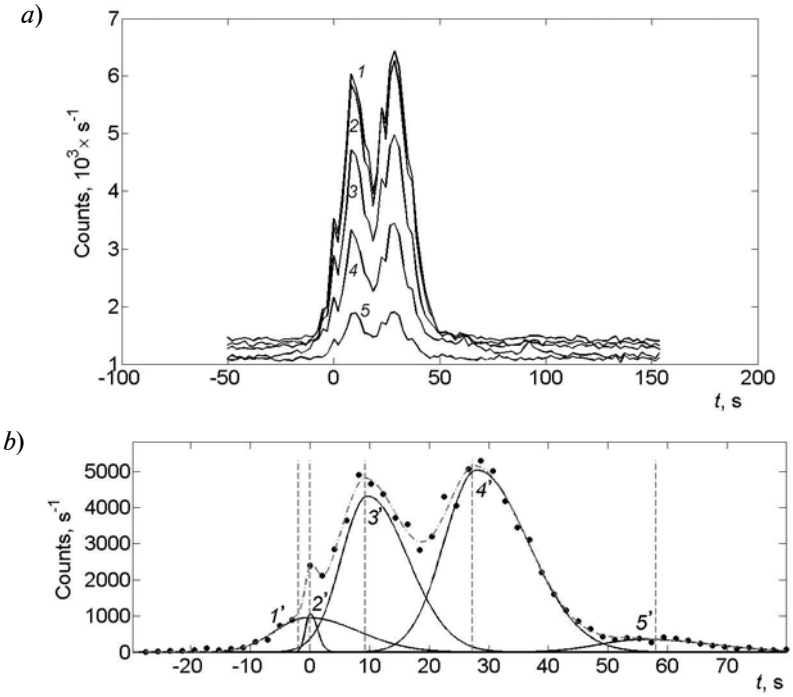


Рис. 1. Временные профили (*1* – *5*) солнечной вспышки 1450 (*a*) и разложение ее профиля *1* на пять импульсов (*1'* – *5'*) (*b*)

При анализе этой вспышки сравнение задержек проведено только для наиболее мощных импульсов (*3'*, *4'* на рис. 1, *b*).

Результаты анализа временных задержек солнечных вспышек по данным спектрометра BATSE

Банк данных BATSE содержит ЖРИ солнечных вспышек за период с апреля 1991 по май 2000 года [4]. Анализ временных задержек был проведен для 82 вспышек, имеющих однопиковую структуру. Полученные спектры задержек можно разделить на три типа по виду функциональной зависимости от энергии квантов: спадающий, растущий и *U*-образный. Незначительное количество вспышек имеет неопределенный спектр, который нельзя отнести к какому-либо классу (8 событий неопределенного типа). Распределения исследованных солнечных вспышек по типам спектров задержек и по максимальной величине времени задержки показаны на гистограммах рис. 2.

Вспышка 2028 по каталогу BATSE. На рис. 3, *a* приведены временные профили вспышки 2028. Она произошла 30.10.1992 года, ее начало зарегистрировано в 22:53:31 UT (UT –всемирное время), рентгеновский класс – X1.2. Профили ЖРИ на разных энергиях представляли собой одиночные всплески. Длительность всплесков разных энергий в среднем составляла 30 с; число энергетических каналов, в которых анализировали скорость счета, равно 5; диапазон энергий составлял от 24,1 до 100,6 кэВ.

На рис. 3, *a* видно, что в данном событии фоновое излучение измерялось длительное время как до, так и после самого всплеска. Поэтому задачу определения фона можно было решить аккуратно. После вычитания фона мы вычисляли парную ВКФ для всех пяти каналов, определяли временные задержки и строили их спектр по отношению к самому «быстрому» энергетическому каналу. На рис. 3, *b* показан полученный спектр временных задержек. Он выражен монотонно спадающей функцией по всему рассматриваемому диапазону энергий, и его можно аппроксимировать степенной функцией с показателем степени $\alpha = -2{,}28$.

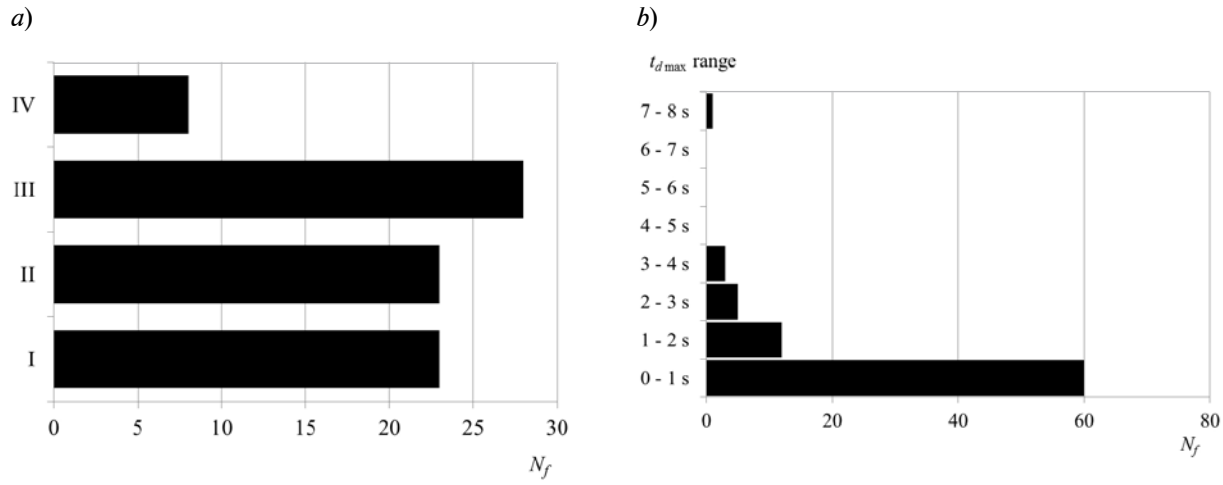


Рис. 2. Гистограммы распределения выбранных 82 солнечных вспышек по типам спектров задержек I – IV (*a*) и по максимальной величине времени задержки $t_{d\,max}$ (*b*);
N_f – количество солнечных вспышек; $t_{d\,max}$ range – диапазон значений $t_{d\,max}$; I, II, III, IV – типы спектров задержек: растущий, *U*-образный, спадающий, неопределенный, соответственно

Вспышка 1266 по каталогу BATSE. Эта вспышка произошла 02.01.1992 года, ее начало – 06:51:53 UT, рентгеновский класс – C6.6. Временные профили вспышки показаны на рис. 4,*a*. В разных энергетических каналах они представляют собой одиночный всплеск общей длительностью около 30 с. В данном событии анализировали ЖРИ из четырех энергетических каналов; энергетический диапазон составлял от 24,0 до 166,2 кэВ. Рентгеновский фон, как и в предыдущем случае, мог быть аккуратно вычислен. Построение ВКФ и определение парных задержек позволило построить спектр временных задержек для данного всплеска (рис. 4, *b*). Спектр задержек для рассматриваемой солнечной вспышки оказался монотонно растущим и также был аппроксимирован степенной функцией, но с показателем степени α = 1,88.

Вспышка 270 по каталогу BATSE. Примером вспышки, имеющей *U*-образный спектр временных задержек, может служить вспышка *N* 270. Вспышка произошла 05.06.1991 г., начало – в 00:00:20 UT, рентгеновский класс – M. Временные профили вспышки показаны на рис. 5, *a*. Как и в случае предыдущего всплеска, анализировалось ЖРИ из четырех энергетических каналов (25,4 – 160,2 кэВ). Профили ЖРИ

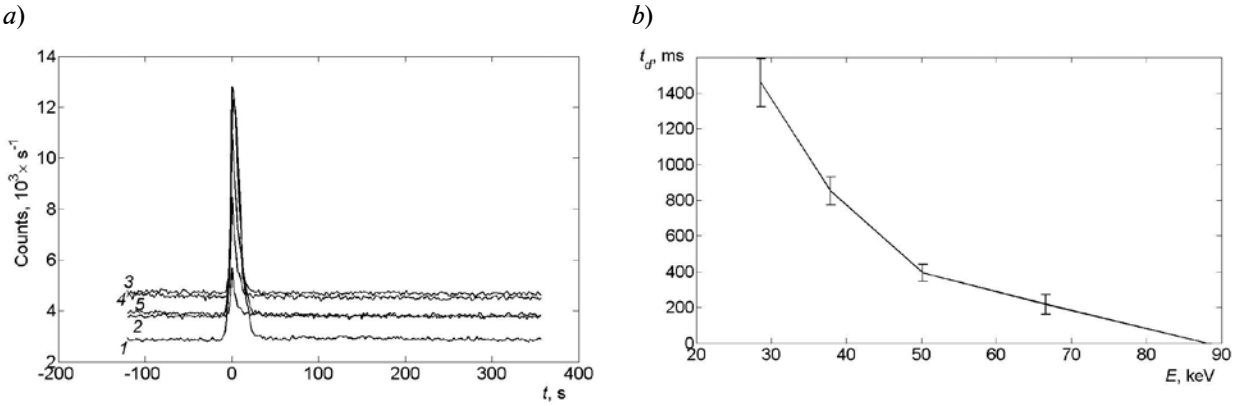


Рис. 3. Временные профили (*1* – *5*) вспышки 2028 (*a*) и полученный спадающий спектр ее временных задержек (*b*);
E – среднее значение энергии в канале; t_d – время задержки, Counts – отсчеты

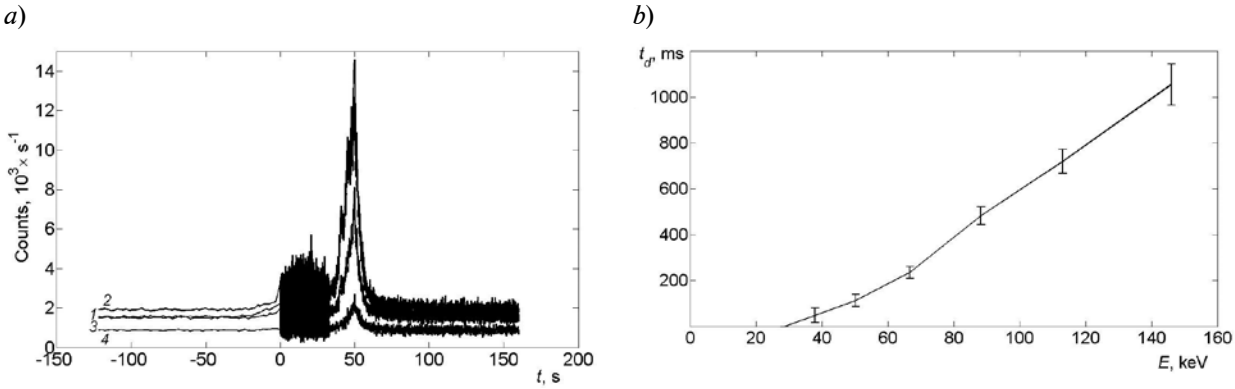


Рис. 4. Временные профили из четырех энергетических каналов для вспышки 1266 (*a*) и полученный растущий спектр ее временных задержек (*b*)

на разных энергиях также выражены одиночными всплесками. Общая длительность всплеска составила в среднем около 100 с. ЖРИ измерялось до и после всплеска, что позволяет точно определить фон рентгеновского излучения. Спектр задержек для данного всплеска приведен на рис. 5, *b*. Он состоит из двух частей: монотонно спадающей и растущей. Как следует из вида спектра, первыми регистрировались фотоны в канале со средней энергией 83,2 кэВ.

Спадающую ветвь спектра можно аппроксимировать степенной функцией, при этом значение показателя степени составляет $\alpha = -2{,}09$.

Для многопиковых временных профилей был проведен анализ семи событий. Исходя из предположения о том, что акты ускорения происходят последовательно, мы проводили сравнение спектров временных задержек отдельных импульсов с интегральным спектром задержек; это позволяло выяснить, насколько идентичны процессы ускорения электронов во времени. Среди обработанных данных встретились такие вспышки, для которых виды спектров задержек отдельных импульсов и интегрального совпадают, и такие, для которых они не совпадают. Пример указанного совпадения (вспышка 1450 по каталогу BATSE) приведен на рис. 6. В случае совпадения можно сделать вывод о подобии процессов в ускорителе. В противном случае, по-видимому, темп и механизмы ускорения были различными для отдельных импульсов в одной вспышке.

Модель переноса и инжекции ускоренных электронов в магнитной петле

Для интерпретации полученных значений временных задержек ЖРИ и их спектров рассмотрим модель кинетики уско-

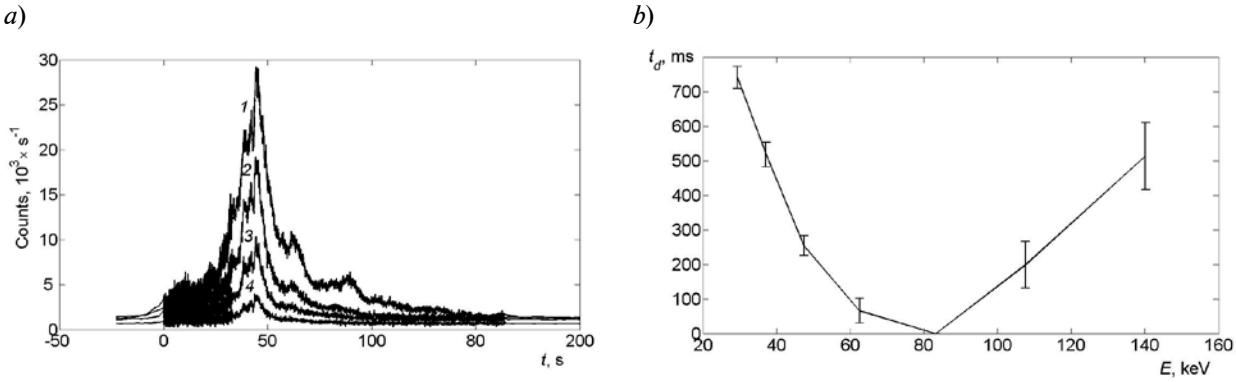


Рис. 5. Временные профили вспышки 270 (*a*) и полученный *U*-образный спектр ее временных задержек (*b*)

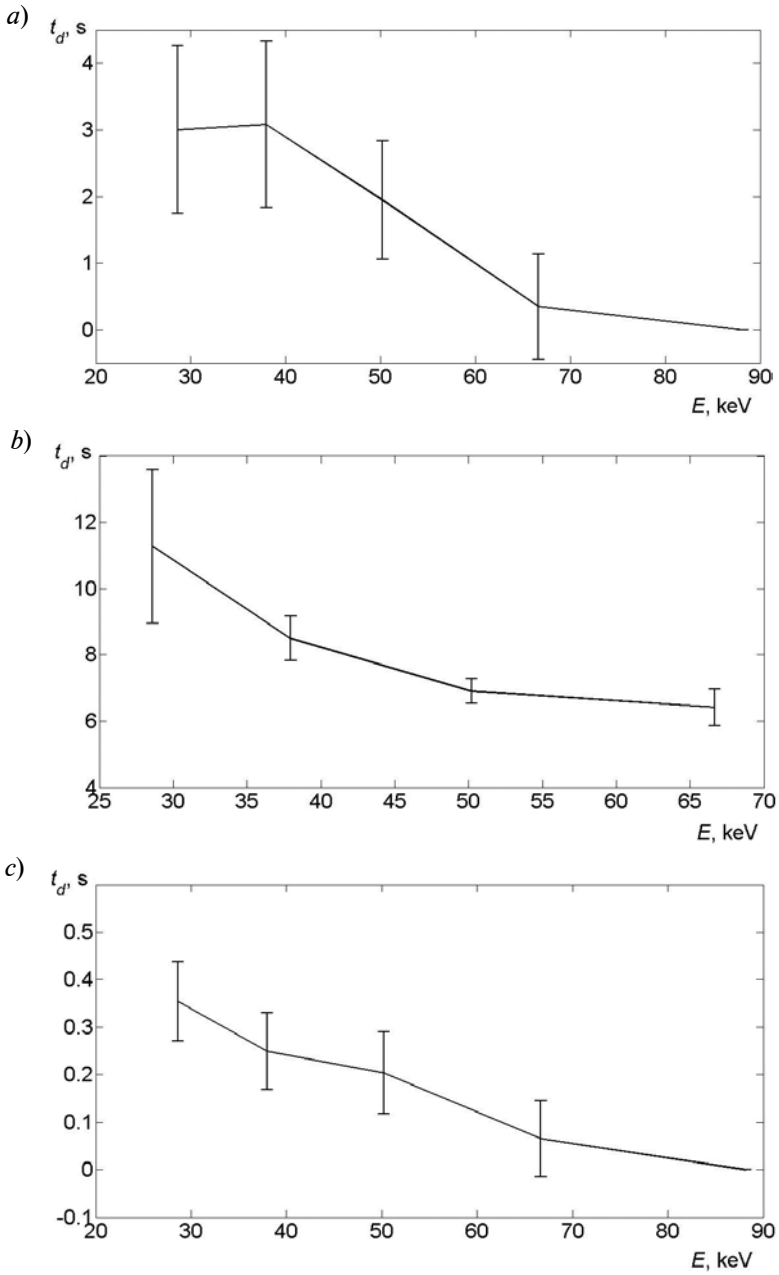


Рис. 6. Сравнение спектров задержек отдельных импульсов вспышки 1450 (*a*, *b*) с ее интегральным спектром (*c*); *a*, *b* — данные для импульсов *3′* и *4′*

ренных электронов в магнитных петлях во время солнечных вспышек [5 — 8]. Процессы ускорения, инжекции и переноса ускоренных электронов в плазме в магнитной петле во время солнечных вспышек еще далеки в настоящее время от ясной и четкой интерпретации. Последние данные наблюдений жесткого рентгеновского и микроволнового излучений [10, 11] с высоким пространственным разрешением позволяют предположить, что для вспышечной области характерна определенная геометрия. Однако локализация процесса ускорения частиц в этой геометрии еще не выяснена.

В различных моделях кинетики пучка электронов в плазме вспышечной петли [6 — 9] предполагается совмещенность областей ускорения и инжекции. Мы рассмо-

трели как этот случай, так и модель, согласно которой процесс ускорения происходит высоко в короне в токовом слое при пересоединении силовых линий магнитного поля. В процессе ускорения в токовом слое формируется распределение электронов по углам и энергиям. В то время как распределение по энергиям чаще всего принимается в виде степенной функции, угловая часть распределения остается неизвестной и потому задается модельным образом.

Будем полагать, что электроны из токового слоя с некоторым питч-угловым и энергетическим распределениями устремляются вдоль магнитного поля вниз по направлению к хромосфере без рассеяния и потерь энергии (тонкая мишень). Процесс инжекции мы связываем с переходом электронов в область замкнутой петли (например, в результате формирования замкнутой магнитной конфигурации либо дрейфового движения электронов) в коронально-хромосферной конфигурации магнитного поля. Высота области ускорения над вершиной замкнутой петли является параметром задачи, и она выбиралась нами, исходя из длины замкнутой петли, т. е. и ожидаемого времени задержек в сотни миллисекунд.

Таким образом, на первом этапе движение электронов представляет собой свободный разлет ускоренных электронов в корональной части магнитного поля в разреженной плазме. В дальнейшем ускоренные электроны могут захватываться в магнитную ловушку и «уходить» в конус потерь, в соответствии с питч-угловым распределением и условиям в плазме петли, а именно – распределению концентрации плазмы и конфигурации магнитного поля. Обратим внимание, что в отличие от более ранних работ по кинетике пучков [5 – 9], предложенная нами модель предполагает комбинированное начальное условие по времени, зависящее также и от энергии электронов, что связано с их пролетом от области ускорения до области инжекции. Поскольку из наблюдений достаточно сложно определить пространственную локализацию области ускорения и инжекции ускоренных электронов, мы рассматривали модели с разделенными ($l_r \neq 0$) и совмещенными в пространстве ($l_r = 0$) областями ускорения и инжекции.

Результаты численного моделирования спектров временных задержек

Кинетика ускоренных электронов описывается нестационарным релятивистским уравнением Фоккера – Планка [5]. В модели с разнесенными областями ускорения и инжекции электронов временная часть функции распределения электронов выглядит как $S_4(t(E))$, аргумент t имеет сдвиг, зависящий от энергии как $E^{-1/2}$. Рассматривалось три типа инжекции в вершине замкнутой петли:

изотропная инжекция;

инжекция в узкий конус, по направлению к одному из оснований петли;

симметричная двухпучковая инжекция, с угловой частью вида $\cos^6\alpha$.

Первоначально для всех моделей рассчитывалась функция распределения ускоренных электронов во времени и пространстве, вдоль петли. Поскольку целью статьи является расчет только временных задержек ЖРИ, здесь не приведены результаты расчета функции распределения, хотя они и представляют самостоятельный интерес. Полученные распределения, свернутые с релятивистским сечением тормозного излучения, позволили рассчитать распределение рентгеновской яркости вдоль магнитной петли, энергетические спектры ЖРИ, их динамику и, наконец, временные задержки.

Систематизированные кривые расчетных спектров временных задержек приведены на рис. 7, а исходные параметры моделей с номерами кривых даны в таблице.

На рис. 7, *а* показан интегральный по петле спектр задержек, рассчитанный по модели изотропной инжекции. Из него следует, что спектры задержек являются растущими с ростом энергии квантов как в модели с удаленным ускорителем электронов ($l_r = 1{,}5 \cdot 10^7$ см, кривая *2*), так и в модели с совмещенным с инжектором ускорителем ($l_r = 0$, кривая *1*); величина задержек монотонно возрастает до 520 и 620 мс, соответственно.

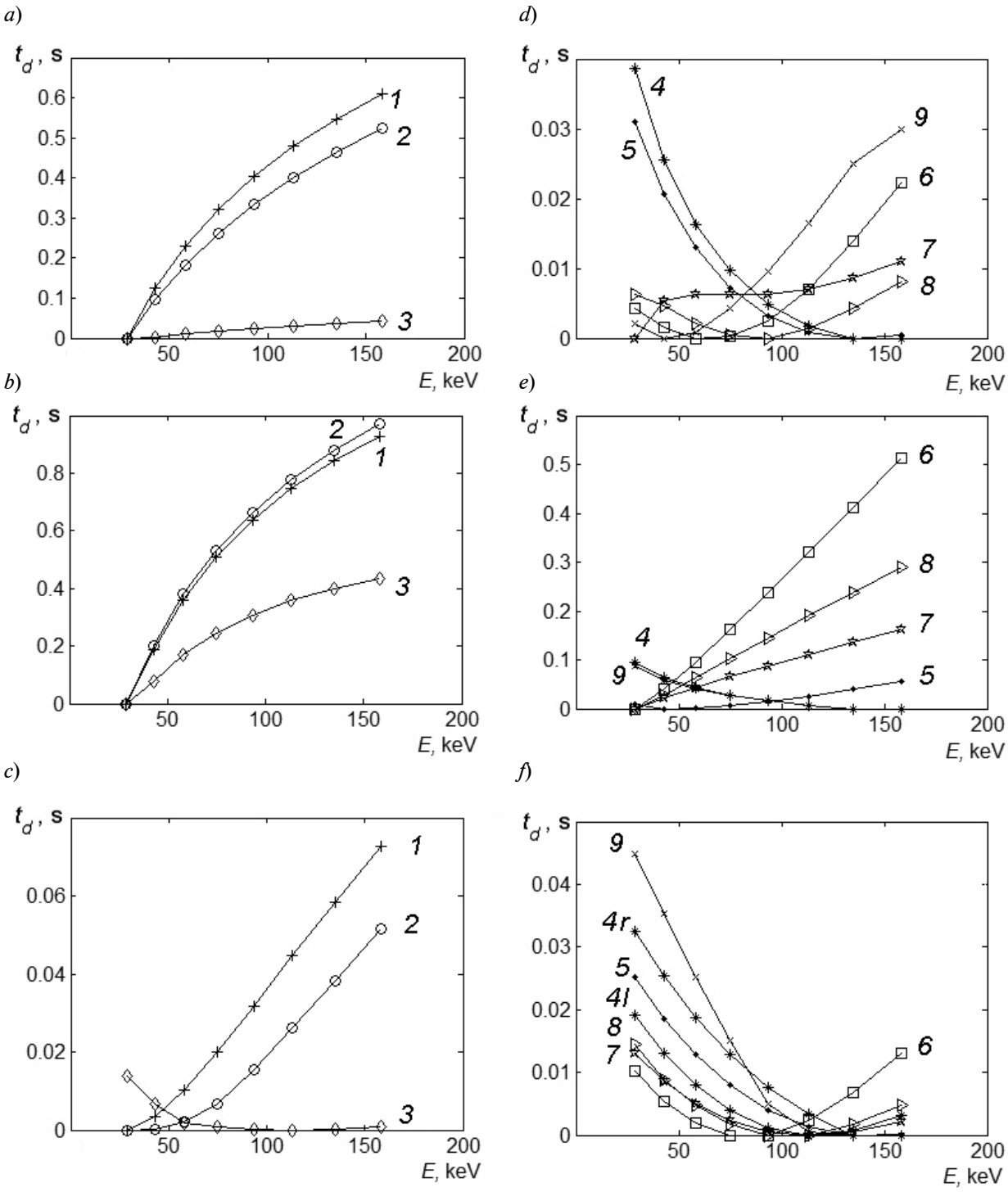


Рис. 7. Результаты расчетов спектров временных задержек ЖРИ по моделям изотропной (*a* – *c*) и анизотропной двухпучковой (*d* – *f*) инжекции электронов в плазму магнитной петли. Сопоставлены спектры для вершин (*b*, *e*) и подножий (*c*, *f*) петли с интегральными спектрами по всей петле (*a*, *d*).

Заданные угловые распределения электронов и расчетные параметры задачи представлены в таблице

Таблица

Заданные угловые распределения энергии электронов и параметры моделирования спектров временных задержек (рис. 7)

Номер кривой	$S(\alpha)$	l_r, м	t_0, с	b_1, м
1	1	0	1,4	0
2		$1{,}5\cdot10^7$	1,4	
3		$1{,}5\cdot10^7$	0,5	
4/4l/4r	$\cos^6\alpha$	$1{,}5\cdot10^7$	0,5	$-1{,}0\cdot10^7$
5		$1{,}5\cdot10^7$	0,5	0
6		$1{,}5\cdot10^7$	1,4	
7		0	0,5	
8		$1{,}0\cdot10^7$	0,8	
9	$\exp[(\alpha-\alpha_1)^2/\alpha_0^2]$	$1{,}5\cdot10^7$	0,5	

Обозначения: $S(\alpha)$ – заданное угловое распределение электронов по энергии для определенного типа инжекции в магнитную петлю, α_0 – 36°, α_1 – 0°, l_r – длина замкнутой магнитной петли, b_1 – величина сдвига минимума магнитного поля относительно геометрической вершины петли, *4l* – левое основание, *4r* – правое основание.

Для модели с меньшей длительностью инжекции (t_0 = 0,5 с, кривая *3*) спектр задержек нарастает до меньших значений – 50 мс. Отметим, что определенные ранее из наблюдений спадающий и *U*-образный спектры задержек получить с помощью этих моделей не удается.

В вершине петли характер задержек повторяет интегральные кривые спектров задержек (см. рис. 7, *b*), величина задержек несколько большая: максимальные значения составляют около 1 с. На рис. 7, *c* показаны кривые задержек из оснований магнитной петли. Важно обратить внимание на изменение характера спектра для коротких импульсов инжекции (t_0 = 0,5 с); видно, что нарастающий спектр сменился спадающим для модели с удаленным по петле ускорителем частиц. Однако это не повлияло на вид интегрального спектра задержек (см. рис. 7, *a*, кривая *3*), что свидетельствует о преимущественном вкладе в общий поток ЖРИ из вершины и промежуточных областей магнитной петли.

Для анизотропной двухпучковой инжекции, в случае удаленного процесса ускорения, расчеты показали *U*-образный тип интегральных спектров временных задержек (рис. 7, *d*). Различие между этими спектрами определяется, в первую очередь, длительностью процесса инжекции. В случае более длительной инжекции ($t_0 \geq 1$ с) спектры задержек становятся *U*-образными, причем энергия, соответствующая задержкам, равным нулю, находится в диапазоне 60 – 80 кэВ. При уменьшении длительности инжекции эта энергия смещается в область 140 кэВ и более. В модели совмещенных областей ускорения и инжекции спектр задержек – нарастающий.

На рис. 7, *e* приведены спектры задержек ЖРИ, полученные для вершины петли. Величина задержек несколько бо́льшая: она колеблется от десятка до 500 мс; спектры задержек ЖРИ с большей длительностью инжекции оказываются, как и в изотропном случае, растущими с ростом энергии и спадающими для менее длительной инжекции (t_0 = 0,5 с). Совсем иной характер спектров в основаниях петли: они спадают с ростом энергии (рис. 7, *f*). Величина задержек составляет от единиц до 50 мс и подобна значениям задержек ЖРИ от всей петли в целом.

Таким образом, различие спектров задержек ЖРИ в разных частях петли

(при наличии соответствующих наблюдений) может стать решающим при выборе модели ускорения электронов, их распространения и излучения в плазме магнитной петли во время солнечных вспышек.

Заключение

Анализ временных задержек жесткого рентгеновского излучения во время солнечных вспышек по данным измерений рентгеновского спектрометра BATSE позволил систематизировать полученные энергетические спектры указанных задержек и выделить из массива данных три типа спектров: растущие, спадающие и *U*-образные с ростом энергии квантов *E*. При этом спектры задержек ЖРИ от всей петли в целом для большинства из изученных 82 вспышек не соответствовали ни закону $E^{-1/2}$ (свободный разлет электронов), ни $E^{3/2}$ (модель ловушки с высыпанием). Поэтому в качестве альтернативной была рассмотрена модель кинетики пучка электронов в плазме магнитной петли с разнесенными областями процесса ускорения высоко в короне, в токовом слое и последующей инжекцией вдоль силовых линий в замкнутую петельную структуру магнитного поля. На момент инжекции электроны с энергией 20 кэВ запаздывали на десятки миллисекунд, по сравнению с электронами более высоких энергий. Дальнейшая динамика электронов в магнитной петле определяется параметрами пучка, плазмы и магнитного поля. Оказалось, что распределение жесткого рентгеновского излучения является неоднородным вдоль петли, а, следовательно, и временные задержки излучения из различных частей петли и их спектр также различаются между собой. Поэтому интегральный спектр задержек ЖРИ по всей петле может принадлежать любому из трех типов. Предлагаемая концепция подтверждается примерным равнораспределением 82 вспышек по типам спектров задержек.

На наш взгляд, более перспективным для наблюдений является получение и последующий анализ временных задержек ЖРИ, регистрируемых в экспериментах с высоким пространственным разрешением (например, спектрометром RHESSI) из различных частей петли.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Aschwanden M.J., Schwartz R.A., Alt D.M.** Electron time-of-flight differences in solar flares // Astrophysical Journal. 1995. Vol. 447. Pp. 923–935.

[2] **Ashwanden V.J., Bynum R.V., Kosugi T., et al.** Electron trapping times and trap densities in solar flare loops measured with Compton and Yohkoh // Astrophysical Journal. 1997. Vol. 487. No. 2. Pp. 936–955.

[3] **Чариков Ю.Е., Глобина В.И., Склярова Е.М.** Спектры временных задержек жесткого рентгеновского излучения солнечных вспышек по данным спектрометра BATSE // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 3 (177). С. 237–244.

[4] База данных NASA [Электронный ресурс] / NASA database. Режим доступа: ftp://legacy.gsfc.nasa.gov/compton/data/batse.

[5] **Hamilton R.J., Lu E.T., Petrosian V.** Numerical solution of the time-depending kinetic equation for electrons in magnetized plasma // Astrophysical Journal. 1990. Vol. 354. Pp. 726–734.

[6] **Gorbikov S.P., Melnikov V.F.** The numerical solution of the Fokker-Planck equation for modeling of particle distribution in solar magnetic traps // Mathematical Modeling. 2007. Vol. 19. Pp. 112–122.

[7] **Zharkova V.V., Kuznetsov A.A., Siversky T.V.** Diagnostics of energetic electrons with anisotropic distributions in solar flares I. Hard X-rays bremsstrahlung emission // Astronomy & Astrophysics. 2010. Vol. 512. A8. 18 p.

[8] **Charikov Yu.E., Melnikov V.F., Kudryavtsev I.V.** Intensity and polarization of the hard X-ray radiation of solar flares at the top and footpoints of a magnetic loop // Geomagnetism and Aeronomy. 2012. Vol. 52. No. 8. P. 1021.

[9] **Чариков Ю.Е., Шабалин А.Н., Кудрявцев И.В.** Жесткое рентгеновское излучение ускоренных электронов в петельной структуре магнитного поля во время солнечных вспышек // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 4-1 (182). С. 154–165.

[10] **Krucker S., Battaglia M., Cargill P.J., et al.** Hard X-ray emission from the solar corona // The Astronomy and Astrophysics Review. 2008.

Vol. 16. Pp. 155–208.

[11] **Hanaoka Y.** Flares and plasma flow caused by interacting coronal loops// Solar Physics. 1996. Vol. 165. No. 2. Pp. 275–301.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЧАРИКОВ Юрий Евгеньевич – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры космических исследований Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, старший научный сотрудник лаборатории космических лучей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.*

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

Yuri.Charikov@mail.ioffe.ru

ГЛОБИНА Вероника Игоревна – *аспирантка сектора эволюции звезд Главной (Пулковской) астрономической обсерватории РАН.*

196140, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Пулковское шоссе, 65

gvi1109@gmail.com

ШАБАЛИН Александр Николаевич – *аспирант лаборатории космических лучей Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН;*

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

taoastronomer@gmail.ru

ЕЛФИМОВА Евгения Петровна – *студентка ИФНиТ Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

elfimovaevgeniya@gmail.com

Charikov Yu.E., Globina V.I., Shabalin A.N., Elfimova E.P. SIMULATION OF HARD X-RAY TIME DELAYS IN SOLAR FLARES.

Hard X-ray radiation (HXR) time-delays have been studied. HXR was recorded during the solar flares using the BATSE spectrometer. The time-delays energy spectra were obtained for 82 flares; the spectra were classified under three species: decreasing spectra, increasing spectra and *U*-shaped ones.

The spectra were interpreted on the basis of a model of kinetics of accelerated electrons propagating in the flaring loop with the given plasma concentration distribution and magnetic field configuration. The kinetics in question is governed by the processes of Coulomb scattering, reflecting in the converging magnetic field, and with the return current factored in. Solving the time-dependent relativistic Fokker – Planck equation for the given initial conditions allowed to find the time-dependent electron distribution function along the loop. The brightness distribution of the bremsstrahlung of HXR derived from the electron distribution functions was calculated for different photon energies along the flare loop and used to plot the time-delays spectra. The calculated data showed that decreasing time-delays spectra were tractable assuming spaces of electrons acceleration and injection were separated. The distinction between time-delays spectra from the looptop and footpoints was established.

SUN, FLARE, X-RAYS, TRANSPORT ELECTRON, TIME DELAY.

REFERENCES

[1] **M.J. Aschwanden, R.A. Schwartz, D.M. Alt,** Electron time-of-flight differences in solar flares, Astrophysical Journal. 447 (1995) 923–935.

[2] **V.J. Ashwanden, R.V. Bynum, T. Kosugi, et al.,** Electron trapping times and trap densities in solar flare loops measured with Compton and Yohkoh, Astrophysical Journal. 487 (2) (1997) 936–955.

[3] **Yu.E. Charikov, V.I. Globina, E.M. Sklyarova,** Hard X-ray time delay spectra of solar flares: BATSE spectrometer data, St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. 3 (177) (2013) 237–244.

[4] NASA database, ftp://legacy.gsfc.nasa.gov/compton/data/batse.

[5] **R.J. Hamilton, E.T. Lu, V. Petrosian,** Numerical solution of the time-depending kinetic equation for electrons in magnetized plasma, Astrophysical Journal. 354 (1990) 726–734.

[6] **S.P. Gorbikov, V.F. Melnikov,** The numerical solution of the Fokker-Planck equation for modeling of particle distribution in solar magnetic traps, Mathematical Modeling. 19 (2007) 112–122.

[7] **V.V. Zharkova, A.A. Kuznetsov, T.V. Siversky,** Diagnostics of energetic electrons with anisotropic distributions in solar flares I. Hard X-rays bremsstrahlung emission, Astronomy & Astrophysics. 512 (A8) (2010). 18 p.

[8] **Yu.E. Charikov, V.F. Melnikov, I.V. Kudryavtsev,** Intensity and polarization of the hard X-ray radiation of solar flares at the top and footpoints of a magnetic loop, Geomagnetism and Aeronomy. 52 (8) (2012) 1021.

[9] **Yu.E. Charikov, A.N. Shabalin, I.V. Kudryavtsev,** Hard X-rays in solar flaring loops from accelerated electron beams, St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics. 4-1 (182) (2013) 154–165.

[10] **S. Krucker, M. Battaglia, P.J. Cargill, et al.,** Hard X-ray emission from the solar corona, The Astronomy and Astrophysics Review. 16 (2008) 155–208.

[11] **Y. Hanaoka,** Flares and plasma flow caused by interacting coronal loops, Solar Physics. 165 (2) (1996) 275–301.

THE AUTHORS

CHARIKOV Yury E.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
Yuri.Charikov@mail.ioffe.ru

GLOBINA Veronica I.
Central Astronomical Observatory at Pulkovo
65, Pulkovskoe Sh., St. Petersburg, 196140, Russian Federation
gvi1109@gmail.com

SHABALIN Alexander N.
Ioffe Physical-Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg 194021, Russian Federation
taoastronomer@gmail.ru

ELFIMOVA Eugenia P.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
elfimovaevgeniya@gmail.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.16
УДК 530.12:517.988.38(075.8)

Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

О НАЧАЛЬНОМ СОСТОЯНИИ ВСЕЛЕННОЙ В КВАНТОВОЙ КОСМОЛОГИИ

Предложен принцип минимального возбуждения физических степеней свободы для определения начального состояния квантовой Вселенной. Рассмотрена однородная анизотропная модель Вселенной, согласно которой ее размер и параметры являются квантовыми динамическими переменными. В предположении, что размер Вселенной является радиальной переменной в конфигурационном пространстве теории, уточнено определение оператора Гамильтона Вселенной. Предложена простая экспоненциальная форма начального состояния Вселенной, для которой получена оценка ее начального размера.

МИНИМАЛЬНОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ, КВАНТОВАЯ ВСЕЛЕННАЯ, НАЧАЛЬНОЕ СОСТОЯНИЕ, АНИЗОТРОПНАЯ МОДЕЛЬ.

Введение

Согласно современным представлениям, Вселенная родилась из геометрической точки, по сути – из «ничего», и затем расширилась до огромных размеров. Эта идея возникла в классической релятивистской космологии, основанной на общей теории относительности (ОТО) Эйнштейна, как следствие решения уравнений этой теории, полученного А.А. Фридманом. Следует сразу заметить, что для классической ОТО само это решение представляет проблему, поскольку в исходной точке плотность материи оказывается бесконечной. Фридмановская модель Вселенной является сингулярной. Часто эту космологическую сингулярность сравнивают с той, которая возникает в планетарной модели атома Резерфорда, где электрон, двигаясь по круговой орбите вокруг ядра, теряет энергию на излучение электромагнитных волн и неизбежно падает на ядро. Там его энергия становится бесконечной (со знаком минус).

Как известно, эта сингулярность классической планетарной модели была преодолена с помощью квантовой теории. Сейчас такие же надежды возлагаются на квантовую теорию и в связи с проблемой космологической сингулярности. И хотя квантовый вариант ОТО (квантовая космология) еще не сформулирован в окончательном виде, предложены убедительные сценарии эволюции ранней Вселенной. При этом выделяется квантовая эпоха ее рождения из «ничего», например, в форме квантового туннелирования А. Виленкина [1], или похожим образом задается неограниченная (no-boundary) волновая функция Вселенной Хартля и Хоукинга [2].

Во втором варианте квантовая эпоха присутствует в виде границы для квазиклассического приближения волновой функции при его продолжении назад во времени [3, 4]. Однако оба варианта предсказывают вероятность начальных значений для некоторого космического скалярного поля φ, которое «управляет» последующим расширением Вселенной. Если взять скалярное поле с потенциалом $V(\varphi)$, то указанная вероятность, предсказываемая, например,

туннельным механизмом А. Виленкина, следует выражению [5]:

$$P(\varphi) = \exp\left(-\frac{3}{8\hbar G^2 V(\varphi_0)}\right), \qquad (1)$$

где G – ньютоновская гравитационная постоянная.

При этом радиус Вселенной «на выходе из тоннеля» выражается как

$$a_0(\varphi_0) = \sqrt{\frac{3}{4\pi G V(\varphi_0)}} \cong \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{GV(\varphi_0)}}. \qquad (2)$$

Следующая за этим стадия эволюции Вселенной характеризуется ее экспоненциальным расширением при медленном «скатывании» скалярного поля к его минимальному значению $\varphi = 0$. Такое расширение описывается обычно классически в рамках различных инфляционных сценариев (см., например, работу А. Линде [6]). При этом в качестве начального радиуса Вселенной берется обычно не его «туннельное» значение (2), а планковский радиус $a_0 = l_{\mathrm{Pl}}$. Впрочем, для конечного состояния Вселенной после экспоненциального расширения ее начальный размер не имеет значения.

Однако практический интерес представляет вычисление квантовых флуктуаций того же скалярного поля, которые, как считается, ответственны за наблюдаемые неоднородности крупномасштабной структуры Вселенной. Так или иначе, актуальной представляется квантовая формулировка инфляционной стадии эволюции Вселенной, особенно на начальном ее этапе, когда инфлатонное скалярное поле φ велико, а радиус Вселенной мал. Здесь мы сталкиваемся с фундаментальной проблемой квантовой космологии – отсутствием параметра времени и невозможностью вообще говорить о квантовой динамике Вселенной [7]. Для этого случая даже придуман термин «замороженная динамика» [8]. Чтобы «разморозить» динамику, следует либо модифицировать квантовую ОТО, либо воспользоваться каким-либо физически обоснованным приближением для введения космического параметра времени.

В качестве космического времени на инфляционной стадии в режиме медленного «скатывания» инфлатонного скалярного поля φ с потенциалом

$$V(\varphi) = \mu\varphi^4/4$$

в работе [9] предложено рассматривать само это поле (точнее, логарифм от него, $t \sim \ln(\varphi/\varphi_0)$, где φ_0 – его начальное значение).

В этом режиме волновое уравнение квантовой космологии – уравнение Уиллера – Де Витта (УДВ) [7, 8] (рассматривается однородная модель Вселенной) принимает вид уравнения Шредингера с указанным космическим параметром времени, а радиус Вселенной a является квантовой динамической переменной, которая описывается волновой функцией $\psi(t, a)$.

Теперь возникает необходимость задания начального состояния Вселенной при $t = 0$ ($\varphi = \varphi_0$). В работе [9] областью определения масштабного параметра a считается вся вещественная ось (включая отрицательные значения). Соответственно этому выбран способ упорядочения некоммутирующих операторных множителей в уравнении УДВ, а в качестве начального состояния Вселенной выбирается гауссов волновой пакет. Именно в этом месте, на границе между квантовой эрой рождения Вселенной и инфляционной стадией ее экспоненциального расширения, мы считаем необходимым уточнить определение начального состояния Вселенной.

Прежде всего, мы ограничим область определения масштабного фактора: $a \in [0, \infty)$, считая его радиальной переменной в геометрическом секторе конфигурационного пространства Вселенной (суперпространства). Сообразно этому должно выбираться упорядочение в уравнении УДВ. В выборе этого упорядочения и соответствующей меры интегрирования на суперпространстве мы будем ориентироваться на гиперболическую структуру уравнения УДВ для несколько расширенной анизотропной модели Вселенной (модель «перемешанного мира») [8]. Начальное состояние Вселенной в данной работе определим как состояние минимального возбуждения всех ее физических степеней свободы, к которым относим и параметры анизотропии. Для этого используем принцип минимума

энергии этих возбуждений.

Обобщение понятия энергии в ОТО, которое было представлено Эдвардом Виттеном в виде положительно определенного функционала для случая островного распределения масс с асимптотически плоской геометрией пространства-времени [10, 11], для случая замкнутой Вселенной дано в работе [12].

В данной работе также рассматривается однородная модель Вселенной, но максимально упрощенная, которая вообще не учитывает других физических степеней свободы, кроме инфлатонного скалярного поля. В этом случае принцип минимума сводится к таковому для ее начального объема. Взяв в качестве дополнительных условий средние значения квантовых уравнений связей общей теории относительности, мы приходим к условному принципу экстремума для определения начального состояния Вселенной.

Каноническое квантование однородной анизотропной модели Вселенной

Мы начнем рассмотрение с однородной анизотропной модели Вселенной (модель «перемешанного мира» [8]), в которой 3D-метрика пространственного сечения параметризуется следующим образом:

$$dl^2 = a^2 e^{\beta_k} (\sigma^k)^2, \tag{3}$$

где

$$\begin{aligned} \sigma^1 &= \cos\psi d\theta + \sin\psi \sin\theta d\varphi, \\ \sigma^2 &= \sin\psi d\theta - \cos\psi \sin\theta d\varphi, \\ \sigma^3 &= d\psi + \cos\theta d\varphi \end{aligned} \tag{4}$$

— это дуальные 1-формы группы вращений SO (3);

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \beta_+ + \sqrt{3}\beta_-, \\ \beta_2 &= \beta_+ - \sqrt{3}\beta_-, \\ \beta_3 &= -2\beta_+. \end{aligned} \tag{5}$$

Таким образом, пространственная 3D-геометрия Вселенной в выделенной системе сферических координат с угловыми переменными (ψ, θ, φ) описывается двумя независимыми динамическими переменными: (β_+, β_-), ровно столько независимых степеней свободы 3D-геометрии (в расчете на одну точку пространства) насчитывается в общем случае [8].

Единственная остающаяся в этой модели гамильтонова связь H (супергамильтониан), определяющая ее динамику, имеет вид:

$$H = H_a - H_{\beta\varphi}, \tag{6}$$

$$2H_a \equiv \frac{gp_a^2}{a} + \frac{a}{g}, \tag{7}$$

$$2H_{\beta\varphi} \equiv \frac{p_+^2 + p_-^2}{a^3} + aV(\beta_+, \beta_-) + 2a^3 V(\varphi). \tag{8}$$

Вторая составляющая гамильтониана (8) отвечает физическим степеням свободы модели (параметрам анизотропии), в нее мы включили также потенциальную энергию инфлатонного скалярного поля. Потенциальная энергия анизотропии $V(\beta_+, \beta_-)$ имеет сложный вид [8], однако, имея в виду задачу определения начального состояния Вселенной, ограничимся для нее гармоническим приближением:

$$V(\beta_+, \beta_-) \cong 8(\beta_+^2 + \beta_-^2). \tag{9}$$

Каноническое квантование модели сводится к замене канонических импульсов в выражениях (7) и (8) соответствующими операторами:

$$p_a \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial a},\ p_\pm \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \beta_\pm}. \tag{10}$$

Проблема упорядочения заключается в том, что в выражении (7) эта замена может быть выполнена разными способами. Для того чтобы остановиться на определенном выборе порядка операторных множителей, мы здесь просто реализуем представление о том, что масштабный фактор a является радиальной переменной в конфигурационном пространстве модели $q^i \equiv (a, \beta_+, \beta_-)$, которое оснащено метрической структурой, определяемой квадратичной формой импульсов в супергамильтониане (6):

$$G^{ij} p_i p_j \equiv \frac{1}{a} p_a^2 - \frac{1}{a^3} p_+^2 - \frac{1}{a^3} p_-^2. \tag{11}$$

Ковариантные составляющие метрики Де Витта образуют диагональную матрицу

$$G_{ij} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a^3 & 0 \\ 0 & 0 & a^3 \end{pmatrix}. \qquad (12)$$

При квантовании квадратичную форму импульсов (11) мы заменим ковариантным оператором Бельтрами – Лапласа:

$$\frac{1}{\sqrt{G}} \frac{\partial}{\partial q^i} \sqrt{G} G^{ij} \frac{\partial}{\partial q^j}, \qquad (13)$$

где $G \equiv \det G_{ij}$.

В данном случае этот оператор «кинетической энергии» имеет вид:

$$-a^{-7/2} \frac{\partial}{\partial a} a^{5/2} \frac{\partial}{\partial a} + \frac{1}{a^3} \left(\frac{\partial}{\partial \beta_+^2} + \frac{\partial}{\partial \beta_-^2} \right). \qquad (14)$$

Первое слагаемое в сумме (14) – «радиальная» часть кинетической энергии – аналогична соответствующей радиальной части для электрона в квантовой механике [13]:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r}. \qquad (15)$$

При этом фиксируется мера интегрирования в конфигурационном пространстве модели:

$$a^{7/2} da d\beta_+ d\beta_-. \qquad (16)$$

Начальное состояние минимального возбуждения Вселенной

Если принять квазиклассическое приближение для описания инфляционной стадии экспоненциального расширения Вселенной [9], в котором роль космического параметра времени играет инфлатонное скалярное поле φ, то следующим вопросом будет задание начального состояния Вселенной, соответствующего максимальному начальному значению этого поля φ_0. В работе [9] часть оператора кинетической энергии, отвечающая масштабному фактору a, определяется следующим образом:

$$\frac{1}{\sqrt{a}} \frac{\partial}{\partial a} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{\partial}{\partial a}, \qquad (17)$$

а вместо масштабного фактора вводится новая переменная $x = a^{3/2}$ с (произвольно расширенной) областью определения $x \in (-\infty, +\infty)$. Тогда в качестве начального состояния выбирается гауссов волновой пакет с центром $x = 0$ ($a = 0$). Возбуждения других физических степеней свободы (в рассматриваемой модели это параметры анизотропии $\beta_\pm$), кроме масштабного фактора a, не учитываются. Такой выбор начального состояния является естественным для подобного рода задач квантовой механики, но все же он произволен. В данной работе будем придерживаться традиционной трактовки масштабного фактора a как радиальной переменной в геометрическом секторе конфигурационного пространства с соответствующим этому выбору упорядочением (14), а для определения начального состояния Вселенной введем принцип его минимального возбуждения. Такое состояние можно назвать основным, или вакуумным.

В динамической структуре ОТО, в случае замкнутой Вселенной, существует мера возбуждения ее физических степеней свободы, аналогичная положительно определенному функционалу энергии [10] в асимптотически плоской геометрии пространства времени. Такой мерой служит минимальное собственное значение некоторого 3D-оператора Дирака, определенного на пространственном сечении Вселенной [12]. В случае однородной анизотропной модели Вселенной, рассматриваемой в данной работе, квадрат этого собственного значения равен положительной части H_a супергамильтониана H. После квантования эта величина становится положительно определенным оператором:

$$\hat{H}_a \equiv \frac{1}{2} \left[-\hbar^2 g a^{-7/2} \frac{\partial}{\partial a} a^{5/2} \frac{\partial}{\partial a} + \frac{a}{g} \right]. \qquad (18)$$

В качестве аналога основного состояния электрона в квантовой механике, которое можно найти из условия минимума его средней энергии, определим (в нашем случае) начальное состояние минимального возбуждения Вселенной условием минимума среднего значения оператора (18) на пространстве волновых функций $\psi(a, \beta_+, \beta_-)$. Это начальное состояние действительно будет отвечать минимальному возбуждению физических степеней свободы $\beta_\pm$, если учесть дополнительное условие

связи (равенство нулю супергамильтониана в классической ОТО, т. е. $H = 0$). В предлагаемой нами квантовой теории начального состояния Вселенной это дополнительное условие выразим в виде равенства нулю среднего значения оператора супергамильтониана. Таким образом, мы приходим к определению начального состояния Вселенной с помощью условного принципа экстремума:

$$\frac{\langle\psi|\hat{H}_a|\psi\rangle}{\langle\psi||\psi\rangle} + \lambda\langle\psi|(\hat{H}_a - \hat{H}_{\beta\varphi})|\psi\rangle, \quad (19)$$

где λ – неопределенный множитель Лагранжа.

Если еще больше упростить модель, исключив из рассмотрения физические степени свободы анизотропии $\beta_\pm$ в выражении (8), искомое начальное состояние будет состоянием минимального среднего объема.

Оценим этот минимальный объем Вселенной в начальном состоянии, взяв простую пробную функцию вида

$$\psi_0(a) = e^{-\sqrt{\mu a}}, \quad (20)$$

с единственным вариационным параметром $\mu = a_0^{-1}$, где a_0 – искомый минимальный радиус.

Для определения единственного параметра μ в данном случае достаточно решить слабое операторное уравнение связи:

$$\langle\psi_0|(\hat{H}_a - \hat{H}_{\beta\varphi})|\psi_0\rangle = 0. \quad (21)$$

Функция (20) подобрана таким образом, что все интегралы, возникающие в среднем значении (21), могут быть вычислены точно. Например, среднее значение объема Вселенной в этом состоянии равно

$$\langle a^3\rangle = \int_0^\infty a^3 e^{-2\sqrt{\mu a}} a^{7/2} da = \frac{2\cdot 14!}{\mu^{15/2}2^{15}}, \quad (22)$$

а уравнение (21) сводится к степенному уравнению для μ:

$$\frac{\hbar^2 g 4!}{\mu^{3/2}2^6} + \frac{2\cdot 10!}{g\mu^{11/2}2^{10}} - \frac{8V(\varphi_0)\cdot 14!}{\mu^{15/2}2^{15}} = 0. \quad (23)$$

Корень этого уравнения найдем приближенно, считая $a_0 >> l_{\text{Pl}}$. В этом случае можно отбросить первое слагаемое в уравнении (23) и найти корень:

$$a_0 \cong \frac{1}{40}\frac{1}{\sqrt{GV(\varphi_0)}}. \quad (24)$$

Сравнивая полученное выражение с выражением (2), видим, что радиус Вселенной в предлагаемой здесь модели начального состояния примерно в 20 раз меньше, чем «туннельный» в теории А. Виленкина.

Пробная функция начального состояния (20) так же, как и соответствующий ей начальный радиус Вселенной (24), являются приближенными решениями вариационной задачи (19). В этом начальном состоянии мы не учли также энергию нулевых колебаний полей материи и параметров анизотропии.

Заключение

Таким образом, если мы принимаем инфляционный сценарий расширения Вселенной, который начинается с ее микроскопически малых размеров, отвечающих бо́льшим начальным значениям инфлатонного скалярного поля, то последнее можно рассматривать в качестве классического параметра времени в последующей квантовой динамике Вселенной. Геометрический размер Вселенной в этой динамике описывается квантовомеханически с помощью волнового уравнения Шредингера. В данной работе уточнена структура этого волнового уравнения в предположении, что радиус Вселенной является радиальной переменной в конфигурационном пространстве теории.

Сформулирован также вариационный принцип минимального возбуждения физических степеней свободы для определения начального состояния Вселенной. В основу вариационной теории начального состояния Вселенной положено понятие энергии замкнутой Вселенной, предложенное ранее по аналогии с виттеновским определением энергии для островной Вселенной с асимптотически плоской геометрией пространства-времени.

Для простейшей однородной модели Вселенной в пренебрежении энергией нулевых колебаний физических степеней свободы получена оценка радиуса Вселенной в начальном состоянии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Vilenkin A**. Creation of Universe from nothing // Phys. Lett. 1982. Vol. B117. No. 1-2. Pp. 25–28.

[2] **Hartle J.B., Hawking S.W.** Wave function the Universe // Phys. Rev. 1983. Vol. D28. P. 2960.

[3] **Hartle J.B., Hawking S.W., Hertog T.** The no-boundary measure of the Universe. arXiv: 0711.4630v4 [hep-th], 8 June 2008.

[4] **Hartle J.B., Hawking S.W., Hertog T.** The classical Universe of the no-boundary quantum state. Available at: arXiv: 0803.1663v1 [hep-th]. March 11, 2008.

[5] **Vilenkin A.** Quantum creation of Universe // Phys. Rev. 1984. Vol. D30. Pp. 509–511.

[6] **Linde A.D.** Eternal chaotic inflation // Lett. Nuovo Cimento. 1984. Vol. 39. Pp. 401.

[7] **Halliwell J.J.** The interpretation of quantum cosmological models. Available at: arXiv: gr-qc/9208001v1, 5 Aug. 1992.

[8] **Мизнер Ч., Торн К., Уилер Дж.** Гравитация. Т. 2. М.: Мир, 1977, 525 с.

[9] **Hosoya A.** Cosmic time gauge in quantum cosmology and chaotic inflation model. FERMI-LAB-Conf-86/101-T.

[10] **Witten E.A.** A mechanism of supersymmetric. Preprint Princeton University, 1981.

[11] **Фаддеев Л.Д.** Проблема энергии в теории Эйнштейна // УФН. 1982. Т. 136. Вып. 3. С. 435–457.

[12] **Лукьяненко А.С.** Продольные гравитационные поля в ОТО // Доклады АН. 1986. Т. 289. Вып. 3. С. 579–583.

[13] **Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.** Квантовая механика. 1974. М.: Наука, 752 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОРОБЕЙ Наталья Николаевна – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

n.gorobey@mail.ru

ЛУКЬЯНЕНКО Александр Сергеевич – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

alex.lukyan@rambler.ru

Gorobey N.N., Lukyanenko A.S. ON THE UNIVERSE INITIAL STATE IN QUANTUM COSMOLOGY.

The article deals with the problem of an initial state of quantum inflationary Universe. Considering the dynamics of the inflation scalar field at the beginning of the inflation stage in the context of semi-classical approximation, we have identified this field with a cosmic time parameter. The early Universe state was defined as an initial value of the inflation field. Other degrees of the Universe freedom, including the scale factor, are treated within the scope of the quantum theory. Then, the initial state of quantum degrees of freedom at the beginning of the inflation must be defined, as well. A principle of the least excitation of physical degrees of freedom for the Universe has been proposed to determine the initial state of the quantum Universe. A uniform anisotropic model of the Universe was considered where its size and the anisotropic parameters were quantum dynamical variables. On the assumption that the Universe size is a radial variable in the configuration space of the theory the definition of the Hamiltonian of the Universe is rendered more precise. A simple exponential form of the Universe initial state is suggested and the Universe initial size being estimated for this form.

MINIMAL EXCITATION, QUANTUM UNIVERSE, INITIAL STATE, ANISOTROPIC MODEL.

REFERENCES

[1] **A. Vilenkin.** Creation of Universe from nothing, Phys. Lett., B117 (1-2) (1982) 25–28.

[2] **J.B. Hartle, S.W. Hawking.** Wave function the Universe, Phys. Rev. D28 (1983) 2960.

[3] **J.B. Hartle, S.W. Hawking, T. Hertog,** The no-boundary measure of the Universe. arXiv: 0711.4630v4 [hep-th], 8 June 2008.

[4] **J.B. Hartle, S.W. Hawking, T. Hertog,** The classical Universe of the no-boundary quantum state. arXiv: 0803.1663v1 [hep-th], 11 March 2008.

[5] **A. Vilenkin,** Quantum creation of Universe, Phys. Rev., D30 (1984) 509–511.

[6] **A.D. Linde,** Eternal chaotic inflation, Lett. Nuovo Cimento, 39 (1984) 401.

[7] **J.J. Halliwell,** The interpretation of quantum cosmological models. arXiv: gr-qc/9208001v1, 5 Aug. 1992.

[8] **Ch.W. Misner, K.S. Thorne, J.A. Wheeler,** Gravitation, San Francisco, 1973.

[9] **A. Hosoya,** Cosmic time gauge in quantum cosmology and chaotic inflation model, FERMILAB-Conf-86/101-T.

[10] **E.A. Witten,** A mechanism of supersymmetric, Preprint Princeton University, 1981.

[11] **L.D. Faddeev,** The energy problem in Einstein's theory of gravitation, Physics-Uspekhi, 25 (3) (1982) 130–142.

[12] **A.S. Lukyanenko,** Lengthwise gravitation fields in general relativity theory, Doklady Physics (Doklady Akademii Nauk) 289 (3) (1986) 579–583.

[13] **L.D. Landau, E.M. Lifshitz,** Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory (3rd ed.), 1977, Pergamon Press.

THE AUTHORS

GOROBEY Natalia N.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
n.gorobey@mail.ru

LUKYANENKO Alexander S.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
alex.lukyan@rambler.ru

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

DOI: 10.5862/JPM.218.17
УДК 538.911; 539.1.03

Р.Г. Полозков[1], В.К. Иванов[1],
Г.Б. Сушко[2], А.В. Король[2,3], А.В. Соловьев[2]

[1]Санкт-Петербургский политехнический университет
Петра Великого, Российская Федерация;
[2]Научно-исследовательский центр мезобионаносистем (MBN),
Франкфурт-на-Майне, Германия;
[3]Санкт-Петербургский государственный морской университет,
Российская Федерация

КАНАЛИРОВАНИЕ УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКИХ ПОЗИТРОНОВ В ИЗОГНУТЫХ КРИСТАЛЛАХ АЛМАЗА

В работе представлены результаты численного моделирования процесса каналирования ультрарелятивистских позитронов в прямых и изогнутых кристаллах алмаза. Траектории заряженных частиц внутри кристаллов вычислены с использованием недавно разработанного модуля пакета прикладных программ – MBN Explorer package. Получены параметры каналирования и спектры излучения позитронов, падающих с энергией 855 МэВ вдоль кристаллографической плоскости (110) для различных радиусов кривизны кристалла.

УЛЬТРАРЕЛЯТИВИСТСКИЙ ПОЗИТРОН, ИЗОГНУТЫЙ КРИСТАЛЛ АЛМАЗА, КАНАЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ, СПЕКТР ИЗЛУЧЕНИЯ.

Введение

Процессы взаимодействия заряженных частиц с веществом, в частности с кристаллами, уже многие годы являются предметом исследования как экспериментаторов, так и теоретиков. Особое внимание уделяется процессу каналирования частиц, когда заряженные частицы под влиянием электростатического поля атомов решетки могут пробегать значительные расстояния вдоль кристаллографических плоскостей или осей [3]. При этом траектории движения положительно заряженных частиц обычно сосредоточены в межатомной области, поскольку поле ионов для них имеет отталкивающий характер, в то время как отрицательно заряженные частицы двигаются вдоль ионных цепочек. Стабильность движения частиц вдоль каналов определяется малым значением энергии поперечного движения, не превышающим высоты электростатического барьера.

Каналирование может также происходить в изогнутых кристаллах, и это явление используется для поворота релятивистских пучков ускоренных частиц. Стабильность движения в таком искривленном канале достигается при дополнительном условии, согласно которому радиус кривизны R должен значительно превышать критическую величину R_c [4].

Захваченная в канал частица испытывает осцилляции в плоскости, поперечной направлению ее распространения, что приводит к так называемому излучению при каналировании [5]. Интенсивность этого излучения зависит от энергии частицы, от типа кристалла и от расположения кристаллографической плоскости или оси. Появление такого излучения при каналировании частиц в прямых кристаллах достаточно хорошо изучено (см., например, работы [6 – 13]).

При каналировании в искривленном кристалле, помимо поперечных осцилляций, происходит движение частицы вдоль изогнутой центральной линии канала. Последнее приводит к излучению синхротронного типа [14 – 20]. Поэтому полный

спектр излучения, который формируется заряженной ультрарелятивистской частицей, содержит особенности как его каналирующей, так и синхротронной составляющих излучения. Условие стабильного каналирования $R >> R_c$ [4, 21] соответствует тому, что радиус кривизны кристалла значительно больше радиуса кривизны осцилляционного движения в канале. Поэтому синхротронное излучение вносит вклад в низкочастотную часть спектра, тогда как осцилляции определяют его высокочастотную часть.

Исследование синхротронного излучения представляет большой интерес в связи с концепцией кристаллического ондулятора [22, 23]. Создание такого ондулятора может привести к новому источнику монохроматического излучения в диапазоне энергий от сотен кэВ до 1 – 10 ГэВ. Интенсивность и характерные частоты излучения могут быть различными в зависимости от типа и энергии каналирующих частиц, от вида кристалла и параметров периодически искривленного канала (подробнее см. обзор [23]).

В связи с этим в последние годы в ряде лабораторий проводятся эксперименты по измерению параметров каналирования и характеристик спектров излучения ультрарелятивистских позитронов [24 – 26] и электронов [27, 28]. Кристаллические ондуляторы, созданные на основе суперрешеток $Si_{1-x}Ge_x$ и используемые в экспериментах, изготавливаются методами молекулярной эпитаксии [29, 30]. Планируется также создание ондуляторов на основе кристаллов алмаза.

Теоретическую поддержку проводимых и планируемых экспериментов следует обеспечивать на основе процедуры, которая бы позволяла моделировать траектории частиц внутри кристалла как в каналирующем, так и надбарьерном режимах. Недавно созданный на основе молекулярной динамики универсальный пакет программ MBN Explorer [2] позволяет рассчитывать траектории заряженных частиц в различных упорядоченных и аморфных средах. Пакет прошел проверку путем сравнения полученных результатов по каналированию электронов и позитронов в прямых кристаллах Si(110) и аморфном кремнии с имеющимися экспериментальными данными и с расчетами, проведенными в рамках других теоретических моделей [1]. Развитая методика вычисления недавно была использована для моделирования процесса каналирования электронов и позитронов в изогнутых и периодически изогнутых каналах Si(110) и Si(111) [31–33].

Целью настоящей работы является теоретический анализ процесса каналирования высокоэнергичных позитронов в прямых и изогнутых кристаллах алмаза C(110). С использованием пакета MBN Explorer вычислены параметры каналирования и спектры излучения для пучка позитронов с энергией E = 855 МэВ и для разных радиусов кривизны кристалла.

Моделирование процесса каналирования

Для получения трехмерных траекторий движения частиц в кристаллической среде используется молекулярная динамика, реализуемая в пакете MBN Explorer [2]. Однако стандартный молекулярно-динамический алгоритм был дополнен двумя особенностями [1], относящимися к задаче каналирования. Во-первых, для описания движения частиц больших энергий были использованы релятивистские уравнения движения. Во-вторых, при пошаговом построении траектории осуществлялось динамическое моделирование кристаллической среды. Ниже будет дано пояснение только к основным моментам этой процедуры. Более детальное описание представлено в работе [1].

В рамках классической механики движение со скоростью $\mathbf{v}$ ультрарелятивистской частицы с зарядом q и массой m во внешнем электростатическом поле $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ описывается уравнением

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} = q\mathbf{E}, \qquad (1)$$

где $\mathbf{p} = m\gamma\mathbf{v}$ – релятивистский импульс, причем $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$,

$$\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} = \varepsilon/mc^2 >> 1$$

– так называемый лоренц-фактор, ε – энергия частицы, c – скорость света.

Уравнение (1) решается при $t \geq 0$ и на-

чальных условиях на входе частицы в кристалл: $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0$ и $\mathbf{v}(0) = \mathbf{v}_0$.

Электростатическое поле вычисляется как градиент потенциала

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}},$$

где электростатический потенциал $U(\mathbf{r})$ рассматривается как сумма атомных потенциалов

$$U(\mathbf{r}) = \sum_j U_{at}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \qquad (2)$$

причем $\mathbf{R}_j$ – радиус-вектор j-го атома, U_{at} – атомный потенциал, который рассматривается в приближении Мольера [34].

Формально сумма в уравнении (2) вычисляется по всем атомам кристалла. Однако с учетом быстрого падения величины атомного потенциала на расстояниях

$$\rho_j = \left|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j\right| >> a_{\mathrm{TF}}$$

от ядра (томас-фермиевский радиус a_{TF} взят для оценки среднего атомного радиуса), удобно ввести радиус обрезания $\rho_{\max}$, за пределами которого вкладом потенциала можно пренебречь. В связи с этим, для произвольного положения частицы $\mathbf{r}$ сумму в равенстве (2) можно ограничить количеством атомов, попадающих в сферу радиуса $\rho_{\max}$, а это существенно ускоряет вычисления.

Вычисление координат атомов, попадающих внутрь сферы $\rho_{\max}$, выполняется с помощью следующего алгоритма [1]. Рассмотрим каналирование вдоль кристаллографической плоскости с индексами Миллера (klm). На первом шаге кристаллическая решетка конструируется в пространственном ящике объемом $L_x \times L_y \times L_z$, линейные размеры которого выбираются произвольно. Пусть ось z ориентирована вдоль направления пучка налетающих частиц и параллельна плоскости (klm), тогда как ось y направлена перпендикулярно к этой плоскости. Радиус-векторы $\mathbf{R}_j^{(0)}(0)$ узлов решетки (j = 1, 2, ..., N) генерируются в соответствии с типом ячейки Браве кристалла с использованием предопределенных трансляционных векторов. Как только узловые точки определены, радиус-векторы атомных ядер находятся с учетом среднего смещения $\mathbf{\Delta}_j$ от положения узлов вследствие температурных колебаний. При этом декартовы компоненты смещения $\Delta_{j\alpha}$ ($\alpha = x, y, z$) определяются нормальным распределением:

$$w(\Delta_{j\alpha}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi u_T^2}} \exp\left(-\frac{\Delta_{j\alpha}^2}{2u_T^2}\right), \qquad (3)$$

где u_T – среднеквадратичная амплитуда тепловых колебаний атомов. Значения u_T для различных кристаллов при комнатной температуре приведены в работе [35].

Решение уравнения (1) с помощью указанной выше программы начинается в момент времени $t = 0$, когда частица (позитрон) входит в кристалл при $z = 0$. Начальные значения x_0, y_0 поперечных координат выбираются случайным образом в интервалах $\Delta x = 2d$, $\Delta y = d$, где d – межплоскостное расстояние. Начальная скорость $\mathbf{v}_0 = (v_{0x}; v_{0y}; v_{0z})$ преимущественно ориентирована вдоль оси z, т. е. выполняется условие

$$v_{0z} \sim c >> v_{0x}; v_{0y}.$$

Перпендикулярные компоненты начальной скорости v_{0x}; v_{0y} выбираются на входе в кристалл с учетом направления и расходимости пучка.

Для получения траектории в кристалле конечной длины L используется следующая процедура. Частица движется внутри смоделированного ящика, взаимодействуя с атомами внутри сферы обрезания. Как только расстояние, пройденное частицей, достигает границы сферы обрезания $l \sim \rho_{\max}$, формируется новый пространственный ящик того же размера, как предыдущий, центр которого примерно совпадает с координатами нахождения частицы. Чтобы обеспечить непрерывность и согласованность действия сил $q\mathbf{E}$, положение атомов в области пересечения объемов предыдущего и нового ящиков не изменяется. В остальной части нового ящика положение атомов заново формируется по описанной выше схеме.

Для рассмотрения движения частицы в изогнутых кристаллах, в построенных ящиках старые координаты узлов (x, y, z) трансформируются в новые (x', y', z') по следующему правилу:

$$\begin{cases} x' = x; \\ y' = y + \delta y(z); \\ z' = z, \end{cases} \quad (4)$$

где параметр

$$\delta y(z) = R - \sqrt{R^2 - z^2} \approx \frac{z^2}{2R} \quad (5)$$

определяет форму изогнутого кристалла. Последнее уравнение справедливо, когда радиус кривизны существенно больше длины кристалла, т. е. $z \le L << R$.

Каналирование в изогнутом кристалле возможно, если центробежная сила $F_{cf} = \rho v/R \approx \varepsilon/R$ меньше максимальной силы $F_{\max}$, возникающей от межплоскостного потенциала [4]. Для количественной характеристики этого условия часто вводят параметр кривизны C:

$$C = \frac{F_{cf}}{F_{\max}} = \frac{\varepsilon}{RF_{\max}}. \quad (6)$$

Для прямого кристалла $C = 0$. Значение $C = 1$ соответствует критическому (минимальному) радиусу кривизны $R_c = \varepsilon/F_{\max}$, при котором потенциальный барьер между каналами исчезает [4]. Значение максимальной силы $F_{\max}$ можно оценить в рамках модели непрерывного межплоскостного потенциала [3]. Для канала (110) в алмазе эта оценка дает значение $F_{\max} \approx 7$ ГэВ/см при комнатной температуре [21].

Радиационное излучение при каналировании

По полученным траекториям заряженных частиц в прямых и изогнутых кристаллах можно получить спектральное распределение излучения. Так, для набора из N_0 траекторий спектральное распределение излучения, испущенного в конус $\theta \le \theta_0$ вдоль первоначального направления пучка, определяется по формуле

$$\frac{dE(\theta \le \theta_0)}{\hbar d\omega} = \frac{1}{N_0} \sum_{j=1}^{N_0} \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_0} \left(\frac{d^3 E_j}{\hbar d\omega d\Omega} \right) d\Omega, \quad (7)$$

где $d^3E_j/\hbar d\omega d\Omega$ – спектрально-угловое распределение излучения, испущенного частицей, движущейся по j-й траектории. Суммирование проводится по всем вычисленным траекториям и учитывает вклад в спектр как каналирующих, так и не каналирующих частиц, которые выходят из канала вследствие рассеяния на атомах кристалла.

Для вычисления подынтегрального выражения $\left(\frac{d^3 E_j}{\hbar d\omega d\Omega} \right)$ В.Н. Байер и В.М. Катков развили квазиклассические приближение, детали которого можно найти в работе [34]. Такое приближение применимо во всем диапазоне энергий испускаемых фотонов, за исключением предельно высокоэнергетического «хвоста» спектра, где

$$\frac{(\varepsilon - \hbar\omega)}{\varepsilon} << 1.$$

В рамках квазиклассического приближения спектральное распределение энергии, которая излучается ультрарелятивистской частицей в направлении n, определяется следующим выражением [34]:

$$\frac{d^3 E_j}{\hbar d\omega d\Omega} = \alpha \frac{q^2 \omega^2}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 e^{i\omega'(\psi(t_2) - \psi(t_1))} \times \\ \times \left[(1 + (1 + u^2)) \left(\frac{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2}{c^2} - 1 \right) + \frac{u^2}{\gamma^2} \right], \quad (8)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ – постоянная тонкой структуры, q – заряд частицы в единицах элементарного заряда, $\mathbf{v}_{1,2} = \mathbf{v}(t_{1,2})$ – скорости частицы в моменты времени $t_{1,2}$, $\psi(t) = t - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}(t)/c$ – фазовая функция.

Величины ω' и u учитывают радиационную отдачу:

$$\omega' = (1 + u)\omega, \quad u = \frac{\hbar\omega}{\varepsilon\hbar\omega}.$$

В классическом пределе имеем

$$u \approx \hbar\omega/\varepsilon \to 0, \quad \omega' \to \omega,$$

и формула (8) переходит в известную формулу классической электродинамики [19, 20].

Уравнение (8) позволяет вычислять спектр излучения для каждой траектории, симулированной в рамках алгоритма, описанного выше. В настоящей работе вычисления проводились для кристалла алмаза длиной $L = 25$ мкм, излучение интегрировалось по углу $\theta_0 = 2{,}4$ мрад, существенно превышающему естественный эмиссионный угол $\gamma^{-1} \sim 0{,}6$ мрад.

Каналирование и эмиссионные спектры позитронов в алмазе C(110)

Универсальный пакет программ MBN Explorer использовался для вычисления траектории позитронов с энергией 855 МэВ, падающих на прямые и изогнутые кристаллы алмаза длиной $L = 25$ мкм вдоль кристаллографической плоскости (110). С целью набора статистики для каждого значения радиуса кривизны R вычислялось несколько тысяч траекторий.

Полученные траектории анализировались для определения различных характеристик каналирующих частиц и для вычисления спектра излучения. Параметры каналирования, определенные в работе [1], представлены в таблице.

Несмотря на то условие, что изначально пучок позитронов направляется вдоль плоскости (110), не все частицы на входе в кристалл захватываются в режим каналирования. Каналирующими считаются лишь частицы, испытывающие, по крайней мере, одно полное колебание в направлении, перпендикулярном оси канала. Анализ вычисленных траекторий позволяет найти параметр захвата A, который определяется как отношение числа частиц N_{acc}, захваченных в канал на входе в кристалл, к полному числу падающих частиц N_0:

$$A = \frac{N_{acc}}{N_0}. \qquad (9)$$

Как видно из данных таблицы, параметр захвата весьма близок к единице для случаев прямого и слабоизогнутых кристаллов, но затем с ростом кривизны канала он падает весьма быстро. Для $R = 0{,}8$ см только 23 % налетающих позитронов захватывается в канал. Заметим, что критический радиус для указанной энергии позитронов составляет 0,12 см.

Другие параметры, приведенные в таблице, характеризуют так называемую длину деканалирования [1], т. е. среднее расстояние, проходимое позитроном в режиме каналирования. Параметр L_p определяется как среднее расстояние, пробегаемое захваченной частицей в канале от момента входа в кристалл до момента вылета из канала. Другими словами, усреднение происходит по расстоянию, преодолеваемому захваченной частицей в первом сегменте каналирования. Из представленных результатов видно, что для прямого кристалла это расстояние лишь немного меньше длины кристалла. Это означает, что позитрон, захваченный в канал на входе, пробегает практически весь кристалл, находясь в одном канале. С ростом кривизны кристалла вплоть до значения $C = 0{,}1$ величина L_p практически не меняется, а с дальнейшим ростом параметра C она уменьшается. Заметим, что приведенная статистическая погрешность, обусловленная конечным значением числа N_0 симулированных траекторий, соответствует доверительной вероятности, равной 0,999.

Таблица

Значения параметров, характеризующих каналирование пучка позитронов с энергией 855 МэВ вдоль плоскости (110) в алмазе

C	R, см	N_0	A	L_p, мкм	L_{ch}, мкм
0,00	∞	2253	0,95	24,5 ± 0,4	23,8 ± 0,4
0,05	2,440	2271	0,92	24,6 ± 0,4	22,7 ± 0,4
0,08	1,530	2260	0,89	24,6 ± 0,4	22,1 ± 0,4
0,10	1,220	2272	0,89	24,6 ± 0,4	21,9 ± 0,4
0,30	0,407	3446	0,70	23,6 ± 0,4	16,5 ± 0,6
0,50	0,244	3891	0,50	22,6 ± 0,5	11,3 ± 0,7
0,80	0,153	6688	0,23	19,4 ± 0,7	4,4 ± 0,5

Обозначения: C, R – параметр и радиус кривизны, соответственно; N_0 – число траекторий; A – параметр захвата; L_p, L_{ch} – средние значения длины деканалирования по первому сегменту и каналирования по всем траекториям, соответственно.

Столкновения частицы с атомами кристалла могут приводить также к процессу, обратному деканалированию. Действительно, в результате столкновения поперечная энергия надбарьерной частицы может уменьшиться на величину, достаточную для захвата частицы в канал. Такой процесс называется реканалированием.

Частица, вылетевшая из канала за счет столкновений, либо просто теряется как каналирующая, либо может быть захвачена в другой канал и продолжить распространение вдоль следующего канала. Последний процесс также называется реканалированием. Поэтому часто вводят еще одну длину деканалирования, которую получают усреднением по всем сегментам каналирования [1]. Однако в силу малой длины кристалла процесс реканалирования дает небольшой вклад и практически не влияет на среднюю длину пробега частицы в канале.

Более общим является параметр L_{ch}, который определяет длину деканалирования позитрона, усредненную по всем траекториям налетающих частиц. Эта величина достаточно быстро уменьшается с ростом значения C, причем за счет двух факторов: падения числа частиц, захваченных в канал, и уменьшения длины деканалирования L_p.

Полученные траектории заряженных частиц позволяют по формулам (7), (8) вычислить спектр их излучения. Результирующие спектры излучения, полученные усреднением по всем вычисленным траекториям, представлены на рис. 1 и 2.

Следует отметить две особенности, которые проявляются в спектрах излучения.

Максимумы кривых в окрестности 3 – 4 МэВ связаны с излучением каналирующих позитронов, которые испытывают поперечные осцилляции при распространении в канале. В этой области частот основной вклад в спектр вносят сегменты траекторий частицы, движущейся в одном канале, причем интенсивность излучения пропорциональна длине такого сегмента. Для случая прямого кристалла (кривая *1*) максимум имеет наибольшее значение, однако с увеличением кривизны кристалла его величина становится меньше. Уменьшение длины деканалирования L_p и параметра захвата A с ростом кривизны кристалла являются основной причиной падения интенсивности излучения в этой области спектра [34]. Пока кривизна невелика и средняя длина пробега в канале примерно равна длине кристалла (см. таблицу и рис. 1), высота максимума уменьшается незначи-

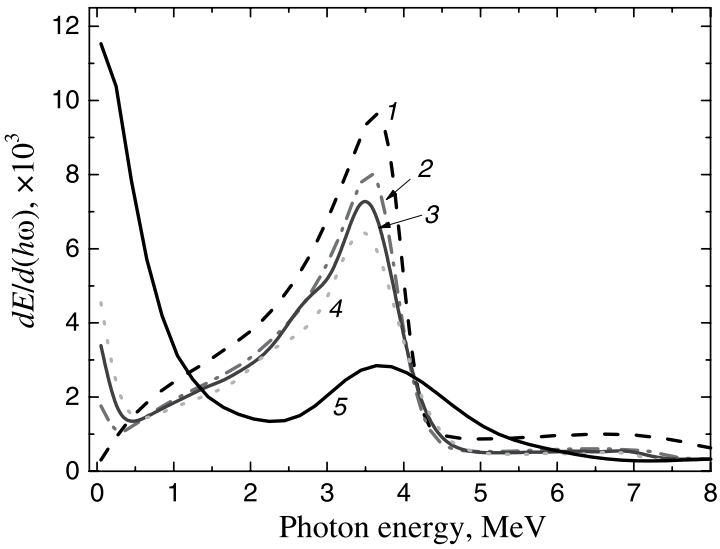


Рис. 1. Спектры излучения позитронов, распространяющихся с энергией 855 МэВ в кристалле алмаза (110) с различной кривизной C: 0 (кривая *1*), 0,05 (*2*), 0,08 (*3*), 0,10 (*4*), 0,30 (*5*). Длина кристалла L = 25 мкм

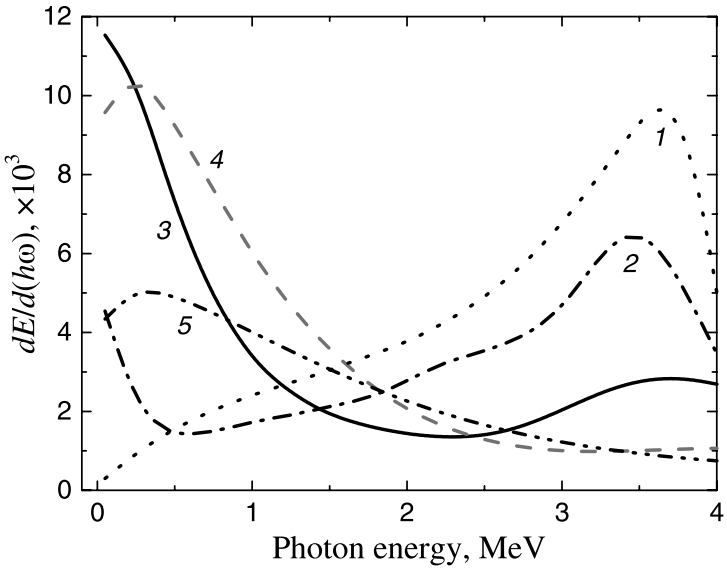


Рис. 2. «Синхротронная» часть спектра излучения каналирующих позитронов в кристалле алмаза (110) для разных параметров кривизны *C*: 0 (кривая *1*), 0,1 (*2*), 0,3(*3*), 0,5 (*4*), 0,8 (*5*)

тельно. Однако, для радиуса R = 0,4 см (C = 0,3, кривая *5* на рис. 1), его высота падает в пять раз, а при C = 0,8 максимум при 3 – 4 МэВ практически исчезает.

Другая особенность спектра излучения связана с проявлением максимума в низкочастотной области при каналировании в изогнутых кристаллах. Его возникновение связано с синхротронным излучением каналирующей частицы, которая испытывает не только поперечные осцилляции, но и движется вдоль оси искривленного канала. Излучение в этой области спектра отсутствует естественным образом для прямого кристалла, но с ростом параметра кривизны C сначала возникает, а затем растет по интенсивности (см. рис. 1).

На рис. 2 область синхротронного излучения показана для больших значений параметра C в более крупном масштабе. С ростом значения C синхротронный максимум также возрастает, и при C = 0,3 доминирует в полном спектре излучения. Однако в дальнейшем с ростом параметра кривизны максимум уменьшается по высоте, смещаясь при этом в сторону больших энергий (кривые *4*, *5* на рис. 2). Снижение интенсивности связано с уменьшением числа частиц, захватываемых в канал. Увеличение же параметра кривизны C или уменьшение ее радиуса R приводит к смещению спектрального максимума в область более высоких частот.

Заключение

Проведено компьютерное моделирование процесса каналирования ультрарелятивистских позитронов в прямых и изогнутых кристаллах алмаза. Пучок позитронов с энергией 855 МэВ направлялся вдоль кристаллографической плоскости алмаза (110) с вариацией радиусов кривизны кристалла. Вычисление траекторий частиц выполнено в рамках приближения Монте-Карло с использованием недавно разработанного пакета программ. Полученные траектории позволили определить основные параметры процесса каналирования позитронов в кристаллах длиной 25 мкм, а также численно проанализировать интенсивности их тормозного излучения (траектории использовались как входные данные для указанного численного анализа). Виртуальный эксперимент показал, что спектр излучения каналирующих позитронов в изогнутых кристаллах обогащается синхротронной составляющей, которая при некоторых значениях параметра кривизны кристалла доминирует в спектре.

Полученные результаты представляют интерес в качестве теоретической поддержки реальных экспериментальных измерений каналирования позитронных пучков, а также для возможной разработки новых источников когерентного излучения.

Работа поддержана проектом CUTE-IRSES Европейской комиссии (grant GA-2010-269131).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] **Sushko G.B., Bezchastnov V.G., Solov'yov I.A., Korol A.V., et al.** Simulation of ultra-relativistic electrons and positrons channeling in crystals with MBN EXPLORER // J. Comp. Phys. 2013. Vol. 252. Pp. 404–418.

[2] **Solov'yov I.A., Yakubovich A.V., Nikolaev P.V., et al.** MesoBioNano explorer—A universal program for multiscale computer simulations of complex molecular structure and dynamics // J. Comp. Chem. 2013. Vol. 33. Pp. 2412–2439.

[3] **Lindhard J., Winther A.** Stopping power of electron gas and equipartition rule // Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 1965. Vol. 34. Pp. 1–64.

[4] **Tsyganov E.N.** Estimates of cooling and bending processes for charged particle penetration through a monocrystal. Fermilab Preprint TM-682. Fermilab, Batavia 1976; Fermilab Preprint TM-684. Fermilab, Batavia, 1976.

[5] **Kumakhov M.A.** On the theory of electromagnetic radiation of charged particles in a crystal // Phys. Lett. Vol. 57A. 1976. Pp. 17–18.

[6] **Andersen H.H., Rehn L.E. (eds.).** Channeling and other crystal effects at relativistic energy // Nucl. Instrum. Methods B. 1996. Vol. 119 (Topical Issue). Pp. 1–315.

[7] **Bak J., Ellison J.A., Marsh B., et al.** Channeling radiation from 2 to 20 GeV/c electrons and positrons (II).: Axial case // Nucl. Phys. B. 1988. Vol. 302. Pp. 525–558.

[8] **Bazylev V.A., Zhevago N.K.** Intense electromagnetic radiation from relativistic particles // Sov. Phys. Usp. 1982. Vol. 25. Pp. 565–595.

[9] **Carrigan A., Ellison J. (eds.).** Relativistic Channeling, New York: Plenum, 1987.

[10] **Kumakhov M.A., Komarov F.F.** Radiation from Charged Particles in Solids, New York: AIP, 1989.

[11] **Saenz A.W., Überall H.** Calculation of electron channeling radiation with a realistic potential // Nucl. Phys. Vol. A372. 1981. Pp. 90–108.

[12] **Uggerhøj E.** Some recent experimental investigations of photon emission and shower formation in strong crystalline fields // Radiat. Eff. Defects Solids. Vol. 25. 1993. Pp. 3–21.

[13] **Uggerhøj U.I.** The interaction of relativistic particles with strong crystalline fields // Rev. Mod. Phys. 2005. Vol. 77. Pp. 1131–1171.

[14] **Kaplin V.V., Vorobiev S.A.** On the electromagnetic radiation of channeled particles in a curved crystal // Phys. Lett. Vol. 67A. 1978. Pp. 135–137.

[15] **Taratin A.M., Vorobiev S.A.** Quasi-synchrotron radiation of high-energy positrons channeled in bent crystals // Nucl. Instrum. Methods B. 1989. Vol. 42. Pp. 41–45

[16] **Arutyunov V.A., Kudryashov N.A., Samsonov V.M., Strikhanov M.N.** Radiation of ultrarelativistic charged particles in a bent crystal // Nucl. Phys. B. 1991. Vol. 363. Pp. 283–300.

[17] **Taratin A.M.** Particle channeling in a bent crystal // Phys. Part. Nucl. 1998. Vol. 29. Pp. 437–462.

[18] **Solov'yov A.V., Schäfer A., Greiner W.** Channeling process in a bent crystal // Phys. Rev. E. 1996. Vol. 53. Pp. 1129–1137.

[19] **Landau L.D., Lifshitz E.M.** Course of Theoretical Physics, Vol.2. The Classical Theory of Fields. Oxford: Pergamon Press, 1971.

[20] **Jackson J.D.** Classical Electrodynamics. Hoboken, New Jersey, USA: Wiley, 1999.

[21] **Biryukov V.M., Chesnokov Yu.A., Kotov V.I.** Crystal Channeling and its Application at High-Energy Accelerators. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1996.

[22] **Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.** Coherent radiation of an ultrarelativistic charged particle channelled in a periodically bent crystal // J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 1998. Vol. 24. Pp. L45–L53.

[23] **Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.** Channeling and Radiation in Periodically Bent Crystals. 2nd Edition. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2014.

[24] **Baranov V.T., Bellucci S., Biryukov V.M. et al.** Preliminary results on the study of radiation from positrons in a periodically deformed crystal // Nucl. Instrum. Methods. 2006. Vol. 252. Pp. 32–35.

[25] **Backe H., Krambrich D., Lauth W., Buonomo B., Dabagov S.B., Mazzitelli G., Quintieri L., Lundsgaard Hansen J., Uggerhшj U.I., Azadegan B., Dizdar A., Wagner W.** Future aspects of X-ray emission from crystal undulators at channeling

of positrons // Nuovo Cimento C. 2011. Vol. 34. Pp. 175–180.

[26] **Backe H., Kunz P., Lauth W., Rueda A.** Planar channeling experiments with electrons at the 855 MeV Mainz Microtron MAMI // Nucl. Instrum. Method Phys. Res. B. 2008. Vol. 266. Pp. 3835–3851.

[27] **Backe H., Krambrich D., Lauth W., Lundsgaard Hansen J., Uggerhøj U.I.** X-ray emission from a crystal undulator – Experimental results at channeling of electrons // Nuovo Cimento C. 2011. Vol. 34. Pp. 157–165.

[28] **Backe H., Krambrich D., Lauth W., Andersen K.K., Hansen J.L., Uggerhøj U.I.** Channeling and Radiation of electrons in silicon single crystals and Si1– xGex crystalline undulators // Journal Phys.: Conf. Series. 2013. Vol. 438. Pp. 012017.

[29] **Mikkelsen U., Uggerhøj E.** A crystalline undulator based on graded composition strained layers in a superlattice // Nucl. Instrum. Method Phys. Res. B. 2000. Vol. 160. Pp. 435–439.

[30] **Krause W., Korol A.V., Solov'yov A.V., Greiner W.** Photon emission by ultra-relativistic positrons in crystalline undulators: the high-energy regime // Nucl. Instrum. Method Phys. Res. A. 2002. Vol. 483. Pp. 455–460.

[31] **Sushko G.B., Bezchastnov V.G., Korol A.V., Greiner W., Solov'yov A.V., Polozkov R.G., Ivanov V.K.** Simulations of electron channeling in bent silicon crystal // J. Phys.: Conf. Ser. 2013. Vol. 438. Pp. 012019.

[32] **Sushko G.B., Korol A.V., Greiner W., Solov'yov A.V.** Sub-GeV electron and positron channeling in straight, bent and periodically bent silicon crystals // J. Phys.: Conf. Ser. 2013. Vol. 438. Pp. 012018.

[33] **Polozkov R.G., Ivanov V.K., Sushko G.B., Korol A.N., Solov'yov A.N.** Radiation emission by electrons channeling in bent silicon crystals // Eur. Phys. J. D. 2014. Vol. 68. Pp. 268.

[34] **Baier V.N., Katkov V.M., Strakhovenko V.M.** Electromagnetic Processes at High Energies in Oriented Single Crystals, World Scientific, Singapore, 1998.

[35] **Gemmell D.S.** Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals // Rev. Mod. Phys. 1974. Vol. 46. Pp. 129–227.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПОЛОЗКОВ Роман Григорьевич – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
polozkov@tuexph.stu.neva.ru

ИВАНОВ Вадим Константинович – *доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

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

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

Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany
sushko@mbnexplorer.com

КОРОЛЬ Андрей Владимирович – *кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики Санкт-Петербургского государственного морского технического университета, научный сотрудник Научно-исследовательского центра мезобионаносистем (MBN); г. Франкфурт-на-Майне, Германия.*

198262, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Ленинский пр., 101.
korol@fias.uni-frankfurt.de

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

Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany
solovyov@mbnresearch.com

Polozkov R.G., Ivanov V.K., Sushko G.B., Korol A.N., Solov'yov A.N. CHANNELING OF ULTRARELATIVISTIC POSITRONS IN BENT DIAMOND CRYSTALS.

Results of numerical simulations of channeling of ultra-relativistic positrons are reported for straight and uniformly bent diamond crystals. The projectile trajectories in a crystal are computed using the newly developed module of the MBN Explorer package which simulates classical trajectories in a crystalline medium by integrating the relativistic equations of the motion with account for the interaction between the projectile and crystal atoms. A Monte Carlo approach is employed to sample the incoming positrons and to account for thermal vibrations of the crystal atoms. The channeling parameters and emission spectra of incident positrons with a projectile energy of 855 MeV along C(110) crystallographic planes are calculated for different curvature radii of the crystal. Two features of the emission spectrum associated with positron oscillations in a channel and synchrotron radiation are studied as a function of crystal curvature.

ULTRA-RELATIVISTIC POSITRON, BENT DIAMOND CRYSTAL, CHANNELING, NUMERICAL SIMULATION, EMISSION.

REFERENCES

[1] **G.B. Sushko, V.G. Bezchastnov, I.A. Solov'yov, A.V. Korol, et al.,** Simulation of ultra-relativistic electrons and positrons channeling in crystals with MBN EXPLORER, J. Comp. Phys. 252 (2013) 404–418.

[2] **I.A. Solov'yov, A.V. Yakubovich, P.V. Nikolaev, et al.,** MesoBioNano explorer—A universal program for multiscale computer simulations of complex molecular structure and dynamics, J. Comp. Chem. 33 (2013) 2412–2439.

[3] **J. Lindhard, A. Winther,** Stopping power of electron gas and equipartition rule, Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 34 (1965) 1–64.

[4] **E.N. Tsyganov,** Estimates of cooling and bending processes for charged particle penetration through a mono crystal, Fermilab Preprint TM-682. Fermilab, Batavia, 1976; Fermilab Preprint TM-684. Fermilab, Batavia, 1976.

[5] **M.A. Kumakhov,** On the theory of electromagnetic radiation of charged particles in a crystal, Phys. Lett. 57A (1976) 17–18.

[6] **H.H. Andersen, L.E. Rehn (eds.),** Channeling and other crystal effects at relativistic energy, Nucl. Instrum. Methods B 119 (Topical Issue) (1996) 1–315.

[7] **J. Bak, J.A. Ellison, B. Marsh, et al.,** Channeling radiation from 2 to 20 GeV/c electrons and positrons (II).: Axial case, Nucl. Phys. B. 302 (1988) 525–558.

[8] **V.A. Bazylev, N.K. Zhevago,** Intense electromagnetic radiation from relativistic particles, Sov. Phys. Usp. 25 (1982) 565–595.

[9] **A. Carrigan, J. Ellison (eds.),** Relativistic Channeling. Plenum, New York (1987).

[10] **M.A. Kumakhov, F.F. Komarov,** Radiation from Charged Particles in Solids, AIP, New York (1989).

[11] **A.W. Saenz, H. Überall,** Calculation of electron channeling radiation with a realistic potential, Nucl. Phys. A372 (1981) 90–108.

[12] **E. Uggerhøj,** Some recent experimental investigations of photon emission and shower formation in strong crystalline fields, Radiat. Eff. Defects Solids. 25 (1993) 3–21.

[13] **U.I. Uggerhøj,** The interaction of relativistic particles with strong crystalline fields, Rev. Mod. Phys. 77 (2005) 1131–1171.

[14] **V.V. Kaplin, S.A. Vorobiev,** On the electromagnetic radiation of channeled particles in a curved crystal, Phys. Lett. 67A (1978) 135–137.

[15] **A.M. Taratin, S.A. Vorobiev,** Quasi-synchrotron radiation of high-energy positrons channeled in bent crystals, Nucl. Instrum. Methods B. 42 (1989) 41–45

[16] **V.A. Arutyunov, N.A. Kudryashov, V.M. Samsonov, M.N. Strikhanov,** Radiation of ultrarelativistic charged particles in a bent crystal, Nucl. Phys. B. 363 (1991) 283–300.

[17] **A.M. Taratin,** Particle channeling in a bent crystal, Phys. Part. Nucl. 29 (1998) 437–462.

[18] **A.V. Solov'yov, A. Schäfer, W. Greiner,** Channeling process in a bent crystal, Phys. Rev. E. 53 (1996) 1129–1137.

[19] **L.D. Landau, E.M. Lifshitz,** Course of Theoretical Physics, Vol. 2, The Classical Theory of Fields, Pergamon Press, Oxford, 1971.

[20] **J.D. Jackson,** Classical Electrodynamics. Wiley, Hoboken, New Jersey, USA, 1999.

[21] **V.M. Biryukov, Yu.A. Chesnokov, V.I. Kotov,** Crystal Channeling and its Application at High-Energy Accelerators. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1996.

[22] **A.V. Korol, A.V. Solov'yov, W. Greiner,** Coherent radiation of an ultrarelativistic charged

particle channelled in a periodically bent crystal, J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. 24 (1998) L45-L53.

[23] **A.V. Korol, A.V. Solov'yov, W. Greiner,** Channeling and Radiation in Periodically Bent Crystals, 2nd Edition. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2014.

[24] **V.T. Baranov, S. Bellucci, V.M. Biryukov, et al.,** Preliminary results on the study of radiation from positrons in a periodically deformed crystal, Nucl. Instrum. Methods. 252 (2006) 32–35.

[25] **H. Backe, D. Krambrich, W. Lauth, et al.,** Future aspects of X-ray emission from crystal undulators at channeling of positrons, Nuovo Cimento C. 34 (2011) 175–180.

[26] **H. Backe, P. Kunz, W. Lauth, A. Rueda,** Planar channeling experiments with electrons at the 855 MeV Mainz Microtron MAMI, Nucl. Instrum. Method Phys. Res. B. 266 (2008) 3835–3851.

[27] **H. Backe, D. Krambrich, W. Lauth, et al.,** X-ray emission from a crystal undulator – Experimental results at channeling of electrons, Nuovo Cimento C. 34 (2011) 157–165.

[28] **H. Backe, D. Krambrich, W. Lauth, et al.,** Channeling and radiation of electrons in silicon single crystals and Si1– xGex crystalline undulators, Journal Phys.: Conf. Series. 438 (2013) 012017.

[29] **U. Mikkelsen, E. Uggerhøj,** A crystalline undulator based on graded composition strained layers in a superlattice, Nucl. Instrum. Method Phys. Res. B. 160 (2000) 435–439.

[30] **W. Krause, A.V. Korol, A.V. Solov'yov, Greiner W.,** Photon emission by ultrarelativistic positrons in crystalline undulators: the high-energy regime, Nucl. Instrum. Method Phys. Res. A. 483 (2002) 455–460.

[31] **G.B. Sushko, V.G. Bezchastnov, A.V. Korol, W. Greiner, A.V. Solov'yov, R.G. Polozkov, V.K. Ivanov,** Simulations of electron channeling in bent silicon crystal, J. Phys.: Conf. Ser. 438 (2013) 012019.

[32] **G.B. Sushko, A.V. Korol, W. Greiner, A.V. Solov'yov,** Sub-GeV electron and positron channeling in straight, bent and periodically bent silicon crystals, J. Phys.: Conf. Ser. 438 (2013) 012018.

[33] **R.G. Polozkov, V.K. Ivanov, G.B. Sushko, A.N. Korol, A.N. Solov'yov,** Radiation emission by electrons channeling in bent silicon crystals, Eur. Phys. J. D. 68 (2014) 268.

[34] **V.N. Baier, V.M. Katkov, V.M. Strakhovenko,** Electromagnetic Processes at High Energies in Oriented Single Crystals, World Scientific, Singapore, 1998.

[35] **D.S. Gemmell,** Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals, Rev. Mod. Phys. 46 (1974) 129–227.

THE AUTHORS

POLOZKOV Roman G.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
polozkov@tuexph.stu.neva.ru

IVANOV Vadim K.
Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ivanov@physics.spbstu.ru

SUSHKO Gennady B.
MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology
Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany
sushko@mbnexplorer.com

KOROL Andrei V.
State Marine Technical University of St. Petersburg
3, Lotsmanskaya St., St. Petersburg 190008, Russian Federation
korol@fias.uni-frankfurt.de

SOLOV'YOV Andrei V.
MBN Research Center at Frankfurt Innovation Center of Biotechnology
Altenhoferallee 3, 60438 Frankfurt am Main, Germany
solovyov@mbnresearch.com

© Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2015

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Аладов А.В. **74**
Алексеева Т.А. **118**
Бердников Я.А. **99, 110**
Берт Н.А. **11**
Болдырев А.Г. **91**
Булашевич К.А. **74**
Валюхов В.П. **61, 74**
Власова О.Л. **91**
Глобина В.И. **148**
Головков О.Л. **84**
Горобей Н.Н. **160**
Елфимова Е.П. **148**
Железняк А.Г. **49**
Закгейм А.Л. **74**
Иванов В.К. **167**
Карпов С.Ю. **74**
Король А.В. **167**
Купцов В.Д. **61**
Купцова Г.А. **84**
Лазовская Т.В. **138**
Ларионов И.В. **91**
Лукьяненко А.С. **160**
Малаев М.В. **99, 110**
Михайловский Е.А. **30**
Неведомский В.Н. **11**
Новицкий Н.Н. **30**
Пастухов А.А. **19**
Петриченко М.Р. **43**
Пичугин Ю.А. **123**
Полозков Р.Г. **167**
Рябов В.Г. **99, 110**
Рябов Ю.Г. **99, 110**
Самсонов В.М. **99, 110**
Сидоров В.Г. **49**
Скворцов Н.В. **91**
Сокура Л.А. **11**
Соловьев А.В. **167**
Степанов В.А. **84**
Сушко Г.Б. **167**
Тархов Д.А. **138**
Чариков Ю.Е. **148**
Черняков А.Е. **74**
Шабалин А.Н. **148**

Научное издание

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
№ 2 (218) 2015

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор).
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор *В.К. Иванов* – председатель ред. коллегии
д-р физ.-мат. наук, профессор *А.Э. Фотиади* – зам. председателя ред. коллегии
канд. физ.-мат. наук, доцент *В.М. Капралова* – ответственный секретарь
канд. физ.-мат. наук *О.А. Ящуржинская* – научный редактор, корректор
А.С. Колгатина – технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка *А.Н. Смирнова*

Директор Издательства Политехнического университета *А.В. Иванов*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 29.05.2015. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 22,58. Уч.-изд. л. 22,58. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
Издательство Политехнического университета
член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России
Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 г. выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» (ISSN 1994-2354). Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», издается под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами **ISSN 1994-2354, (сериальный) ISSN 2304-9782**. С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word 2007 – 2010, формул – в редакторе MS Equation или MathType. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

Шрифт – Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (http://journals.spbstu.ru). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться ДОСРОЧНО.

Более подробную информацию можно получить по телефону редакции:
(812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Александра Сергеевна
или по e-mail: physics@spbstu.ru