



НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические
науки

3(201) 2014

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;
Сулис Р.А., академик РАН.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия – главный редактор;
Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия – зам. главного редактора;
Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбГПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь;
Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Кожевников Н.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Остряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Самойлов В.О., чл.-кор. РАН, профессор, СПбГПУ, 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, СПбГПУ, СПб., Россия;
Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;
Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, 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 ВИНТИ 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 государственный политехнический университет, 2014

THE MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF THE RUSSIAN FEDERATION



ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

Physics
and Mathematics

3(201) 2014

Polytechnical University Publishing House
Saint Petersburg
2014

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., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – editor-in-chief;
A.E. Fotiadi – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – deputy editor-in-chief;
V.M. Kapralova – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – executive secretary;
V.I. Antonov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
A.V. Blinov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
D.A. Firsov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
N.M. Kozhevnikov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
V.V. Kozlovsky – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
V.M. Ostryakov – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
V.O. Samoilov – corresponding member of RAMS, prof., SPbSPU, 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., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;
E.A. Tropp – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, 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 SPb-GPU' (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 Politekhnikeskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85.

Содержание

Фаддеев Л.Д. <i>Моя жизнь среди квантовых полей</i>	9
--	---

Математическое моделирование физических процессов

Семенов А.С., Грищенко А.И., Мельников Б.Е. <i>Конечно-элементное моделирование деформирования костной ткани на субмикроскопическом уровне</i>	20
Лукин А.В., Модестов В.С. <i>Конечно-элементное моделирование и анализ напряженно-деформированного состояния железобетонных конструкций</i>	35

Математическая физика

Петриченко М.Р., Харьков Н.С. <i>Предельные задачи для уравнения Крокко в теории переноса</i>	47
--	----

Приборы и техника физического эксперимента

Чабанов В.Е., Жуков В.А. <i>Расчет и проектирование электромагнитно-акустических преобразователей для ультразвукового неразрушающего контроля</i>	57
--	----

Физическая оптика

Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. <i>Стационарное решение системы уравнений Танга – Статца – Демарса для YAG:Nd-лазера</i>	74
--	----

Биофизика и медицинская физика

Байрамов Ф.Б., Полоскин Е.Д., Чернев А.Л., Топоров В.В., Дубина М.В., Лахдеранта Е., Лашкул А., Липсанен Г., Байрамов Б.Х. <i>Рамановское рассеяние света в олигонуклеотидах</i>	82
Иванков А.А. <i>Программный комплекс для изучения механизмов авторегуляции транскраниального кровообращения в режиме реального времени</i>	92
Винниченко М.Я., Софронов А.Н., Фирсов Д.А., Дремов С.С., Тер-Мартirosян А.Л. <i>Исследование оптических свойств фотодитазина для расширения возможностей фотодинамической терапии</i> ...	110

Математика

Петриченко М.Р. <i>Аддитивное и мультипликативное удвоение переменных в автономных уравнениях</i>	118
Хохлюк В.И. <i>Групповая задача минимизации</i>	126
Хохлюк В.И. <i>Алгоритм заполнения стандартной таблицы</i>	131

Теоретическая физика

Пашковский А.В., Пашковский В.И. <i>Фановые модели электрического поля нуклонов и электронов</i>	139
---	-----

Конференции

Сочава А.А. , Черепанов А.С. , Зернов Н.Н. , Битюков А.А. XXVII Всероссийская научная конференция студентов-радиофизиков	148
---	-----

Хроника

Антонов В.И., Васильев Ю.С. Кафедра высшей математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. История и современность.....	154
--	-----

Contents

Faddeev L.D. <i>My life in the quantum fields</i>	9
--	---

Simulation of Physical Processes

Semenov A.S., Grishchenko A.I., Melnikov B.E. <i>Finite element modeling of bone deformation at the submicroscopic scale</i>	20
Lukin A.V., Modestov V.S. <i>Finite element modeling and an analysis of the stress-strain state of reinforced concrete structures</i>	35

Mathematical Physics

Petritchenko M.R., Kharkov N.S. <i>Boundary problems for the Crocco equation in the transport theory</i>	47
--	----

Experimental Technique and Devices

Chabanov V.E., Zhukov V.A. <i>Calculation and design of EMAT for ultrasonic nondestructive testing</i>	57
---	----

Physical Optics

Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. <i>Stationary solution of the Tang – Statz – Demars system of equations for YAG:Nd-laser</i>	74
---	----

Biophysics and Medical Physics

Bayramov F.B., Poloskin E.D., Chernev A.L., Toporov V.V., Dubina M.V., Lähderanta E., Lashkul A., Lipsanen H., Bairamov B.H. <i>Raman scattering of light in oligonucleotides</i>	82
Ivankov A.A. <i>The software system for real-time investigation of autocontrol mechanisms of transcranial blood circulation</i>	92
Vinnichenko M.Ya., Sofronov A.N., Firsov D.A., Dremov S.S., Ter-Martirosyan A.L. <i>Investigation of photoditazin optical properties for expanding possibilities of photodynamic therapy</i>	110

Mathematics

Petrichenko M.R. <i>Additive and multiplicative doubling variables in autonomous equations</i>	118
Khokhlyuk V.I. <i>The group problem of minimization</i>	126
Khokhlyuk V.I. <i>The algorithm for completing the standard table</i>	131

Theoretical Physics

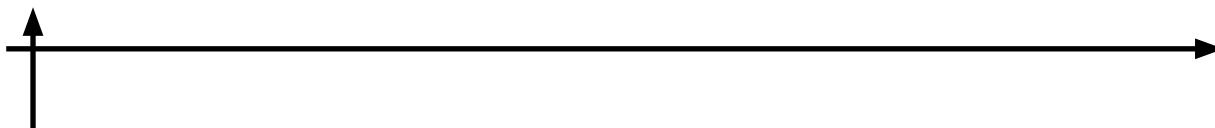
Pashkovsky A.V., Pashkovsky V.I. <i>Phan models of electric field of nucleons and electrons</i>	139
--	-----

Conferences

Sochava A.A., Cherepanov A.S., Zernov N.N., Bityukov A.A. <i>The 17th All-Russian Scientific Conference of Russian Undergraduates Specializing in Radiophysics</i>	148
---	-----

Chronicle

Antonov V.I., Vasiliev Yu.S. <i>The Department of Higher Mathematics of St. Petersburg State Polytechnical University: History and the Present</i>	154
---	-----



Решением Президиума Российской академии наук от 18 февраля 2014 года большая золотая медаль имени М.В. Ломоносова 2013 года была присуждена академику Людвигу Дмитриевичу Фаддееву за выдающийся вклад в квантовую теорию поля и теорию элементарных частиц. Эта медаль — высшая награда РАН, которая ежегодно присуждается двум наиболее отличившимся ученым (российскому и иностранному).

Академик Фаддеев (родился 23 марта 1934 года в Ленинграде) — это крупнейший российский ученый в области математики и теоретической физики. К наиболее ярким его достижениям относятся решение квантовой задачи трех частиц, построение корректных правил работы с полями Янга — Миллса, создание формализма квантовых интегрируемых систем. Международный авторитет ученого подтвержден большим числом наград и почетных званий. Он иностранный член национальных академий США, Франции, Китая, Бразилии, Швеции, Финляндии, Австрии, Польши, Болгарии и Лондонского королевского общества. Кроме того, он Почетный гражданин г. Санкт-Петербурга.

В торжественной обстановке Общего собрания РАН, которое состоялось 27 марта 2014 года, награду академику Людвигу Дмитриевичу Фаддееву вручил Президент РАН, академик Владимир Евгеньевич Фортов. После вручения высокой награды академик Фаддеев сделал доклад; этот доклад представлен в нашем журнале с любезного согласия автора, а также по согласованию с редакцией журнала «Вестник РАН», которая опубликовала доклад в № 9 за 2014 год.

Члены редакционного совета и редколлегии журнала «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета» горячо поздравляют Людвигу Дмитриевичу Фаддееву с юбилеем и заслуженной наградой.

Л.Д. Фаддеев

Санкт-Петербургское отделение
Математического института им. В.А. Стеклова РАН

МОЯ ЖИЗНЬ СРЕДИ КВАНТОВЫХ ПОЛЕЙ

Прежде всего я хочу сказать, что я очень благодарен Президиуму РАН за высокую оценку моей научной работы и предоставленную возможность выступить перед Общим собранием. В тексте постановления Президиума сказано, что золотая медаль им. Ломоносова присуждена мне за вклад в развитие квантовой теории поля и теории элементарных частиц. Выбранное мной по совету жены название доклада в должной мере соответствует этой формулировке.

Слово «поле» имеет в русском языке, как и в других языках, много значений. Так, увидев название книги «Мезоны и поля», одна интеллигентная дама сказала:

«Ах, что это за роман о пейзажной жизни?» Наши новые коллеги из сельскохозяйственной академии тоже имеют свою интерпретацию этого слова. Однако в физике термин «поле» закреплен за физической реальностью, распространенной по всему нашему трехмерному пространству. Тем самым поле описывается одной или несколькими функциями от пространственной переменной x и в классической физике задает механическую систему с бесконечным числом степеней свободы. Переменная x играет роль номера степени свободы, подобно тому, как индекс i нумерует координаты фазового пространства p, q , для конечномерной механической системы.

Важнейшим и исторически первым примером поля является электромагнитное, описываемое напряженностями $\vec{E}(\vec{x})$, $\vec{H}(\vec{x})$ или векторным потенциалом $A_\mu(x)$, $\mu = 0, 1, 2, 3$. Второе фундаментальное поле — поле тяготения Эйнштейна — вошло в физику в начале прошлого века. Квантовая механика системы с конечным числом степеней свободы получила законченную формулировку в середине 1920-х гг. Естественно, что возник вопрос и о квантовании электромагнитного поля, удовлетворительно решенный в работах П. Дирака, В. Гейзенберга и В. Паули. Большая роль в этом развитии принадлежала нашему соотечественнику В.А. Фоку. Его имя связано с понятием градиентной инвариантности (больше об этом ниже) и конструкцией пространства состояний квантовополевого системы — пространства Фока.

Первым важнейшим достижением квантовой электродинамики явилось разрешение исторического конфликта между корпускулярной и волновой теориями света. Возбуждения квантового электромагнитного поля получили интерпретацию частицами — фотонами.

Далее последовали удовлетворительные расчеты элементарных процессов: эффекта Комптона, рассеяния Мёллера и т. д. — в низшем порядке по заряду электрона. Однако попытки получить радиационные поправки столкнулись с трудностями — расходящимися интегралами. В современных обозначениях типичный расходящийся интеграл по четырехмерному пространству импульсов имеет вид

$$I_k = \int \frac{d^4 p}{(p^2 + p^m)((p - k)^2 + m^2)}$$

и расходится на бесконечности. Если ограничить область интегрирования шаром $|p| < \Lambda$, то этот интеграл содержит слагаемое, пропорциональное $\ln \Lambda$, то есть логарифмически расходится. В результате, несмотря на усилия многих выдающихся исследователей, квантовая электродинамика не получила удовлетворительной формулировки и интерес к ней к концу 1930-х гг.

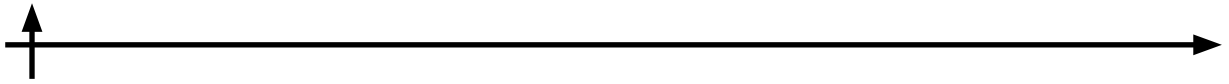
угас. А затем Вторая мировая война заставила физиков перейти на оборонную тематику. Так произошел первый кризис квантовой теории поля на протяжении ее драматического развития с взлетами и падениями.

Во время войны цвет европейской теоретической физики оказался в США. В общении с мэтрами выросли молодые американские ученые, и среди них Дж. Швингер и Р. Фейнман. И вот после окончания войны, освобожденные от работы над атомной бомбой, все они с радостью и энтузиазмом вернулись к нормальной работе. Квантовая электродинамика опять вышла на передовое место. Замеченное еще до войны явление сдвига атомных уровней водорода получило бесспорное экспериментальное подтверждение в опытах У. Лэмба. Радиационные поправки должны были дать объяснение этому факту.

Важнейшей вехой в истории стала конференция в Шелтер-Айленде весной 1947 г. В ней участвовало 25 человек — как знаменитые европейцы, так и молодые американцы. В результате обсуждения был выработан новый взгляд на бесконечности: радиационные поправки меняли значения параметров теории — электрического заряда e и массы электрона m , и все бесконечности собирались в этом переопределении. Остающиеся конечные результаты давали физический эффект и подтверждали сдвиг Лэмба.

Принято считать, что основной вклад в идею и первый расчет был сделан Х.А. Бете, однако должную роль сыграли предложения Х. Крамерса, В. Вайскопфа, Дж. Швингера и др. Так родилась теория перенормировок, которая развивается до сих пор, привлекая все более возвышенную математику. На начальном ее этапе важную роль сыграли работы Н.Н. Боголюбова и его ученика О.С. Парасюка.

В течение двух лет, после нового успеха квантовой электродинамики, Швингером и Фейнманом были разработаны два варианта теории, полностью удовлетворяющие требованию явной релятивистской инвариантности. Техническое усовершенствование



ние состояло в том, что электроны также описывались своим полем. Таким образом, концепция поля стала универсальной. Ничего другого нет. Вся физика начинается с теории поля.

Швингер разработал операторный формализм, Фейнман создал метод, основанный на функциональном интеграле. Оказалось, что в Японии С. Томонага также сформулировал сходные идеи. В варианте Фейнмана квантовые ответы получают-ся усреднением функционала $\exp\{(i/\hbar)S\}$ по всем конфигурациям полей. Здесь S — классическое действие, $i = \sqrt{-1}$, $\hbar$ — кон-станта Планка. В электродинамике S за-висит от электронно-позитронного поля $(\bar{\psi}(x), \psi(x))$ и электромагнитного поля, за-данного вектор-потенциалом $A_\mu(\vec{x})$ ($\mu = 0, 1, 2, 3$):

$$S = \frac{1}{4e^2} \int F_{\mu\nu}^2 d^4x + \int (\bar{\psi} \gamma_\mu (\partial_\mu + iA_\mu) \psi + m \bar{\psi} \psi) d^4x. \quad (1)$$

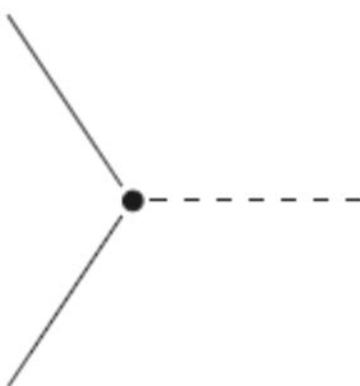
Здесь $F_{\mu\nu}$ — напряженность электромаг-нитного поля, которая следует выражению

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu.$$

Как видим, этот функционал содержит квадратичную форму полей и одно слагае-мое $\bar{\psi} \gamma_\mu A_\mu \psi$ третьей степени. В интеграле

$$\int e^{(i/\hbar)S(\bar{\psi}, \psi, A)} \prod d\bar{\psi} d\psi dA$$

а)



можно разложить экспоненту с этой куби-ческой формой в ряд, и тогда возникаю-щие гауссовы интегралы явно считаются. Фейнман предложил запись для этих отве-тов в терминах графов, вершины которых отвечают форме $\bar{\psi} \gamma_\mu A_\mu \psi$ и изображены на рис. 1, а, а линии отвечают функциям Гри-на операторов

$$\square = \partial_\mu \partial_\mu; \gamma_\mu \partial_\mu + m$$

(рис. 1, б).

Простейшие диаграммы отвечают рас-сеянию заряженных частиц — электронов и позитронов (рис. 2, а) и рассеянию фотона на заряженной частице (рис. 2, б).

Наглядный характер диаграмм Фейн-мана очень импонировал специалистам: громоздкие формулы старых нерелятивист-ских вычислений приобрели компактный и красивый вид. В результате их вывод через функциональный интеграл был забыт, а сами диаграммы были абсолютизированы как «ла-боратория теоретической физики» (по сло-вам М. Гелл-Манна). Более того, Ф. Дайсон привел альтернативный вывод диаграмм из более знакомого операторного формализма.

Здесь следует сказать, что действие $S(\bar{\psi}, \psi, A)$ является функцией классов эк-вивалентных полей по отношению к пре-образованию

$$\psi \rightarrow e^{i\theta} \psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow e^{-i\theta} \bar{\psi}, \quad A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \theta, \quad (2)$$

где $\theta(x)$ — произвольная вещественная функция.

б)



Рис. 1. Термины графов, предложенные Р. Фейнманом:
а — вершина, б — линии

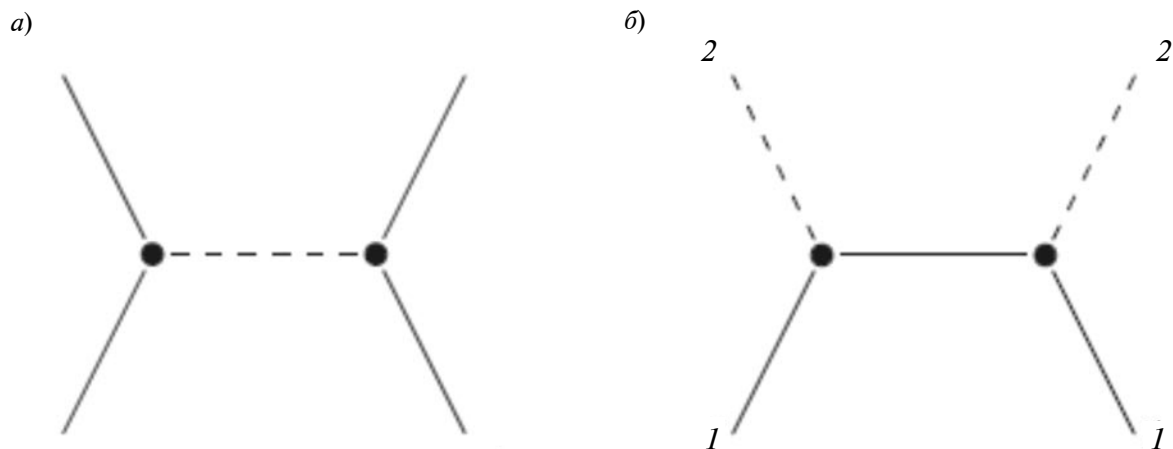


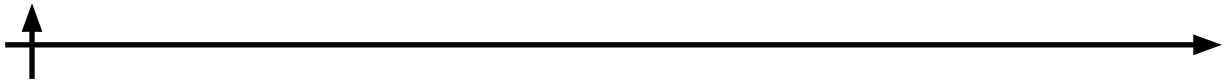
Рис. 2. Простейшие диаграммы Фейнмана:
а – рассеяние заряженных частиц (электроны, позитроны); б – рассеяние электрона (1) на фотоне (2)

Именно это преобразование было обнаружено В.А. Фоком и названо им градиентным преобразованием. В современной литературе, следуя Г. Вейлю, его называют калибровочным преобразованием. Влияние этого преобразования на формулировку функционального интеграла будет обсуждено ниже.

После этого исторического введения я могу начать рассказ о моей научной жизни, возвращаясь к ней несколько раз. Я поступил на физический факультет Ленинградского университета в 1951 году и на третьем курсе выбрал специализацию «математическая физика», которая только что была организована. В это время вышла книга А.И. Ахиезера, В.Б. Берестецкого «Квантовая электродинамика» и собранный Д.Д. Иваненко том «Новейшее развитие квантовой электродинамики», в который вошли статьи Фейнмана, Швингера, Томонаги и Дайсона. Для моих приятелей из группы «теоретическая физика» эти книги стали своего рода библией. Все вокруг меня суммировали диаграммы, проводили перенормировку и т. п. Однако я получил другой импульс от своего студенческого руководителя О.А. Ладыженской. Ее научные интересы были связаны с уравнениями в частных производных и пересекались с работами американских математиков из института Куранта в Нью-Йорке с традиционным интересом к физике, идущей

от Геттингенской школы Д. Гильберта. В том числе в 1952 году К. Фридрихс организовал для своих коллег семинар по основам квантовой теории поля. Его лекции были опубликованы в журнале «Communications in Pure and Applied Mathematics» и вскоре вышли в виде монографии «Математические основы квантовой теории поля». Ладыженская решила организовать студенческий семинар по этой книге, и вся наша группа – два юноши и три девушки – принялись разбирать книгу Фридрихса. Я думаю, что это было полезно только для меня; я помню, как Ольга Александровна в начале каждого семинара, где я докладывал, спрашивала: «Людвиг, напомните нам, что такое оператор рождения». Но я получил хорошую тренировку и стал мечтать, что когда-нибудь смогу начать серьезно заниматься квантовой теорией поля. Однако поскольку кроме счета диаграмм не было ничего, за что можно было бы зацепиться, я весьма прагматично решил подождать и заняться более реальными задачами квантовой теории рассеяния. Мне удалось найти оригинальный подход к квантовой задаче трех тел, довольно рано защитить докторскую диссертацию и получить международное признание.

А тем временем квантовая теория поля опять попала в трудное положение. Л.Д. Ландау, А.А. Абрикосов и И.М. Халатников, суммируя диаграммы, показали



противоречие в программе перенормировки квантовой электродинамики. В реалистическом подходе Ландау считалось, что перенормировка состоит в том, что затравочные параметры теории — масса m_0 и заряд электрона e_0 — являются функциями от импульса обрезания Λ и вместе с радиационными поправками определяют физические значения m_r , e_r . Ландау и соавторы получили формулу для e_r через e_0 и Λ :

$$\frac{1}{e_r^2} = \frac{1}{e_0^2} + \beta \ln \frac{\Lambda}{\mu}, \quad (3)$$

где μ — фиксированная константа. Коэффициент β оказался положительным.

Тем самым, каково бы ни было значение $e_0(\Lambda)$, перенормированный заряд e_r^2 обращается в нуль при $\Lambda \rightarrow \infty$. Это замечание сыграло убийственную роль для теории поля. Множество других моделей для мезонной теории ядерных сил и четырехфермионных моделей для слабых взаимодействий имели тот же эффект, что и квантовая электродинамика. В результате Ландау — этот неумолимый цензор физики — объявил, что квантовая теория поля мертва и должна быть похоронена с надлежащими почестями. И все. Начиная с 1956 года теория поля в Советском Союзе была закрыта. Примерно то же было и за границей в связи с разочарованием в мезонной теории ядерных сил и неперенормированности теории Ферми слабых взаимодействий.

На этом фоне незаметно прошло появление новой модели. Молодой китайский эмигрант С.Н. Янг выступил на семинаре Дж.Р. Оппенгеймера в Принстоне с предложением обобщения понятия калибровочного преобразования. К тому времени были хорошо известны более сложные внутренние степени свободы элементарных частиц помимо электрического заряда. Так, изотопический спин был введен для различия протона и нейтрона. Тем самым соответствующее поле ψ имело две компоненты: $\psi = (\psi_1, \psi_2)$. Вращение заряженного поля в преобразовании (2) естественно обобщается на преобразование

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \\ \gamma\psi_1 + \delta\psi_2 \end{pmatrix} = g \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

в котором участвует унитарная матрица

$$g = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}.$$

Соответствующее векторное поле, аналог электромагнитного потенциала A_μ , должно также стать матрицей с преобразованием

$$A_\mu \rightarrow g A_\mu g^{-1} + \partial_\mu g g^{-1}. \quad (5)$$

С.Н. Янг сосчитал, что в формуле для напряженности следует добавить квадратичный член

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + A_\mu A_\nu - A_\nu A_\mu \quad (6)$$

с тем, чтобы $F_{\mu\nu}$ получило однородное преобразование

$$F_{\mu\nu} \rightarrow g F_{\mu\nu} g^{-1},$$

так что в результате лагранжиан

$$\mathcal{L} = \frac{1}{4g^2} \text{tr} F_{\mu\nu}^2 + \bar{\psi} \gamma_\mu (\partial_\mu + A_\mu) \psi + m \bar{\psi} \psi,$$

являющийся естественным обобщением электромагнитного лагранжиана (1), становится инвариантным по отношению к калибровочным преобразованиям (4) и (5). С.Н. Янг поделился этим открытием со своим соседом по лаборатории в Брукхэвене Р.Л. Миллсом, и они написали маленькую заметку, о которой Янг и рассказывал в Принстоне.

На семинаре присутствовал В.Э. Паули — другой неумолимый цензор, которому эти формулы были знакомы. Действительно, в дифференциальной геометрии величины типа матриц A_μ называются связностями. В физике уже использовались связности в теории тяготения Эйнштейна для описания взаимодействия гравитационного поля и поля Дирака Г. Вейлем и В.А. Фоком в 1929 году. Квадратичное слагаемое в формуле для тензора кривизны можно там увидеть. Однако Паули не позволял себе говорить о модели, подобной Янгу — Миллсу. Действительно, при интерпретации модели в соответствии с парадигмой «одно поле — одна частица», модель Янга — Миллса содержит, кроме фотона, еще две заряженные безмассовые векторные частицы, которых в

природе нет. И поэтому модель физически бессмысленна, несмотря на свою математическую красоту. Паули спросил у Янга, какая масса у возбуждений его поля. Янг ответил, что это трудная динамическая задача. Паули буркнул, что «это вам не извинение», и доклад Янга не был сорван только благодаря проявленной Оппенгеймером политической корректности.

Итак, математическая интуиция входила в противоречие с физическим смыслом, и модель Янга — Миллса оставалась на периферии интересов физиков.

Вернусь теперь к моей истории. В 1964 году я решил, что несмотря на запрет Ландау я, будучи далеко в Ленинграде, могу начать работать над квантовой теорией поля. Я стал читать литературу по теории тяготения Эйнштейна и довольно случайно получил два важных импульса. На выставке новых поступлений в библиотеке появился номер журнала «Acta Physica Polonica», в котором была опубликована магнитофонная запись доклада Фейнмана на организованной в Варшаве конференции по теории тяготения. Надо сказать, что в то время сообщества специалистов по гравитации и по элементарным частицам были совершенно разобщены, и появление Фейнмана в Варшаве было для меня неожиданным. Однако, как оказалось, Фейнман занялся теорией Эйнштейна под влиянием В. Вайскопфа, который предложил ему посмотреть, как диаграммные методы работают в теории Эйнштейна. Фейнман быстро вывел все известные эффекты классической теории гравитации на основании диаграмм без петель и стал искать квантовые поправки по аналогии с электродинамикой. К своему недоумению он получил неудовлетворительный результат.

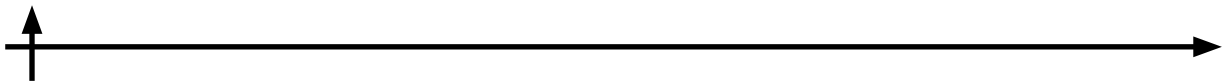
Счет с полем тяготения очень громоздок. И М. Гелл-Манн, компаньон Фейнмана в Пасадене, посоветовал ему потренироваться на бессмысленной с физической точки зрения, но более удобной с технической точки зрения модели Янга — Миллса. Общее с гравитационным полем — самодействие поля Янга — Миллса, порожденное квадратичным членом в форму-

ле (6); Фейнман обнаружил, что наивный диаграммный подход дает в однопетлевом приближении неунитарный ответ. Тогда он воспользовался известным методом восстановления однопетлевого ответа через древесные диаграммы на основании условия аналитичности. Он получил, что корректный ответ отличается от наивного на слагаемое, которое может быть проинтерпретировано как вклад скалярной частицы. При этом данное слагаемое входило со знаком минус, что нужно интерпретировать как ферми-характер этой фиктивной частицы спина 0.

Основную часть доклада Фейнмана и составляло описание этого эффекта, а я понял, что есть задача объяснения трюка Фейнмана на все порядки теории возмущений.

Второй импульс тоже довольно случаен. На развале старых книг на Невском проспекте я заметил тонкую монографию французского геометра А. Лихнеровича «Голономии и теория связностей в целом» и купил ее за смешную цену — 50 копеек. Я знал имя Лихнеровича как автора большой книги по теории тяготения. Когда я открыл купленную книгу, то сразу увидел уже знакомые формулы Янга — Миллса. Поле Янга — Миллса — это связность, и тем самым оно столь же геометрично, как поле тяготения. Задача его квантования стала еще более привлекательной.

В середине 1960-х гг. у меня хорошо шла работа по многомерной обратной задаче рассеяния, но я стал активно присматриваться к полю Янга — Миллса. Я обсуждал задачу квантования с молодым сотрудником института Виктором Поповым, и мы решили привлечь исходный метод Фейнмана — функциональный интеграл, так как только в этом формализме можно удовлетворительно учесть калибровочную инвариантность. Калибровочные преобразования в случае электродинамики (группа $U(1)$) и Янга — Миллса (группа $SU(2)$) отличались важным образом: орбиты групп, то есть классы эквивалентных полей, линейны в первом случае и не линейны во втором.



Тем самым выбор представителя класса при наложении калибровочного условия $\partial_\mu A_\mu = 0$ имеет важное отличие: в первом случае эта поверхность пересекает орбиты под фиксированным углом, во втором же этот угол зависит от поля. Надо помнить, что мы имеем дело с бесконечномерным пространством, поэтому слова «поверхность» и «угол» должны быть правильно интерпретированы. Как всегда, угол задается определителем. Я сказал Виктору, что естественный оператор, определитель которого нам нужен, это вариация калибровочного условия при бесконечно малом калибровочном преобразовании

$$\delta A_\mu = \partial_\mu \epsilon + [A_\mu, \epsilon],$$

то есть

$$\delta \partial_\mu A_\mu = M(A)\epsilon, \quad M(A) = \partial_\mu^2 + [A_\mu, \partial_\mu],$$

и интеграл Фейнмана надо записывать в виде

$$\int e^{(i/\hbar) \int \mathcal{L}(x) dx} \delta(\partial_\mu A_\mu) \det M \prod dA_\mu.$$

Через пару дней Виктор предложил простой метод вывода этой формулы. Мы знали от Ф.А. Березина, что определители имеют функциональное представление через грассмановы (фермиевские) переменные:

$$\det M = \int e^{\int \bar{c} M c} \prod d\bar{c} dc,$$

так что учет определителя означает увеличение числа полей в интеграле Фейнмана с добавкой к действию слагаемого, зависящего от полей $(\bar{c}, c)$. Было легко проверить, что однопетлевой результат Фейнмана отвечал дополнительной петле этих полей.

Я был очень удовлетворен этим результатом, но совсем не было ясно, что с ним делать. В декабре 1966 года мне позволили поехать в научную командировку во Францию, в Институт высших научных исследований в окрестности Парижа. Приглашение было основано на моей работе по теории рассеяния, так что о Янге — Миллсе я не рассказывал. Однако моим соседом

в доме приезжих ученых был американец Дезер; он рассказал мне, что его коллега Б.С. Де-Витт, который присутствовал на лекции Фейнмана в Варшаве, тоже занимался квантованием поля Янга — Миллса. Я понял, что надо торопиться, и по возвращению домой сказал Виктору, что пора писать работу. Но куда? В СССР журнал ЖЭТФ статью не возьмет из-за отсутствия физического смысла. К счастью, как раз в это время был организован европейский журнал “Physics Letters”, куда советским ученым разрешалось посылать статьи. Объем — две журнальные страницы. Я помню, как я писал текст, используя экономно каждое слово или формулу. Так интеграл Березина в статью не попал. Много позже один коллега сказал мне, что, судя по торжественному стилю текста, я чувствовал важность результата.

Статья была послана и опубликована. Вот что много позже написал М. Вельтман об этой истории:

Ludwig Faddeev (1934)

This Russian mathematician from Steklov Mathematical Institute, St. Petersburg, is one of the very few mathematicians that contributed to the investigations of gauge theories. In 1962 Feynman initiated such an investigation trying to find out the Feynman rules for such a theory. The Feynman rules are the precise prescriptions concerning the mathematical expressions corresponding to the diagrams. Feynman reported at some conference in Poland, never wrote it down himself, but the Polish made a transcript of his lecture. He introduced ghost particles, which are particles that occur in the Feynman rules and are essential to mathematical prescriptions, but do not correspond to physical particles. He did that up to a point, using his own path-integral formalism, but got stuck at some level. Faddeev (together with V.N. Popov), using the same path-integral formalism, published a beautiful method to derive these Feynman rules for gauge theories in full generality. Since then the ghost particles are called Faddeev — Popov ghosts. You could say that Faddeev and Popov did beat Feynman at his own game.

Faddeev was already quite famous before that. He derived equations concerning the three-body problem that have been used heavily in nuclear physics.

As it happened I was editor of Physics Letters, a scientific journal to which Faddeev and Popov submitted their publication. At the time I did not know about path integrals, and I did not understand the article in any detail. Also I did not know then that gauge theories were important for understanding weak interaction. Nonetheless, I somehow felt that this work was important, and I accepted it (thank God). Here you see something quite important: new work is often difficult to recognize, and an editor must have a nose for those things.

Действительно, непонятно, почему Фейнман сам забыл исходный вывод диаграммной техники.

Примерно в то же время, что и наша двухстраничная статья в "Physics Letters", вышла многостраничная серия статей Б.С. Де-Витта, посвященная квантованию поля Янга — Миллса. Он тоже понял необходимость определителя, но не знал интеграла Березина, так что в его работе не было локального эффективного действия с фиктивными частицами. В настоящее время за полем (c, c) закрепилось название «духи Фаддеева — Попова». Летом 1967 года мы опубликовали развернутую версию нашего подхода в виде препринта Института теоретической физики в Киеве. Когда его английский вариант появился в 1972 году в США, в предисловии к переводу сказано, что он публикуется по версии, изготовленной для Вельтмана в 1968 году. Тем самым аспирант М. Вельтмана Г. т'Хоофт узнал о нашем подходе в самом начале своей карьеры.

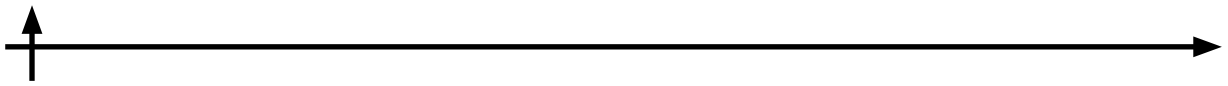
Физические приложения пришли неожиданно и довольно скоро. В 1969 году С. Вайнберг предложил модель объединенного электромагнитного и слабого взаимодействия, основанного на векторных токах лептонов (в теорию которых вошла и награждаемая сегодня работа С.С. Герштейна и Я.Б. Зельдовича) и на векторных полях Янга — Миллса. Масса для векторных по-

лей обеспечивалась полем Хиггса.

Я хорошо знал имя Вайнберга, у нас были общие интересы по проблеме многих тел, и я написал ему в Гарвард письмо, где указал, что мы с Витей знаем корректные правила работы с полями Янга — Миллса. Он ответил, что было бы хорошо показать на основании этих правил перенормируемость его модели. Я не принял всерьез его предложение, а он отдал нашу работу аспиранту, который больше играл в теннис, чем работал. К большому удовлетворению физиков перенормируемость была доказана, но в это внесли вклад другие люди и среди них А. Славнов в СССР, Ж. Зин-Жюстен во Франции, Бен Ли в США и пара т'Хоофт — Вельтман в Голландии.

В результате квантовая теория поля снова возродилась. Вскоре пришло понимание, что использование полей Янга — Миллса естественно и в теории сильных взаимодействий. Важнейшую роль в этом сыграло вычисление Г. т'Хоофтом, Х.Д. Политцером, Д. Гроссом и Ф. Вилчеком знака коэффициента β в формуле (3). Оказалось, что он отрицателен, так что предел при $\Lambda \rightarrow \infty$ имеет смысл, и перенормируемый заряд конечен, но зависит от неопределенной константы μ . Последнюю можно взять за новый параметр, задающий всю теорию. Другими словами, произошла размерная трансмутация — безразмерный заряд g заменен размерной константой μ , которая входит в теорию как масштаб. Так квантование нарушает масштабную инвариантность классической теории Янга — Миллса и вводит массовый параметр в квантовую теорию. Проблема с бесконечностями полностью решена. Осталось решить задачу, поставленную Паули при докладе Янга в 1954 году. Математический институт Клэя включил эту задачу в число семи задач 2000-летия, оценив ее решение в миллион долларов.

Так в результате описанного развития квантовой теории поля появилась стандартная модель элементарных частиц. Она охватывает сильное, электромагнитное и слабое взаимодействия, сейчас в нее входят три поколения лептонов и кварков и векторные поля, описывающие их взаимодей-



ствие. До настоящего времени эта теория хорошо описывает все экспериментальные факты, полученные на ускорителях.

Для меня как математического физика важно, что в возрождении квантовой теории поля на этом этапе математическая интуиция показала преимущество перед существующим физическим смыслом.

Успех теории поля был отмечен многими международными наградами. За объединенную модель электромагнитных и слабых взаимодействий Нобелевская премия была присуждена Вайнбергу, а вместе с ним Саламу, который сумел доказать комитету, что он имел сходную идею.

Нобелевская премия за перенормировку теории Салама – Вайнберга была присуждена М. Вельтману и Г. т'Хоофту.

Нобелевская премия за вычисление знака константы β и ее интерпретацию в терминах асимптотической свободы была дана Д. Гроссу, Ф. Вилчеку и Д. Полтцеру.

Без ложной скромности приведу два комментария по поводу моего отсутствия в этом списке. Вот что сказано в коротком тексте по поводу присуждения мне премии Гумбольдта:

Professor Faddeev is one of the leading mathematical physicists of our time. His seminal work reaches from multiparticle scattering, integrable systems through the quantization of gauge theories to new mathematical structures such as quantum groups. At least three Nobel prizes in theoretical particle physics were awarded for work that would be inconceivable without his insights. He remains to be one of the driving forces in mathematical and theoretical physics through his work, which stands out by its originality, technical mastery and depth.

Особенно ценно для меня мнение Янга, которое входит как предисловие в том моих избранных публикаций, готовящийся Гонгконгским издательством (наше издательство «Наука» не имеет возможности аналогичным образом отметить мое 80-летие):

I am very happy that my friend Faddeev's "Selected Papers" is finally published. His contributions to physics and to mathematics are

intensive and extremely important. Many people, including myself, felt that he should have shared the Nobel Prize of 1999 with 't Hooft and Veltman. Perhaps by 2049, in the Nobel archives, one could find why he was not included in that 1999 prize.

There is a strange cultural phenomenon among theoretical physicists in the 20th century: downplaying the importance of mathematics. In the 19th century, the papers and letters of Maxwell, Boltzmann, Gibbs, Kelvin, Helmholtz and Lorentz showed, if anything, the opposite value judgment about mathematics and physics. It seems that with the exuberance of the youthful Heisenberg and Pauli, there began the idea that mathematics is at best detrimental to originality in physics. Witness the sufferings and bitterness of Max Born. Or of Wigner, who in the 1960s and 1970s in Princeton, had murmured "when I was young, nothing that I did was considered important. Nowadays everything I did is considered important."

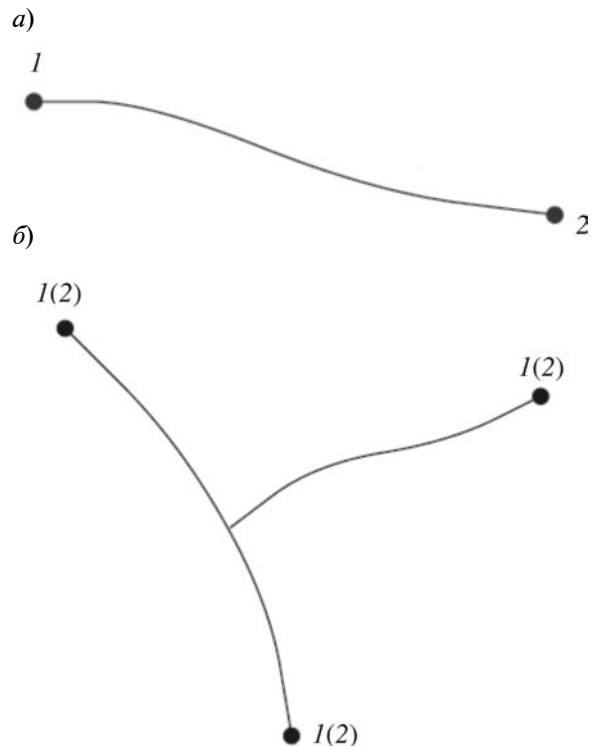


Рис. 3. Графическое представление составных частиц в стандартной модели в виде струн, удерживающих кварки: *а* – мезон, *б* – нуклон; 1, 2 – кварк и антикварк соответственно

Although the mature Heisenberg in his old age changed his views about mathematics, American hubris seemed to have taken over, to perpetuate the cultural phenomenon of downplaying the importance of mathematics. I speculate that may have been part of the reason that Faddeev was not included in the 1999 prize.

But of course, what really matters is what the author feels himself at the time of the work. This was beautifully said thirteen centuries ago by the great Tang poet Tu Fu (A.D. 712 – 770) (my translation):

*A piece of literature
Is meant for the millenium.
But its ups and downs are known
Already in the author's heart.*

Что же, остается последовать мудрому совету классического китайского поэта.

Рассказанная история моей жизни на фоне развития квантовой теории поля от-

носится к периоду конца 1960-х и начала 1970-х гг. Что же было после? Масса вещей, связанная с построением квантовой теории солитонов и сопровождающих математических конструкций. В том числе время от времени я возвращаюсь к задаче Янга, то есть построению возбуждений поля Янга – Миллса. Сейчас ясно, что эти возбуждения – глюоны – не имеют отношения к безмассовым векторным частицам. Моя старая мечта – показать, что это солитоны, имеющие полуклассическое описание в виде узлов.

Действительно, по нынешним представлениям, в стандартной модели цветные поля Янга – Миллса концентрируются в струны, которые удерживают кварки. Мезон состоит из двух кварков, нуклон – из трех (рис. 3).

Можно поставить математический вопрос: «А что будет в модели Янга – Миллса без кварков?» – «Скорее всего, струны

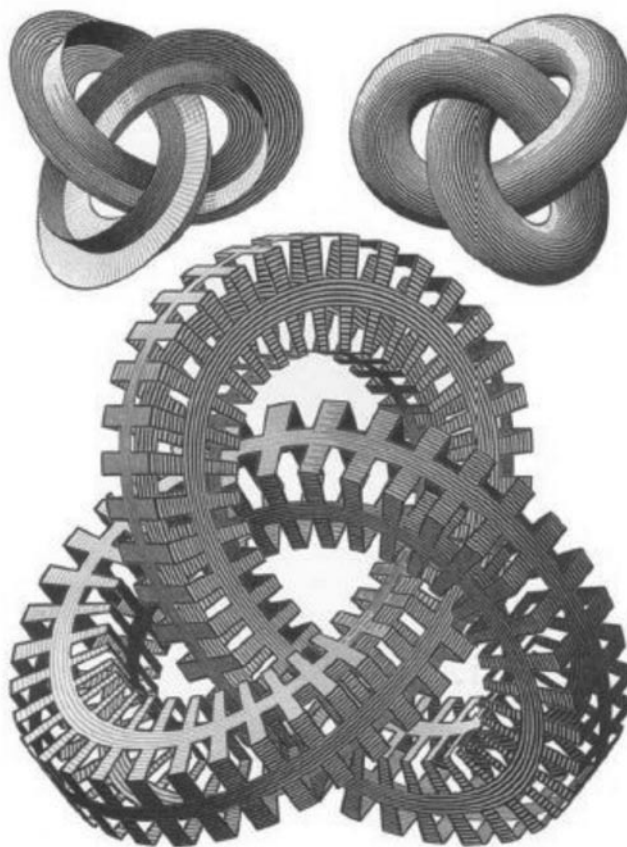


Рис. 4. М.К. Эшер (нидерландский художник-график). Гравюра «Узлы» (1965)



должны замкнуться сами с собой, образуя петли и узлы».

В середине 1970-х гг. я предложил модель теории поля, допускающую солитоны в виде узлов. С тех пор рисунок М.К. Эшера (рис. 4) находится в моем кабинете. В конце 1990-х гг. было получено вычислительное доказательство моего предположения. А в начале этого века мой коллега Антти

Ниemi и я показали, что среди динамических переменных в модели Янга — Миллса присутствуют переменные, составляющие мою модель.

Тем самым гипотеза «глюоны — узлы» получила теоретическое подтверждение, но предстоит еще большая работа для ее обоснования. Я надеюсь, что смогу найти молодых помощников для этой работы.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ФАДДЕЕВ Людвиг Дмитриевич — доктор физико-математических наук, академик РАН, директор Международного математического института им. Л. Эйлера (Санкт-Петербургское отделение Математического института им. В.А. Стеклова РАН).

191023, Россия, г. Санкт-Петербург, наб. р. Фонтанки, 27

Faddeev L.D. MY LIFE IN THE QUANTUM FIELDS (the report at the General Meeting of RAS on March 27, 2014).

THE AUTHOR

FADDEEV Ludvig D.

Euler International Mathematical Institute

(St. Petersburg Department of V.A. Steklov Institute of Mathematics of RAS)

27 Fontanka Emb., St. Petersburg, 191023, Russia



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 539.32

А.С. Семенов, А.И. Грищенко, Б.Е. Мельников

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ КОСТНОЙ ТКАНИ НА СУБМИКРОСКОПИЧЕСКОМ УРОВНЕ

Методами прямого конечно-элементного моделирования и гомогенизации проведен анализ влияния вариации морфологических характеристик (разориентация и форма кристаллитов, размеры и ориентация перемычек, степень минерализации) на механические свойства элементарного представительного объема костной ткани на уровне коллагеновых фибрилл (наноуровень). В расчетах используется морфологическая модель кости, учитывающая минеральные связи между объединениями кристаллов гидроксиапатита. Проведено сравнение полученных результатов с данными экспериментов.

КОСТНАЯ ТКАНЬ, ЭЛЕМЕНТАРНЫЙ ПРЕДСТАВИТЕЛЬНЫЙ ОБЪЕМ, ГОМОГЕНИЗАЦИЯ, ГРАНИЧНОЕ УСЛОВИЕ ПЕРИОДИЧНОСТИ, РАЗОРИЕНТАЦИЯ КОНГЛОМЕРАТОВ, МЕЖКРИСТАЛЛИТНАЯ ПЕРЕМЫЧКА, УПРУГОСТЬ, ВЯЗКОУПРУГОСТЬ, МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.

Введение

Костная ткань представляет собой иерархически структурированный материал с механическими свойствами, зависящими от морфологических параметров каждого уровня организации. На наноуровне кость может рассматриваться как композит с квазипериодической структурой, состоящий из кристаллов гидроксиапатита, включенных в волокна органического матрикса. Подобная композиция, сочетающая гидроксиапатит с большими значениями модуля упругости и коллаген с высокой вязкостью разрушения, обеспечивает повышенную жесткость, прочность и трещиностойкость кости при сравнительно небольшой массе.

Целью данной работы является анализ влияния наноструктурных параметров костной ткани на ее упругие и прочностные свойства. Данные исследования актуальны при создании искусственных костезамещающих материалов.

Под влиянием различных факторов, таких как оперативное вмешательство, хро-

ническая болезнь, естественное старение организма и т. п., в течение жизни человека происходят изменения структуры его костной ткани, что, несомненно, влияет на ее прочностные свойства. Одним из основных среди указанных изменений является разупорядоченность минеральных структур, поэтому оценка ее влияния на механические свойства костного матрикса — это одна из важнейших задач, позволяющих понять механизмы развития разнообразных патологических процессов в человеческом скелете.

Морфологическая модель костного матрикса

При проведении вычислительных экспериментов для формирования элементарного представительного объема (ЭПО) костной ткани на наноуровне использовалась модель структуры костного матрикса, предложенная в работах [1, 2]. Согласно этой модели, минералы располагаются в основном в веществе вне и внутри фибрилл (рис. 1). Объединения кристаллитов в межфибриллярных пространствах, прилегающие к коллагено-

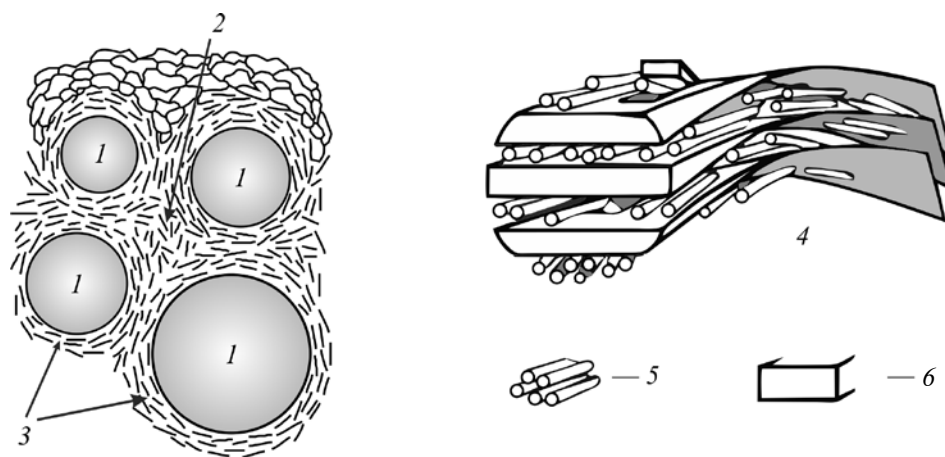


Рис. 1 [2]. Схема распределения минеральных элементов в костном матриксе: 1 – коллагеновые фибриллы; 2 – кристаллические объединения на удалении от коллагеновых фибрилл; 3 – фибриллярная минеральная манжетка; 4 – кристаллические объединения коллагеновых фибрилл; 5 – молекулы коллагена; 6 – пласти кристаллов (их копланарные объединения)

вым фибриллам, формируют манжетки и контактируют с внутрифибриллярными объединениями. На отдалении от коллагеновых фибрилл кристаллиты образуют конгломераты, в которых они ориентированы в одном направлении. По отношению друг к другу эти конгломераты расположены под разными углами. Внутрифибриллярные объединения кристаллитов образуют ряд параллельных, спирально закрученных пластов, которые ориентированы под углами $8-25^\circ$ к осям фибрилл. Отдельные объединения минералов связывают соседние пласти, обеспечивая непрерывность минерального компонента фибрилл после удаления органической составляющей [3]. Наличие минеральных связей между элементами минерального матрикса подтверждено электронно-микроскопически; проведен также детальный анализ влияния минеральной связи между объединениями кристаллитов на механические свойства костного матрикса [3].

Из приведенных выше морфологических характеристик костного матрикса можно выделить две основополагающие: пространственную упорядоченность минералов по их продольным осям относительно продольной оси фибрилл и наличие между ними минеральных связей, формирующих единый минеральный массив в каждой кости.

Элементарный представительный объем нанокompозита кости

Влияние морфологических характеристик (разориентация и форма кристаллитов, размеры и ориентация перемычек, степень минерализации) на механические свойства элементарного представительного объема костной ткани анализировалось на уровне коллагеновых фибрилл (наноуровень). В конечно-элементных (КЭ) расчетах использовались различные варианты двумерных и трехмерных ЭПО костной ткани, содержащих априори всю статистическую информацию относительно распределения и морфологии неоднородностей материала на рассматриваемом уровне. При формировании структуры ЭПО предполагалось, что минеральные конгломераты (объединения кристаллитов) расположены в шахматном порядке и погружены в органический матрикс.

На наноуровне костная ткань представляет собой неидеальную периодическую структуру, поэтому возможно введение различных ЭПО с различной степенью упрощения реальной ситуации. Возможность введения ЭПО может быть реализована для материала со статически однородным распределением характеристик при учете сепарабельности масштабов неоднородностей. В расчетах нами использовались трехкомпонентные модели костной ткани, учиты-

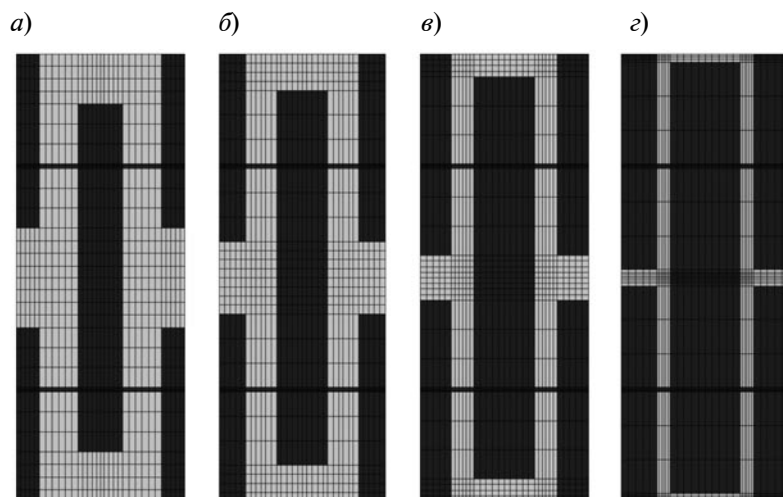


Рис. 2. КЭ-модели элементарного представительного объема наноструктурных элементов костной ткани с различным уровнем минерализации, %: 60 (а), 70 (б), 80 (в), 90 (г)

вающие наличие связи между кристаллами гидроксиапатита в виде твердотельных перемычек (рис. 2).

При решении задачи в двумерной постановке элементарный представительный объем кости (ячейка квазипериодичности) представлен центральным конгломератом и четырьмя фрагментами соседних минералов (четверть площади каждого) с четырьмя перемычками между ними и центральным минералом. Изучены модели с различным уровнем минерализации, изменяющимся от

60 до 90 % (см. рис. 2). Изменение минерализации моделировалось пропорциональным изменением размеров конгломератов при сохранении габаритов ЭПО (фиксация местоположений центров конгломератов). Наряду с базовым вариантом рассматривались также и другие альтернативные сценарии роста минерализации, связанные с непропорциональным изменением размеров конгломератов.

Рассматривались также альтернативные варианты ЭПО (рис. 3), которые включали

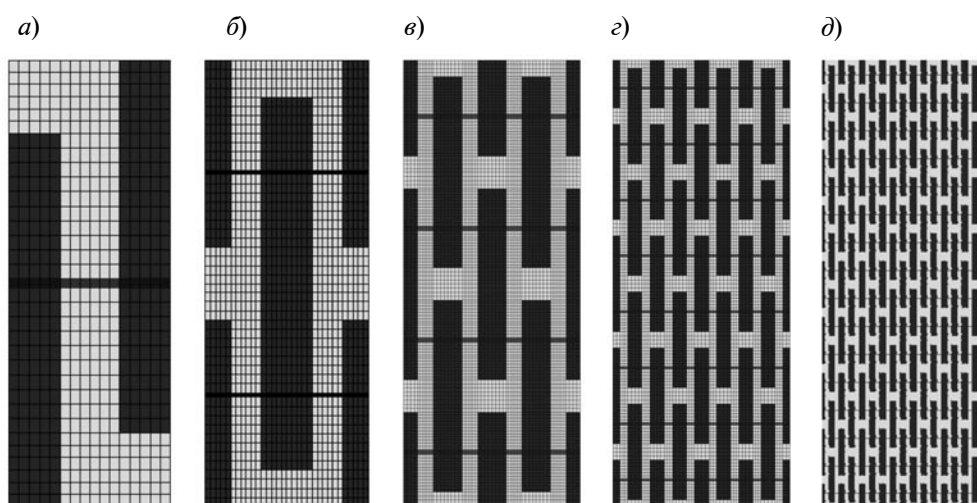


Рис. 3. КЭ-модели элементарного представительного объема наноструктурных элементов костной ткани с различным числом конгломератов (k) и перемычек (n):

а – модель $\Pi 0,5 \times 0,5$ ($k = 0,5$, $n = 1$, 304 КЭ); б – $\Pi 1 \times 1$ ($k = 2$, $n = 4$, 1216 КЭ);
в – $\Pi 2 \times 2$ ($k = 8$, $n = 16$, 4864 КЭ); г – $\Pi 4 \times 4$ ($k = 32$, $n = 64$, 19456 КЭ);
д – $\Pi 8 \times 8$ ($k = 128$, $n = 256$, 77824 КЭ)



несколько ячеек периодичности, для того чтобы затем учесть возможные взаимные разориентации конгломератов и перемычек, нерегулярное распределение местоположений центров и размеров. Увеличение числа конгломератов в ЭПО расширяет возможности учета нерегулярности микроструктуры костной ткани, а также позволяет дать более точный прогноз эффективных механических свойств, поскольку влияние внешних границ становится менее заметным.

Краевые задачи теории упругости для определения напряженно-деформированного состояния ЭПО решались методом конечных элементов. Последний основан на уравнении виртуальных работ, которое при консервативном внешнем воздействии приводит к минимизации потенциальной энергии системы. Введенные модели реализованы в КЭ программном комплексе PANTOCRATOR [4]; он позволяет автоматически генерировать дискретные модели ЭПО произвольной геометрии, получать решения краевых задач теории упругости, определять эффективные упругие модули, исследовать процессы разрушения ЭПО, анализировать распределения полей напряжений и деформаций для фрагмента морфологической структуры матрикса в наномасштабе.

Минерализация элементарного представительного объема определяется отношением плотностей компонент и геометрическими параметрами конгломератов и перемычек:

$$m = \frac{1}{1 + \left[\frac{2(a+l)(b+g)}{ab+ld} - 1 \right] \frac{\rho_c}{\rho_h}}, \quad (1)$$

где a, b — ширина и высота конгломерата; l, d — ширина и высота перемычки; g — вертикальный зазор между конгломератами; ρ_c, ρ_h — плотности коллагена и гидроксиапатита соответственно.

В расчетах при задании различных уровней минерализации размеры конгломерата (объединения кристаллитов) варьировались в диапазонах: ширина $a = 200 - 500$ нм, высота $b = 1800 - 3000$ нм. Важно отметить, что указанные габариты минералов соответствуют размерам калькосферитов, описанных А. Бойдом (Boyde) [5 – 6] в формирующихся участках кости. У взрослого человека в минерализующемся костном матриксе расстояния между фибриллами не превышают 20 – 30 нм, поэтому морфологический субстрат минерала включает в себя фрагменты минерализованных коллагеновых фибрилл (их диаметр равен 50 – 80 нм, длина — до 2000 нм) с окружающими их «манжетками», единичные матриксные везикулы (диаметр составляет 30 – 200 нм) и разнонаправленные плотные группы кристаллов, связывающие манжетки соседних фибрилл.

В расчетах принималось, что механические свойства отдельных компонент модели соответствуют изотропным материалам. Расчетные значения упругих модулей (табл. 1) выбирались как средние арифметические экспериментальных величин, приведенных в работах [7 – 10].

Применимость методов механики сплошных сред для описания деформирования нанокомпозита костной ткани

Формулировка адекватных моделей, которые бы позволяли описывать физико-механические свойства объектов, имею-

Таблица 1

Значения упругих модулей и плотностей отдельных компонент ЭПО, использованных в КЭ-расчетах

Параметр	Обозначение	Единица измерения	Значение		
			Гидроксиапатит	Коллаген	Перемычка
Модуль Юнга	E	ГПа	90	0,9	90
Коэффициент Пуассона	ν	—	0,20	0,49	0,20
Плотность	ρ	кг/м ³	3160	1500	3160

щих наноразмерный масштабный уровень, приводит к необходимости проверять соответствие основных механических характеристик наноразмерного объекта его характеристикам, полученным из макроскопических экспериментов.

В работе [11] показано, что соответствие механических характеристик наноразмерных объектов данным, полученным из макроскопических экспериментов, достигается лишь при количестве атомарных слоев не менее десяти; только тогда разница между микро- и макрохарактеристиками не превышает 11%.

В статье [11] подчеркивается, что применение механики сплошных сред допустимо лишь при учете масштабных эффектов, которые существенны при числе атомарных слоев, исчисляющихся единицами; для десятков же слоев масштабный фактор оказывает только некоторое влияние, и оно становится пренебрежимо малым для сотен таких слоев.

Таким образом, для дальнейшего исследования свойств ЭПО нанокompозита костной ткани необходимо определить порядок масштабных эффектов. Минимальный характерный размер элементов ЭПО составляет 30 нм — это ширина минеральной связи. Далее приведены размеры атомарных слоев основных веществ ЭПО [12, 13].

Вещество	Размер атомарного слоя, Å
Кристалл	$a = 9,41$,
гидроксиапатита	$c = 6,88$
Молекула коллагена	$\varnothing = 15$

Таким образом, ширина минеральной связи, которая является наименьшим размером в рассматриваемых ЭПО, содержит в себе как минимум 30 атомарных слоев, что, согласно работе [11], позволяет пренебречь масштабными факторами. Однако необходимо учитывать, что ширина зазора между конгломератами не должна быть меньше $15 \text{ Å} \cdot 10 = 150 \text{ Å} = 15 \text{ нм}$, что накладывает дополнительные, но несущественные ограничения на исследуемый диапазон изменения минерализации.

Определение эффективных упругих свойств на основе КЭ-расчетов

Эффективные свойства костной ткани на субмикроскопическом уровне принимались соответствующими ортотропному упругому материалу, для которого закон Гука можно записать в следующем виде:

$$\bar{\varepsilon} = {}^4\bar{C} \cdot \bar{\sigma}, \quad (2)$$

где $\bar{\varepsilon}$ — тензор деформаций, $\bar{\sigma}$ — тензор напряжений, ${}^4\bar{C}$ — тензор упругих податливостей 4-го ранга; двумя точками обозначена операция свертки (двойного скалярного умножения), которая в индексной форме имеет вид

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \bar{C}_{ijkl} \bar{\sigma}_{lk}.$$

Черта над обозначениями введенных тензоров означает соответствие гомогенному (осредненному) материалу. Характеристики отдельных компонент гетерогенного материала будут обозначаться без верхней черты. Для ортотропного материала тензору 4C в собственных осях анизотропии соответствует симметричная матрица упругих податливостей $[\bar{C}]$ следующей структуры:

$$[\bar{C}] = \begin{bmatrix} \frac{1}{\bar{E}_1} & -\frac{\bar{\nu}_{21}}{\bar{E}_2} & -\frac{\bar{\nu}_{31}}{\bar{E}_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\bar{\nu}_{12}}{\bar{E}_1} & \frac{1}{\bar{E}_2} & -\frac{\bar{\nu}_{32}}{\bar{E}_3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\bar{\nu}_{13}}{\bar{E}_1} & -\frac{\bar{\nu}_{23}}{\bar{E}_2} & \frac{1}{\bar{E}_3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\bar{G}_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\bar{G}_{23}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\bar{G}_{31}} \end{bmatrix}, \quad (3)$$

где $\bar{E}_i$, $\bar{\nu}_{ij}$, $\bar{G}_{ij}$ — модули Юнга, коэффициенты Пуассона и модули сдвига ($i, j = 1, 2, 3$).

В силу симметрии матрицы $[\bar{C}]$ выполняются равенства

$$\frac{\bar{\nu}_{12}}{\bar{E}_1} = \frac{\bar{\nu}_{21}}{\bar{E}_2}, \quad \frac{\bar{\nu}_{13}}{\bar{E}_1} = \frac{\bar{\nu}_{31}}{\bar{E}_3}, \quad \frac{\bar{\nu}_{23}}{\bar{E}_2} = \frac{\bar{\nu}_{32}}{\bar{E}_3}.$$

Упругие модули определяются при од-



ноосном напряженном состоянии на основе соотношений

$$\bar{E}_i = \frac{\bar{\sigma}_{ii}}{\bar{\varepsilon}_{ii}}, \quad \bar{\nu}_{ij} = -\frac{\bar{\varepsilon}_{ij}}{\bar{\varepsilon}_{ii}}.$$

При произвольном напряженном состоянии упругие модули можно найти на основе решения системы алгебраических уравнений.

При решении задачи в двумерной постановке (плоское деформированное состояние) достаточно найти четыре упругие константы: $\bar{E}_1, \bar{E}_2, \bar{\nu}_{12}, \bar{G}_{12}$. Ряд упругих модулей в направлении оси 3 (ортогональна рассматриваемой плоскости) можно оценить без потери точности по правилу смесей. Разносопротивляемость костной ткани при растяжении и сжатии не учитывалась в рамках данной модели.

Для определения эффективных упругих свойств ЭПО нанокompозита костной ткани решалась серия краевых задач с различными граничными условиями. Верхнюю и нижнюю границы упругих модулей обычно получают с использованием граничных условий для вектора перемещений и вектора напряжений соответственно. В данном исследовании использовалось три типа граничных условий, которые сравнивались между собой по точности при решении задач определения упругих модулей. Указанные условия допускают следующие математические формулировки.

Кинематические граничные условия:

$$\mathbf{u}|_{S_u} = \bar{\mathbf{\varepsilon}}^* \cdot \mathbf{r}. \quad (4)$$

Статические граничные условия:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}|_{S_\sigma} = \mathbf{n} \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}^*, \quad (5)$$

Условия периодичности:

$$\mathbf{u}|_{S_{u1}} = \mathbf{u}|_{S_{u2}} + \bar{\mathbf{\varepsilon}}^* \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (6)$$

Здесь $\mathbf{u}$ — вектор перемещений; $\mathbf{r}$ — радиус-вектор; $\bar{\mathbf{\varepsilon}}^*$ — заданный постоянный симметричный тензор, соответствующий различным деформируемым состояниям (осевые растяжения/сжатия и сдвиги); $\bar{\boldsymbol{\sigma}}^*$ — заданный постоянный симметричный тензор, соответствующий различным напряженным состояниям (осевые растяжения/сжатия и сдвиги).

Условие периодичности (6) может быть переписано в виде

$$\mathbf{u}|_{S_u} = \bar{\mathbf{\varepsilon}}^* \cdot \mathbf{r} + \tilde{\mathbf{w}},$$

где флуктуации $\tilde{\mathbf{w}}$ являются периодическими, т. е. принимающими одинаковые значения на противоположных сторонах ЭПО.

В этом случае вектор напряжений $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ принимает противоположные значения на противоположных сторонах ЭПО. Граничные условия (4) — (6) удовлетворяют условию макрооднородности Хилла

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \bar{\mathbf{\varepsilon}} = \bar{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \bar{\mathbf{\varepsilon}},$$

что обеспечивает существование и единственность соответствующих краевых задач, а также равенство энергий при деформировании гомогенизированного и гетерогенного материалов ЭПО.

Для определения компонент матрицы эффективных упругих податливостей $[\bar{\mathbf{C}}]$ (3) использовались осредненные по представительному объему значения тензоров деформаций и напряжений, полученных в КЭ-решении:

$$\bar{\mathbf{\varepsilon}} = \frac{1}{V_{\text{ЭПО}}} \int_{V_{\text{ЭПО}}} \boldsymbol{\varepsilon} dV, \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{V_{\text{ЭПО}}} \int_{V_{\text{ЭПО}}} \boldsymbol{\sigma} dV. \quad (7)$$

Краевые задачи решались в предположении реализации плоского деформированного состояния. Для определения двух модулей упругости $\bar{E}_1$ и $\bar{E}_2$ достаточно получить КЭ-решение двух краевых задач при задании граничных условий, обеспечивающих растяжение (или сжатие) только в вертикальном и только в горизонтальном направлениях.

Оценка точности решений

Для оценки точности численных решений был проведен анализ практической сходимости значений эффективных модулей упругости ЭПО при увеличении числа КЭ и ячеек периодичности. Достаточный уровень дискретизации модели выбирался из условия точности 1%. Были получены значения верхней и нижней границ модулей, соответствующие случаям задания в качестве граничных условий перемещений (4) и напряжений (5) (рис. 4). Установлено,

что если задавать условия периодичности (6), то удовлетворительная (статистически существенная) точность, т. е. достаточная близость к асимптотическому (предельному) значению, достигается уже при использовании ЭПО, включающих одну ячейку периодичности (КЭ-модель П 1×1). Если же ставить граничные условия для перемещений и напряжений, то сходимость достигается только при использовании ЭПО, включающих 16 ячеек периодичности (П 4×4). Данный вывод подтверждается также анализом зависимости экстремальных значений напряжений в ЭПО.

Поскольку при использовании условий периодичности (6) обеспечивается хорошая точность для ЭПО с одной ячейкой периодичности (это позволяет существенно сократить вычислительные затраты по сравнению с альтернативными вариантами граничных условий (4) и (5)), в дальнейших расчетах будут использоваться только условия периодичности.

Таким образом, корректно выбранные тип граничных условий и число ячеек периодичности, достаточное для обеспечения заданной точности, а также обоснованный выбор числа КЭ, обеспечивают проведение информативных вычислительных экспериментов с виртуальным варьированием

параметров модели. Результаты таких экспериментов позволяют выявить основные закономерности влияния микроструктуры костной ткани на поведение эффективных упругих модулей и на характеристики напряженного состояния.

Анализ напряженно-деформированного состояния ЭПО при различных видах нагружения

Наличие в ЭПО гетерогенной микроструктуры приводит к реализации неоднородного многоосного напряженного состояния. Для сравнения уровней напряженного состояния для различных моделей и условий нагружения используется эквивалентная величина — интенсивность напряжений по Мизесу:

$$\sigma_i = \{ (1/2)[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2] + 3[\tau_{xy}^2 + \tau_{yz}^2 + \tau_{zx}^2] \}^{1/2}. \quad (8)$$

Она представляет собой евклидову норму в пространстве компонент девиатора тензора напряжений.

Анализ распределения полей интенсивности напряжений по Мизесу σ_i при растяжении ЭПО в вертикальном (рис. 5, а, б) и в горизонтальном (рис. 5, в, г) направлениях показал, что в условиях вертикальной

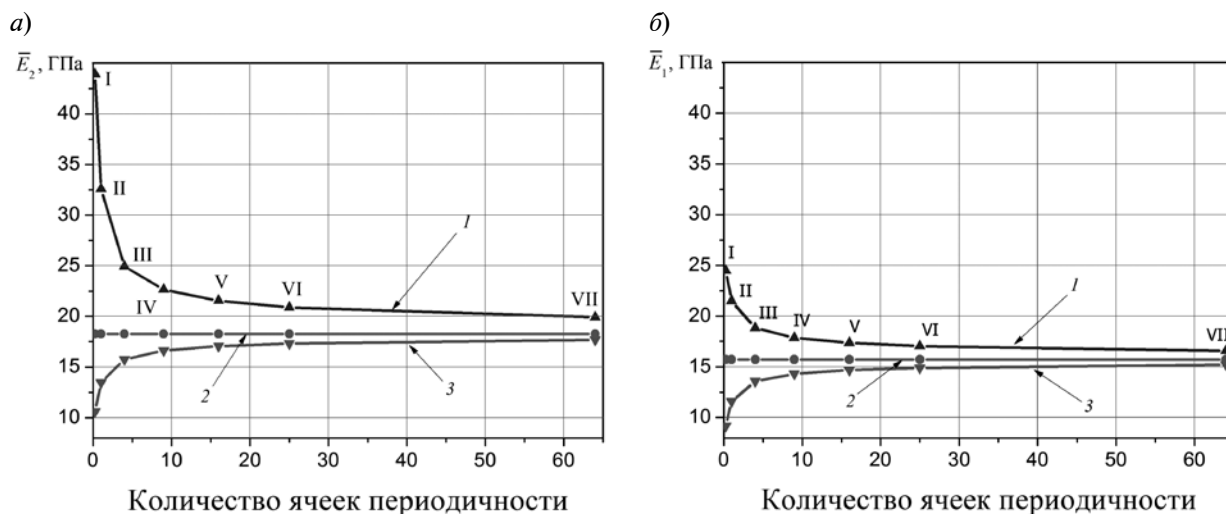


Рис. 4. Зависимости эффективных значений модулей упругости в вертикальном (а) и в горизонтальном (б) направлениях от количества ячеек периодичности в ЭПО при различных граничных условиях. Каждое значение количества ячеек соответствует определенной КЭ-модели: П $0,25 \times 0,25$ (I), П 1×1 (II), П 2×2 (III), П 3×3 (IV), П 4×4 (V), П 5×5 (VI), П 8×8 (VII). Граничные условия: по формуле (4) — кривая 1; (5) — 3; (6) — 2

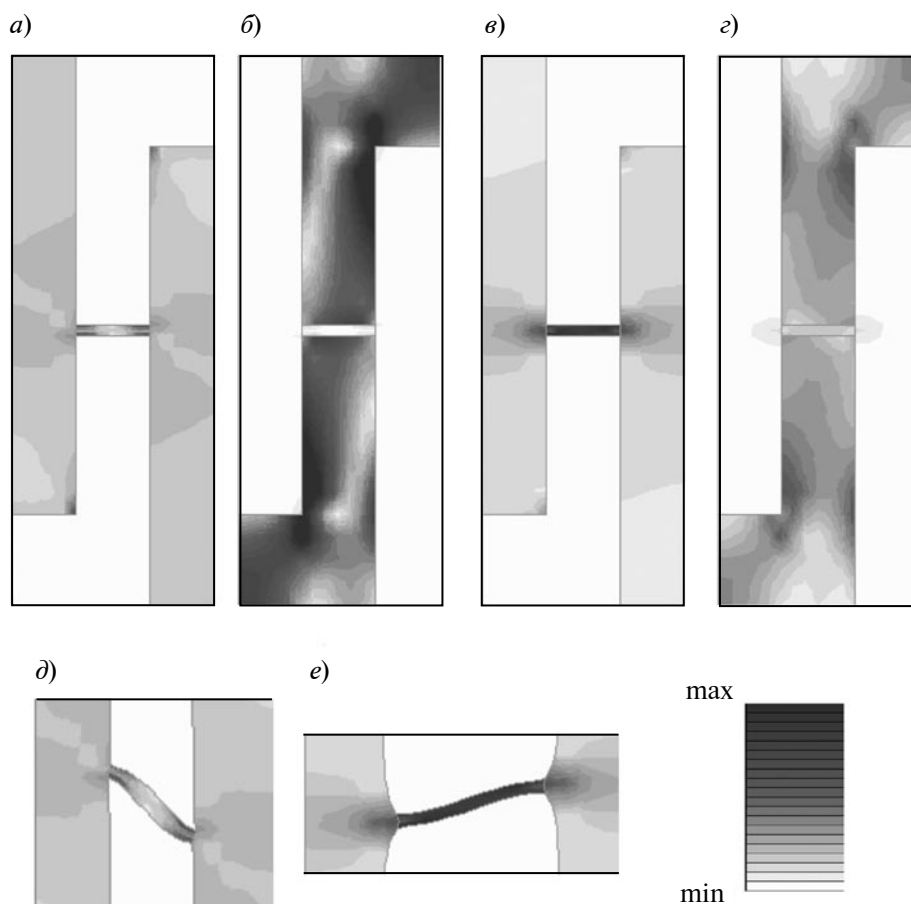


Рис. 5. Распределения интенсивностей напряжений σ_i (а, в) и деформаций ε_i (б, г) по Мизесу в центральном фрагменте ЭПО (1/4 часть) при различных направлениях воздействия нагрузки: вертикальном (а, б, д) и горизонтальном (в, г, е).

На графиках д, е дополнительно представлено деформированное состояние перемычки с полями интенсивности напряжений

нагрузки в морфологической модельной структуре (она описана выше) возникают две области экстремальных значений (рис. 5, а). Первая область локализуется в угловых точках минералов, вторая — в местах их соединения с перемычками. При этом напряжения в минеральных объемах значительно выше, чем в органическом матрице (рис. 5, а, г), а деформации — наоборот, значительно ниже (рис. 5, б, г).

Перемычка оказывается наиболее нагруженным элементом ЭПО и при вертикальной (см. рис. 5, а), и при горизонтальной (см. рис. 5, в) нагрузках, а вот углы минеральной составляющей — только при вертикальном воздействии (см. рис. 5, а, б). Перемычка при вертикальной нагрузке ра-

ботает на срез (рис. 5, д), с реализацией напряженного состояния, близкого к изгибу, а при горизонтальной — на растяжение/сжатие (рис. 5, е). Таким образом, и при горизонтальной, и при вертикальной нагрузках наибольший риск разрушения возникает в зонах соединения перемычки с минеральной компонентой, однако в первом случае он оказывается выше.

Влияние различных факторов на механические свойства ЭПО костной ткани

Наличие перемычек. Результаты КЭ-расчетов для модели с перемычками сравнивались с аналогичными результатами, полученными при отсутствии перемычек

Таблица 2

Сравнение расчетных значений эффективных упругих модулей для ЭПО с перемычками и без перемычек

Элементарный представительный объем (ЭПО)	Модуль упругости, ГПа	
	$\bar{E}_2$	$\bar{E}_1$
С перемычками	18,28	15,71
Без перемычек	16,63	13,32
Различие ЭПО	1,65 (9,9%)	2,39 (17,9%)

Обозначения: $\bar{E}_1$, $\bar{E}_2$ – модули упругости в горизонтальном и вертикальном направлениях нагрузки, соответственно.

(прочие условия одинаковы). Установлено, что наличие перемычек при растяжении в горизонтальном направлении повышает уровень экстремальных напряжений (относительная интенсивность напряжений $\sigma_i / \bar{\sigma}_i$) на 52 %. При этом уровень интенсивности напряжений в угловой точке минеральной составляющей снижается на 19 %.

При растяжении в вертикальном направлении наличие перемычек снижает уровень экстремальных напряжений (интенсивность напряжений), возникающих в угловой точке минеральной компоненты, на 4 %.

Перемычки увеличивают модуль упругости $\bar{E}_1$ (горизонтальное направление) на 17 % (табл. 2) и модуль упругости $\bar{E}_2$ (вертикальное направление) на 10 %. Следует отметить, что наблюдаемое увеличение жесткости вызвано изменением структуры (топологии) ЭПО, вносимым появлением перемычек, а не повышением минерализации, влияние которой на упругие модули на два порядка меньше.

Таким образом, наличие перемычек влияет на характер деформирования коллагена в примыкающих к ним областях, на распределение интенсивности напряжений в минеральной составляющей в окрестности места ее соединения и на значения эффективных упругих модулей. Как и следовало ожидать, существование перемычек в костной ткани человека увеличивает ее жесткость независимо от направления действующих нагрузок.

Углы наклона минеральной составляющей. Чтобы оценить влияние углов разориентации минеральной компоненты в ЭПО на ее напряженно-деформированное состояние и эффективные упругие свойства, нами проведены КЭ-расчеты с тремя различными значениями указанного угла: 0°, 4° и 8°. Результаты проведенных вычислительных экспериментов показали, что отклонение единичного конгломерата от вертикали фактически не оказывает влияния на значения эффективных упругих модулей $\bar{E}_1$, $\bar{E}_2$ (отличия составляют менее 1 %), но такое отклонение влияет на уровень максимальной интенсивности напряжений (рис. 6).

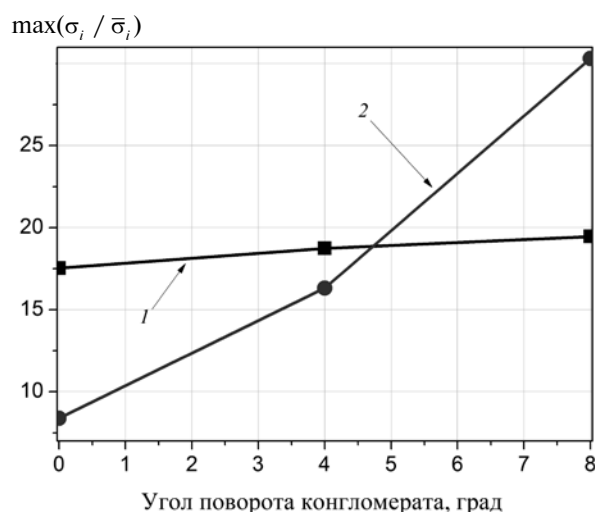


Рис. 6. Зависимости максимальной интенсивности напряжений от угла поворота центрального конгломерата в фрагменте ЭПО при различных направлениях нагружения: по горизонтали (1) и по вертикали (2)

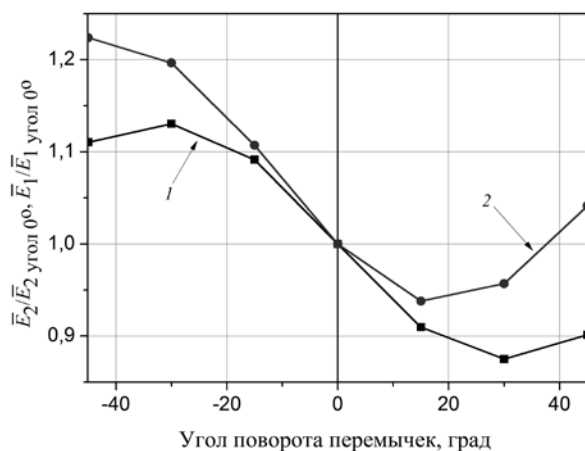


Рис. 7. Зависимости эффективных упругих модулей ЭПО нанокompозита костной ткани от угла поворота перемычек; 1, 2 – величины $\bar{E}_1/\bar{E}_1 \text{ угол } 0^\circ$ и $\bar{E}_2/\bar{E}_2 \text{ угол } 0^\circ$ соответственно

Полученные результаты позволяют заключить, что разупорядоченность минералов по продольным осям приводит к росту напряжений в костном матриксе при одной той же нагрузке. Следовательно, разупорядоченность снижает прочностные свойства костного матрикса на наноуровне его организации, а значит, вызывает ухудшение этих свойств костных структур в целом.

Угол наклона перемычек. Чтобы оценить влияние угла наклона перемычек на напряженно-деформированное состояние и эффективные упругие свойства ЭПО, нами была проведена серия КЭ-расчетов с различными углами отклонения от горизонтального уровня: на -45° , -30° , -15° , $+15^\circ$, $+30^\circ$ и $+45^\circ$. Результаты расчетов показали, что максимальное отклонение $\bar{E}_2$ от значения при горизонтальном положении перемычки не превышает 23 %, а такое же отклонение $\bar{E}_1$ не превышает 13 % (рис. 7). Установлено также, что поворот перемычек сказывается на степени максимальной интенсивности напряжений.

Согласно полученным результатам расчета, поворот перемычек в ЭПО при одних условиях нагружения увеличивает уровень экстремальных напряжений в ней, а при других – уменьшает. Так, при отклонении перемычки на 15° в направлении против

часовой стрелки растяжение в горизонтальном направлении характеризуется снижением максимальной относительной интенсивности напряжений на 2%, при 30° – на 12 %, при 45° – на 47 %, соответственно, по сравнению с идеализированным вариантом (без поворота). Этот эффект вызван тем, что при растяжении в горизонтальном направлении ЭПО сжимается в вертикальном, и поэтому соседние конгломераты смещаются по вертикали друг относительно друга; это приводит к повороту соединяющей их перемычки и возникновению в ней дополнительных усилий. В зависимости от направления начального отклонения перемычки от горизонтали вертикальные смещения конгломератов могут создать в них как дополнительное сжимающее напряжение (для перемычек, у которых поворот под нагрузкой компенсирует начальный поворот), так и дополнительное растягивающее напряжение (для перемычек, у которых поворот под нагрузкой увеличивает начальное отклонение). Появление дополнительных напряжений может как компенсировать, так и усиливать первоначальное напряжение, возникшее от растяжения в горизонтальном направлении. Данный сценарий реализуется и при нагружении в вертикальном направлении, для которого отклонение перемычки на 15° в направлении против часовой стрелки приводит к увеличению максимальной относительной интенсивности напряжений на 65 %, при 30° – на 80 %, при 45° – на 47 %, по сравнению с идеализированным вариантом (без поворота).

Таким образом, полученные данные позволяют утверждать, что существуют неоптимальные направления минеральных связей по отношению к трендовым направлениям механических нагрузок. В результате повышается риск их разрушения, что можно рассматривать как начальный этап формирования усталостных повреждений.

Минерализация костной ткани. Чтобы оценить влияние минерализации ЭПО на его напряженно-деформированное состояние и эффективные упругие свойства, нами проведены КЭ-расчеты с различной минерализацией костной ткани (%): 25, 30, 45, 50, 60, 70, 80, 90 и 95. Результаты проведенных

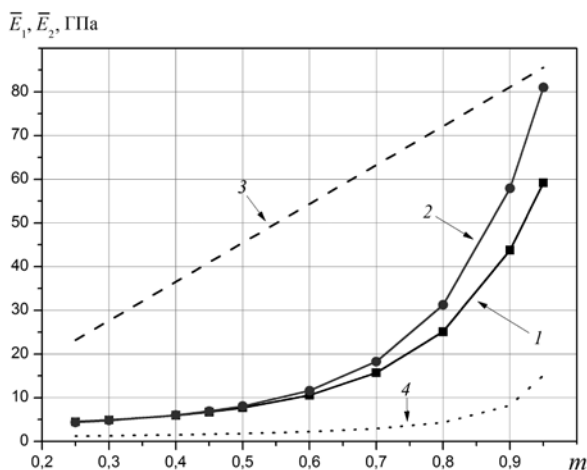


Рис. 8. Зависимости эффективных упругих модулей ЭПО нанокompозита костной ткани от степени его минерализации.

1, 2 – $\bar{E}_1$, $\bar{E}_2$ соответственно (данные получены методом КЭ-гомогенизации); 3, 4 – аналитические оценки Фойгта и Рейса (осредненные жесткости и податливости компонент соответственно)

вычислительных экспериментов показали, что изменение минерализации существенно влияет на эффективные модули (рис. 8) и на осредненную по объему интенсивность напряжений в ЭПО и в его составляющих. Так, при изменении минерализации с 60 до 70 %, $\bar{E}_2$ (в вертикальном направлении) из-

меняется на 55,7 %, а $\bar{E}_1$ (в горизонтальном направлении) – на 47,7 %. Осредненная же по всему объему интенсивность напряжения, при том же изменении минерализации, возрастает в ЭПО на 54 %.

Степень вытянутости конгломератов. Важным морфологическим параметром является соотношение ширины и высоты конгломератов. Чтобы выяснить влияние указанного параметра на величины эффективных упругих модулей, была поставлена серия вычислительных экспериментов с пропорцией b/a , меняющейся в пределах от 5 до 10. КЭ-модели для отношений b/a , равных 5, 7 и 9, представлены на рис. 9. Установлено, что свойства ЭПО костной ткани чрезвычайно сильно зависят от степени вытянутости конгломератов. Так, при увеличении отношения b/a от 5 до 10 величина $\bar{E}_2$ возрастает почти в три раза, а $\bar{E}_1$ – в полтора (рис. 10).

Вязкие свойства органического матрикса. Для анализа влияния вязких свойств органического матрикса рассматривалась ползучесть ЭПО в течение одного часа при напряжении 10 МПа (12-кратная весовая перегрузка). Результаты расчетов показали, что вязкие эффекты крайне незначительны (рис. 11). Так, интенсивность деформаций ползучести, осредненная по ЭПО, не пре-

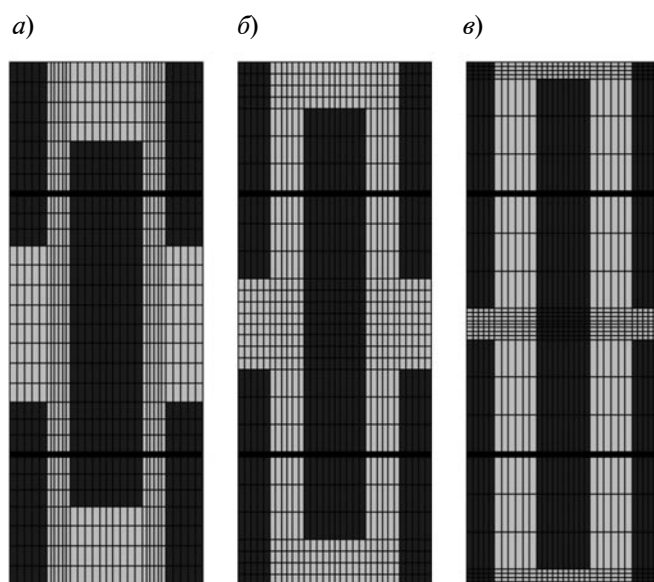


Рис. 9. КЭ-модели ЭПО, полученные при разных отношениях b/a : 5 (а), 7 (б); 9 (в); a , b – ширина и высота конгломерата соответственно

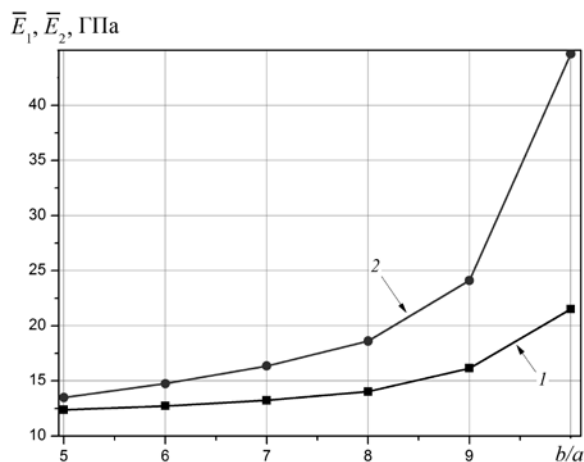


Рис. 10. Зависимости эффективных упругих модулей ЭПО в горизонтальном (1) и вертикальном (2) направлениях от степени вытянутости конгломератов; 1, 2 – $\bar{E}_1$, $\bar{E}_2$ соответственно

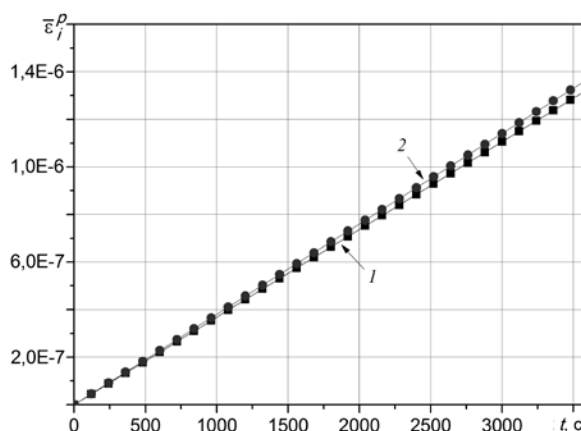


Рис. 11. Зависимости осредненной по ЭПО интенсивности деформаций ползучести от времени для случаев наличия (1) и отсутствия (2) перемычек

восходит 0,00014 %. Также видно, что наличие перемычек практически не оказывает влияния на осредненную интенсивность деформаций ползучести.

Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными

В целях верификации предложенной модели было проведено сравнение расчетных значений упругих модулей с экспериментальными данными. В результате такого сравнения получено их хорошее соответствие (табл. 3). Расчетная модель ЭПО, ко-

торая учитывает наличие перемычек, предлагает более точный прогноз.

Заключение

В работе предложена и исследована трехфазная модель костной ткани на субмикроскопическом уровне, учитывающая наличие связи между кристаллами гидроксиапатита в виде твердотельных перемычек.

Методом конечно-элементной гомогенизации определены эффективные упругие модули элементарного предста-

Таблица 3

Сравнение расчетных значений эффективных упругих модулей ЭПО костной ткани с экспериментальными данными

КЭ-модель ЭПО либо эксперимент	Модуль упругости, ГПа	
	$\bar{E}_2$	$\bar{E}_1$
Модель с перемычками, $m = 0,7$	18,3	15,7
Модель без перемычек, $m = 0,694$	16,6	13,3
Эксперимент Bonfield W. [14]	18,5	9,5
Эксперимент Ashman R.B. [15]	20,0	13,5
Эксперимент Turner C.H. [16]	20,6	16,5

Обозначение: m – степень минерализации костной ткани.

вительного объема нанокompозита костной ткани в предположении ортотропии результирующих свойств. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало их хорошее соответствие.

Проведены многовариантные вычислительные эксперименты с варьированием минерализации костной ткани. Выполнен анализ влияния минерализации ЭПО на напряженное состояние представительного объема и его эффективные модули.

Авторы выражают благодарность доктору медицинских наук, сотруднику Научно-исследовательского института травматологии и ортопедии им. Р.Р. Вредена А.С. Аврунину и доктору медицинских наук, сотруднику Всероссийского института лекарственных и ароматических растений А.А. Докторову за плодотворные научные дискуссии по постановке задачи и обсуждению полученных результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Денисов-Никольский Ю.И., Миронов С.П., Омеляненко Н.П., Матвейчук И.В. Актуальные проблемы теоретической и клинической остеопатологии. М.: ОАО «Типография «Новости», 2005. 336 с.
2. Докторов А.А., Денисов-Никольский Ю.И., Жилкин Б.А. Структурная организация костного минерала // Бюллетень экспериментальной биологии и медицины. 1996. Т. 122. № 12. С. 687–691.
3. Аврунин А.С., Семёнов А.С., Фёдоров И.В., Мельников Б.Е., Докторов А.А., Паршин Л.К. Влияние минеральной связи между объединениями кристаллитов на механические свойства костного матрикса. Моделирование методом конечных элементов // Травматология и ортопедия России. 2013. № 2 (67). С. 1–12.
4. Семёнов А.С. PANTOCRATOR – конечно-элементный программный комплекс, ориентированный на решение нелинейных задач механики // В кн.: Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности конструкций и методы их решения. Труды V Международной конференции. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2003. С. 466–480.
5. Boyde A., Hobdell M.H. Scanning electron microscopy of lamellar bone, *Z. Zellforsch.* 1969. No. 93. S. 213–231.
6. Boyde A. Scanning electron microscope studies of bone. *The biochemistry and physiology of bone*. Ed. G.H. Bourne. N.Y., London: Academic Press, 1972. No. 1, pp. 259–310.
7. Lawson A.C., Czernuszka J.T. Collagen-calcium phosphate composites, *Proc. Instn. Mech. Engrs.* 1998. Vol. 212. Part H, pp. 413–425.
8. Gilmore R.S., Katz J.L. Elastic properties of apatites. *Journal of Materials Science*. 1982. Vol. 17. No. 4, pp. 1131–1141.
9. Katz J.L., Ukraincik K. On the anisotropic elastic properties of hydroxyapatite. *J. Biomechanics*. 1971. Vol. 4, pp. 221–227.
10. Cowin S.C. Bone mechanics. Boca Raton, CRC Press, FL, 1989.
11. Кривцов А.М., Морозов Н.Ф. О механических характеристиках наноразмерных объектов // Физика твердого тела. 2002. Т. 44. № 12. С. 2158–2163.
12. Bhatnagar V.M. Refinement of the synthetic hydroxyapatite cell parameters, *Contributions to Mineralogy and Petrology*. 1969. Vol. 22. Iss. 4, pp. 375–378.
13. Barkaoui A., Hambli R. Finite element 3D modeling of mechanical behavior of mineralized collagen microfibrils. *J. Appl. Biomater. Biomech.* 2011. Sep-Dec. Vol. 9. No. 3, pp. 199–205.
14. Bonfield W., Grynblas M.D. Anisotropy of the Young's modulus of bone, *Nature*. 1977. Vol. 270. No. 5636, pp. 453–454.
15. Ashman R.B., Cowin S.C., Van Buskirk W.C., Rice J.C. A continuous wave technique for the measurement of the elastic properties of cortical bone, *J. Biomechanics*. 1984. Vol. 5, pp. 349–361.
16. Turner C.H., Rho J.-Y., Takano Y., Tsui T.Y., Pharr G.M. The elastic properties of trabecular and cortical bone tissue are similar: Results from two microscopic measurement techniques. *Journal of Biomechanics*. 1999. Vol. 32, pp. 437–441.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СЕМЕНОВ Артём Семенович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Механика и процессы управления» Института прикладной математики и механики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
Semenov.Artem@googlegmail.com



ГРИЩЕНКО Алексей Иванович — студент Института прикладной математики и механики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

gai-gr@yandex.ru

МЕЛЬНИКОВ Борис Евгеньевич — доктор технических наук, заведующий кафедрой сопротивления материалов Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

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

kafedra@ksm.spbstu.ru

Semenov A.S., Grishchenko A.I., Melnikov B.E. FINITE ELEMENT MODELING OF BONE DEFORMATION AT THE SUBMICROSCOPIC SCALE.

By means of the direct finite element simulation and homogenization the analysis of variation influence in the morphological characteristics (hydroxyapatite crystals disorientation, sizes and orientation of mineral bridges, mineralization) on mechanical properties of the representative volume element of bone at the nanoscale (at the collagen fibrils level) is carried out. The morphological model of bone with an account of the mineral bridges between the associations of the hydroxyapatite crystals is used in the computations. The purpose of the paper is to analyze the influence of the nanostructure parameters of bone on its elastic and strength properties. Such studies are important for the creation of artificial bone-substitute materials. The analysis of the stress-strain state of the RVE of bone tissue has been performed in order to determine the location of the most critical points and deformation mechanisms of bridges. The most loaded elements are the corners of conglomerates and corners of bridges. Taking account of the bridges leads to the decrease of the von Mises stresses in the corner of the conglomerate and to the increase of the effective elastic moduli in the vertical and horizontal directions. The effects of orientation of conglomerates and bridges on the stress state of the representative volume were analyzed. The influence of the bone mineralization on the effective elastic moduli and stress state were investigated. The comparison of obtained results with experimental data was performed and discussed.

BONE TISSUE, REPRESENTATIVE VOLUME ELEMENT, HOMOGENIZATION, BOUNDARY CONDITION OF PERIODICITY, MISALIGNMENT OF CONGLOMERATES, INTERCRYSTALLINE BRIDGE, ELASTICITY, VISCOELASTICITY, FINITE ELEMENT METHOD.

REFERENCES

1. Denisov-Nikolskiy Yu.I., Mironov S.P., Omelyanenko N.P., Matveychuk I.V. *Aktualnyye problemy teoreticheskoy i klinicheskoy osteoartrologii*. Moscow, OAO «Tipografiya "Novosti"», 2005, 336 s.
2. Doktorov A.A., Denisov-Nikolskiy Yu.I., Zhilkin B.A. Strukturnaya organizatsiya kostnogo minerala. *Byulleten eksperimentalnoy biologii i meditsiny*, 1996, T. 122, № 12, pp. 687-691.
3. Avrunin A.S., Semenov A.S., Fedorov I.V., Melnikov B.Ye., Doktorov A.A., Parshin L.K. Vliyaniye mineralnoy svyazi mezhdru obyedineniyami kristallitov na mekhanicheskiye svoystva kostnogo matriksa. Modelirovaniye metodom konechnykh elementov. *Travmatologiya i ortopediya Rossii*, 2013, № 2 (67), pp. 1-12.
4. Semenov A.S. PANTOCRATOR — konechno-elementnyy programmnyy kompleks, oriyentirovanny na resheniye nelineynykh zadach mekhaniki. V kn.: *Nauchno-tekhnicheskiye problemy prognozirovaniya nadezhnosti i dolgovechnosti konstruktivnykh i metody ikh resheniya: tr. V mezhdunarodnoy konf.* SPb.: Izd-vo SPbGPU, 2003, pp. 466-480.
5. Boyde A., Hobdell M.H. Scanning electronmicroscopy of lamellar bone. *Z. Zellforsch.* 1969, N. 93, S. 213-231.
6. Boyde A. Scanning electron microscope studies of bone. In: *The biochemistry and physiology of bone*. Ed.:G.H. Bourne. Academic Press., N.Y. and London, 1972. No. 1, pp. 259-310.
7. Lawson A.C., Czernuszka J.T. Collagen-calcium phosphate composites. *Proc. Instn. Mech. Engrs.* 1998, Vol. 212, Part H, pp. 413-425.
8. Gilmore R.S., Katz J.L. Elastic properties of apatites. *Journal of Materials Science*. 1982, Vol. 17, No. 4, pp. 1131-1141.
9. Katz J.L., Ukraincik K. On the anisotropic elastic properties of hydroxyapatite. *J. Biomechanics*, 1971, Vol. 4, pp. 221-227.
10. Cowin S.C. *Bone Mechanics*, CRC Press, Boca Raton, FL, 1989.

11. **Krivtsov A.M., Morozov N.F.** O mekhanicheskikh kharakteristikakh nanorazmernykh obyektov. *Fizika tverdogo tela*. 2002. T. 44. № 12, pp. 2158-2163.

12. **Bhatnagar V.M.** Refinement of the synthetic hydroxyapatite cell parameters. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, 1969, Vol. 22, Iss. 4, pp. 375-378.

13. **Barkaoui A., Hambli R.** Finite element 3D modeling of mechanical behavior of mineralized collagen microfibrils. *J. Appl. Biomater. Biomech.* 2011, Sep-Dec; Vol. 9, No. 3, pp. 199-205.

14. **Bonfield W., Gryn timer M.D.** Anisotropy of the Young's modulus of bone. *Nature*, 1977; Vol. 270, No. 5636, pp. 453-454.

15. **Ashman R.B., Cowin S.C., Van Buskirk W.C., Rice J.C.** A continuous wave technique for the measurement of the elastic properties of cortical bone. *J. Biomechanics*. 1984, Vol. 5, pp. 349-361.

16. **Turner C.H., Rho J.-Y., Takano Y., Tsui T.Y., Pharr G.M.** The elastic properties of trabecular and cortical bone tissue are similar: Results from two microscopic measurement techniques. *Journal of Biomechanics*, 1999, Vol. 32, pp. 437-441.

THE AUTHORS

SEMENOV Artem S.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

Semenov.Artem@googlemail.com

GRISHCHENKO Alexei I.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

gai-gr@yandex.ru

MELNIKOV Boris E.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

kafedra@ksm.spbstu.ru



КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ЖЕЛЕЗОБЕТОННЫХ КОНСТРУКЦИЙ

В работе проанализированы и использованы современные методы вычислительной механики для моделирования напряженно-деформированного состояния железобетонных конструкций с учетом нелинейных физико-механических свойств бетона и явления трещинообразования.

БЕТОН, ЖЕЛЕЗОБЕТОН, АРМАТУРА, ПРОЧНОСТЬ, МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ.

Введение

Одна из задач, встающих перед инженерами в области обоснования прочности конструкций и сооружений атомных электростанций (АЭС), – это обеспечение безопасности реакторного здания при действии динамических нагрузок: землетрясения, последствий падения тяжелого пассажирского самолета и др. Применение в расчетах линейно-упругих моделей материалов и соотношений линейной теории упругости приводит к излишне консервативным результатам, а также к параметрам конструкций и сооружений, которые неоптимальны экономически и технологически. Показательным примером могут служить железобетонные несущие элементы реакторного здания АЭС, толщины которых, в соответствии с требованиями нормативной документации, достигают двух метров.

В данной работе рассмотрены и использованы современные методы вычислительной механики для анализа напряженно-деформированного состояния железобетонных конструкций с учетом нелинейных физико-механических свойств бетона и явления трещинообразования.

Согласно действующей нормативной документации [2], железобетонные элементы рассчитывают на действие изгибающих моментов, продольных и поперечных сил, крутящих моментов и на местное действие нагрузки (местное сжатие, продавливание). При этом в качестве исходных расчетных данных, определяющих связь между на-

пряжениями и деформациями, применяют трех- или двухлинейную диаграммы состояния бетона; последние строятся по его известным основным прочностным и деформационным характеристикам (расчетному сопротивлению сжатию и растяжению, предельным относительным деформациям при сжатии и растяжении, начальному модулю упругости и другим). Действующая нормативная методика характеризуется значительной схематизацией сложной трехмерной геометрии конструкции и применением упрощенных подходов, развитых в сопротивлении материалов, а это приводит к чрезмерной консервативности получаемых результатов и невозможности детального анализа напряженно-деформированного состояния конструкции; например, такой анализ исключает рассмотрение процесса трещинообразования и других важных особенностей работы железобетонных сооружений. Альтернативой и дополнением к нормативной методике в мировой инженерной практике все чаще становится метод прямого конечно-элементного моделирования железобетонных конструкций.

Современные вычислительные методы расчета железобетонных конструкций приобретают большое значение в связи с тем обстоятельством, что многие перспективные технологические решения, например «бесконтактные» соединения арматурных конструкций (типа петлевых стыков, а также прямых или гнутых перепусков с различными анкерными устройствами), сдер-

живаются ввиду отсутствия или неполноты нормативно-методической базы для расчета и проектирования этих конструкций. В связи с этим становится необходимым научно-техническое обеспечение проектов железобетонных конструкций зданий и сооружений АЭС для промышленных методов строительства с использованием методов вычислительной механики. Особую актуальность задачи проектирования и оптимизации железобетонных конструкций в атомной отрасли приобретают в связи с интенсивным строительством новых блоков АЭС в России и за рубежом.

Моделирование физико-механических свойств бетона

Железобетон традиционно рассматривается как композиционный материал, состоящий из двух совместно работающих материалов: бетона и стали [1].

С точки зрения механики бетон характеризуется следующими особенностями:

нелинейной зависимостью деформаций от напряжений;

различным сопротивлением растяжению и сжатию, а именно — прочность бетона при растяжении в 10 — 20 раз ниже, чем при сжатии;

способностью к трещинообразованию и, как следствие, к появлению деформационной анизотропии и нарушению сцепления между бетоном и арматурой;

увеличением объема при трехосном сжатии (эффект дилатации), что связано с нарушением его структуры;

существенной зависимостью прочностных свойств от температуры;

значительной ползучестью и усадкой.

Для железобетона как композиционного материала характерны следующие особенности совместной работы бетона и арматуры:

зацепление в трещине (нагельный эффект) — способность арматуры передавать усилие перпендикулярно к своей оси в процессе скольжения двух берегов трещины;

ослабление бетонных сечений каналами арматуры и др.

Для учета вышеназванных особенностей бетона и железобетона в реальных кон-

струкциях необходимо применение различных теорий деформирования и прочности бетона, а также валидация математических моделей на основе экспериментальных исследований.

В программных системах конечно-элементного анализа существует большое количество моделей деформирования и прочности железобетона, учитывающих в той или иной мере нелинейные физико-механические свойства бетона и арматуры. В таблице представлен список моделей железобетона в различных программных системах конечно-элементного анализа (перечень не претендует на полноту). Жирным шрифтом выделены модели бетона, которые, по мнению авторов, наиболее полно описывают особенности данного материала и широко используются в расчетной практике.

Практически во всех вышеперечисленных моделях реализован достаточно универсальный подход к описанию нелинейных прочностных свойств бетона, который заключается в следующем.

Для описания перехода материала из упругой в пластическую стадию деформирования используется понятие критерия текучести [5]:

$$\sqrt{I_2} = F_f(I_1, \theta, \kappa), \quad (1)$$

где

$$I_1 = 3p = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3; \quad I_2 = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{S}^2);$$

$$I_3 = \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{S}^3)$$

— инварианты тензора напряжений; $\mathbf{S} = \underline{\underline{\sigma}} - p\underline{\underline{E}}$ — девиатор тензора напряжений; κ — вектор внутренних переменных материала; θ — инвариант Лоде (координата цилиндрической системы координат Лоде).

В трехмерном пространстве главных напряжений первый инвариант I_1 пропорционален расстоянию от начала координат до точки, соответствующей текущему напряженному состоянию, вдоль гидростатической оси $\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 = 0$. Вторым инвариант $\sqrt{I_2}$ пропорционален эквивалентным касательным напряжениям, а также рас-

стоянию от текущего напряженного состояния до гидростатической оси. Инвариант Лоде θ соответствует третьему инварианту I_3 и определяет угловую координату точки в пространстве главных напряжений.

Критерию текучести (1) соответствует функция текучести

$$f = I_2 - [F_f(I_1, \theta, \kappa)]^2 = 0. \quad (2)$$

Уравнения (1), (2), представленные в обобщенной форме, являются универсальными для всех рассматриваемых моделей бетона. Различия состоят в виде и характере функции $F_f(I_1, \theta, \kappa)$, вектора параметров κ и особенностях описания процесса накопления повреждений, прогрессирующего разрушения, реономных свойств бетона.

Во многих моделях бетона наряду с поверхностью текучести используются поверхности прочности, позволяющие определять предельные напряженные состояния бетона и процесс разрушения материала (рис. 1). Предельная поверхность прочности определяет напряженные состояния материала, при достижении которых происходит

возникновение в материале необратимых повреждений, что приводит к эволюции поверхности допустимых напряженных состояний. Остаточная поверхность прочности соответствует состоянию полного разрушения материала.

Предельная и остаточная поверхности прочности являются стационарными, в то время как актуальная поверхность текучести изменяется в соответствии с варьированием внутренних переменных материала, описывающих образование пор и микротрещин в бетоне.

На рис. 1 изображена «крышка» поверхности текучести I_1 , которая не только описывает наличие предела упругости материала под действием гидростатического сжатия, но и позволяет учесть влияние пористости бетона на сопротивление сдвиговым деформациям.

Для описания октаэдрического профиля поверхности прочности бетона используются цилиндрические координаты Лоде (r, θ, z), представляющие собой аналог инвариантов тензора напряжений $I_{1,2,3}$:

Таблица

Модели деформирования и прочности железобетона в различных программных системах [2 – 4]

Программная система	Модель деформирования и прочности бетона
ANSYS	Concrete Model
	Geological Cap Model
ANSYS/LS-DYNA	RHT Concrete Strength
LS-DYNA	Solid and Foam Model (Mat 5)
	Pseudo-Tensor (Mat 16)
	Orientated Crack (Mat 17)
	Geological Cap (Mat 25)
	Concrete Damage (Mat 72)
	Concrete Damage Rel3 (Mat 72R3)
	Brittle Damage (Mat 96)
	Soil Concrete (Mat 78)
	Winfrith Concrete (Mat 84)
	Johnson Holmquist Concrete (Mat 111)
	Schwer Murray Cap (Mat 145)
	CSCM Concrete (Mat 159)
ABAQUS	Concrete Smeared Cracking
	Cracking Model for Concrete
	Concrete Damage Plasticity

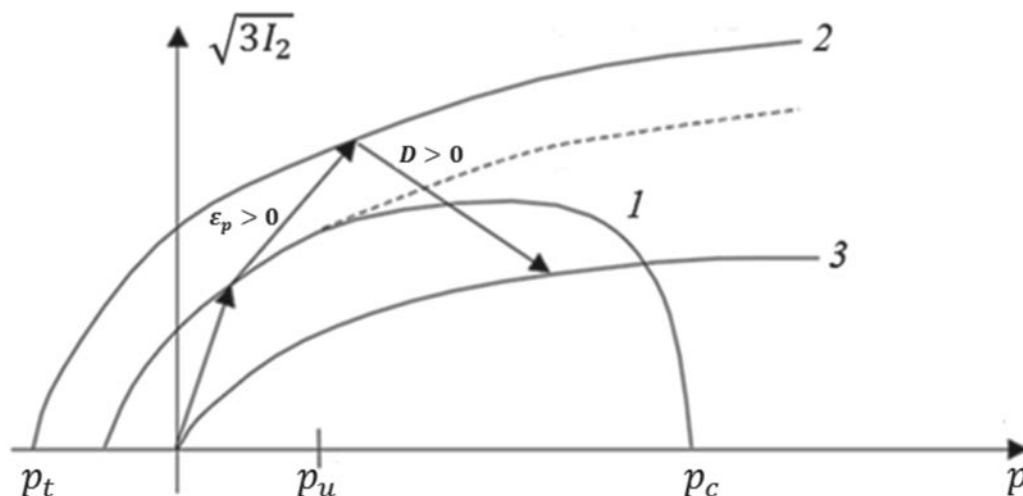


Рис. 1. Поверхности текучести (1) и прочности (2 – предельная, 3 – остаточная) бетона на плоскости инвариантов тензора напряжений; p , p_u , p_c – предельные значения гидростатического давления; ϵ_p – псевдопластическая деформация; D – обобщенный параметр поврежденности. Стрелками показана последовательность процесса нагружения бетона

$$r = \sqrt{2I_2}, \quad \sin 3\theta = \frac{I_3}{2} \left(\frac{3}{I_2} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad z = \frac{I_1}{3}. \quad (3)$$

Состоянию трехосного сжатия соответствует значение координаты Лоде $\theta = 30^\circ$. Учет зависимости от θ в формулах (1), (2) осуществляется путем умножения меридиана сжатия $F_f(I_1, 30^\circ, \kappa)$ на масштабирующую функцию $\Gamma(\theta, I_1)$. В литературе представлено множество видов функции $\Gamma(\theta, I_1)$ (см., например, работу [6]). Наиболее широко применяются функции Вильяма – Варнке (Willam – Warnke), Мора – Кулона (Mohr – Coulomb), Гудехуса (Gudehus) [7].

Практически во всех известных моделях бетона существует возможность учета арматуры. При этом используются различные методики: от добавления распределенной «жесткости» в направлениях армирования до прямого моделирования отдельных стержней арматуры, арматурной сетки и т. п. Для материала арматуры, как правило, задается упруго-пластическая модель прочности.

Программная система ABAQUS

Опыт моделирования железобетонных конструкций в различных программных системах привел к выводу об оптимальности

системы ABAQUS для решения большинства инженерных задач; основанием для такого вывода служат ее следующие преимущества:

- широкий набор моделей деформирования и прочности бетона, которые учитывают различные особенности данного материала (трещинообразование, различная работа на растяжение/сжатие, дилатация, взаимодействие бетона с арматурой и др.);

- возможность проведения расчетов с применением как неявных (система ABAQUS Standard), так и явных (ABAQUS Explicit) схем численного интегрирования;

- учет реономных свойств бетона, реалистичное моделирование работы железобетона при динамических (в том числе циклических, знакопеременных) нагрузках.

В документации программной системы ABAQUS [8] дано подробное описание моделей деформирования и прочности бетона и железобетона. Приведены результаты сравнения расчетов с натурными экспериментами. Подтверждена достоверность и высокая точность конечно-элементных расчетов.

Вместе с тем, для проведения сложных статических и динамических расчетов железобетонных конструкций необходимо внимательное изучение влияния всех входящих



в постановку задачи параметров и условий.

С целью исследования и отработки применения модели деформирования и прочности железобетона “Concrete Smeared Cracking” программной системы ABAQUS был проведен ряд расчетов простейших железобетонных конструкций (балок, плит, стен) на статические и динамические нагрузки. Изучалось влияние различных параметров конечно-элементной постановки задачи на сходимость расчета и его результат.

Трещинообразование — это важнейшая особенность бетона; реалистичное описание его работы после образования трещины определяет достоверность расчета в целом. В рассматриваемой модели образование трещины происходит, когда в данном элементе конечно-элементной модели достигается поверхность прочности в пространстве напряжений, называемая поверхностью трещинообразования (crack detection surface). Эта поверхность определяется линейной связью между гидростатическим давлением и эквивалентным по Мизесу напряжением. При выполнении условия возникновения трещины ее ориентация фиксируется и учитывается в дальнейшем расчете. В каждой точке интегрирования может присутствовать не более трех трещин, причем они всегда ориентированы в трех ортогональных направлениях.

Модель “Concrete Smeared Cracking” реализует логику «распределенного трещинообразования»: в процессе расчета отдельные макротрещины не возникают. Присутствие трещины влияет на ход численного решения посредством изменения жесткости материала в данной точке интегрирования конечно-элементной модели. В рассматриваемой модели бетона работа материала на сжатие описывается линейным участком кривой «деформация-напряжение», затем нелинейным участком с достижением предела прочности на сжатие, и далее ниспадающей ветвью диаграммы деформирования. Работа бетона на растяжение описывается линейным участком вплоть до достижения предела прочности на растяжение и последующей ниспадающей (кусочно-линейной) ветвью диаграммы деформирования. Ниспадающая ветвь приближенно описывает

влияние трещин на работу бетона.

По результатам численных исследований [4] было выявлено, что описание ниспадающей ветви диаграммы деформирования при растяжении в переменных «напряжение-деформация» обеспечивает сходимость и точность решения для конструкций с большим коэффициентом армирования. В случае слабо армированных конструкций наблюдается существенная зависимость результатов от конечно-элементного разбиения: увеличение подробности сетки не приводит к сходимости решения.

Замечено, что применение критерия трещинообразования, определяемого по удельной энергии разрушения, приводит к меньшей зависимости результатов от структуры конечно-элементного разбиения [4]. Отмеченное снижение влияния наиболее заметно при расчете слабо армированных конструкций, поэтому в рамках именно такого подхода и рекомендуется проводить их расчеты. Можно показать, что данный критерий позволяет описать ниспадающую ветвь диаграммы деформирования в переменных «напряжение-перемещение».

В данной работе ниспадающая ветвь диаграммы деформирования была представлена участком прямой, который связывает точку, соответствующую пределу прочности на растяжение, с такой точкой на оси деформаций/перемещений, когда растягивающие напряжения, нормальные к поверхности трещины, становятся равными нулю. Иными словами, при соответствующем значении деформаций/перемещений, нормальных к плоскости открытой трещины, элемент бетона перестает сопротивляться растяжению. В результате проведенного нами анализа установлено, что энергетический критерий обеспечивает большую устойчивость вычислительного процесса, чем деформационный аналог. Увеличение перемещений u_i^0 и деформаций ε_i^0 неизменно приводит к стабилизации вычислительного процесса.

Ключевую роль при отработке методики расчета железобетонных конструкций с учетом нелинейных свойств бетона и арматуры играет настройка численных алгоритмов расчета. В связи с существенной нели-

нейностью подобных задач, в документации [8] при использовании неявного решателя ABAQUS Standard рекомендуется применение модифицированного алгоритма Рикса с автоматическим вычислением шага приращения перемещений и нагрузок. Данный алгоритм представляет собой модифицированную процедуру Ньютона – Рафсона [9].

Особенностью указанного алгоритма является параметрическая управляемость величины нагрузки ходом процесса сходимости численной модели. Один из входных параметров для алгоритма Рикса – это количество подшагов нагружения, в соответствии с которым и определяется приращение нагрузки, а также ее абсолютное значение на данном подшаге. Таким образом, задание числа подшагов определяет результирующее значение силовой нагрузки, приложенной к модели. В зависимости от величины параметров сходимости данное значение может оказаться меньше задаваемой пользователем нагрузки, но может его и превысить.

Максимально допустимые значения невязок по силам и моментам, установленные по умолчанию в настройках нелинейного решателя Рикса, требуют внесения корректив, а точнее – их увеличения до единиц процентов. В ходе работы было проведено несколько экспериментов с целью изучения минимальных значений данных невязок, обеспечивающих сходимость численного процесса. Нижняя граница для рассмотренных задач составляла 1 %.

Методика применения явных схем интегрирования

Следующим этапом исследования была отработка методики применения явных схем интегрирования системы ABAQUS Explicit для расчета железобетонных конструкций на статические нагрузки. Программную систему ABAQUS Explicit, предназначенную для решения динамических задач, можно эффективно использовать для решения статических задач нелинейной механики при квазистатической постановке задачи. Для решения задач статики с помощью явных схем интегрирования (т. е. в динамической постановке) нужно прикладывать нагруз-

ки достаточно медленно для устранения инерционных эффектов. Однако при этом время расчета с помощью явных методов становится неприемлемо длительным. Одним из удобных методов ускорения расчета служит «масштабирование массы». Фиктивно увеличивая плотность бетона и стали арматуры в 1000 раз, в соответствии с условием Куранта устойчивости разностных схем [10], величина устойчивого временного шага возрастает в 10 раз.

Применение явных схем в данной задаче позволяет существенно увеличить скорость расчета. Согласно полученным результатам, явный метод расчета обеспечивает лучшую сходимость, по сравнению с неявным: амплитуды перемещений и нагрузок, достигнутые при явном расчете, заметно превышают данные величины при неявном аналоге. Более того, во всех проведенных экспериментах наблюдалась сходимость численных решений.

Замечено, что неявный метод более консервативно описывает процесс трещинообразования и разрушения бетона. Вместе с тем, добиться сходимости неявного метода при значительных амплитудах нагрузок возможно не всегда. Уточнение конечно-элементной сетки приводит к сближению кривых «смещение – приложенная нагрузка» для явной и неявной схем в области сходимости последней. В то же время, уточнение конечно-элементной модели существенно замедляет процесс явного решения. Таким образом, применение явных схем при расчете статических нелинейных задач механики железобетона целесообразно при амплитуде нагрузок на конструкцию, превышающих предел сходимости неявного метода. Особо эффективны явные схемы при расчете конечно-элементных моделей со сравнительно небольшим числом степеней свободы. Следует отметить, что вопрос влияния конечно-элементной сетки на расчет железобетонных конструкций явными и неявными методами требует дополнительного анализа.

Моделирование арматуры в бетоне

Были также проведены исследования в области разработки методики моделиро-



вания арматуры в бетоне. Согласно работе [11], в конечно-элементных расчетах, наряду с прямым объемным моделированием стержней арматуры, можно выделить следующие модели арматуры в бетоне: дискретная (discrete), встроенная (embedded), распределенная (smeared). В первой из них узлы стержневых элементов для арматуры совпадают с узлами объемной конечно-элементной сетки для бетона. Во второй — узлы сеток арматуры и бетона не совпадают, но связаны уравнениями совместности. В распределенной модели предполагается, что арматура равномерно распределена по элементам конечно-элементной сетки для бетона.

Согласно схеме дискретного связанного армирования, применяются стержневые элементы, которые имеют общие узлы с объемными элементами. Данная схема используется достаточно редко ввиду необходимости строгого геометрического совпадения узлов объемной сетки с расположением стержней арматуры.

По схеме встроенного армирования также применяются стержневые элементы, но объемные и стержневые элементы имеют отдельные узлы, и при этом задаются уравнения связи между соответствующими степенями свободы в узлах.

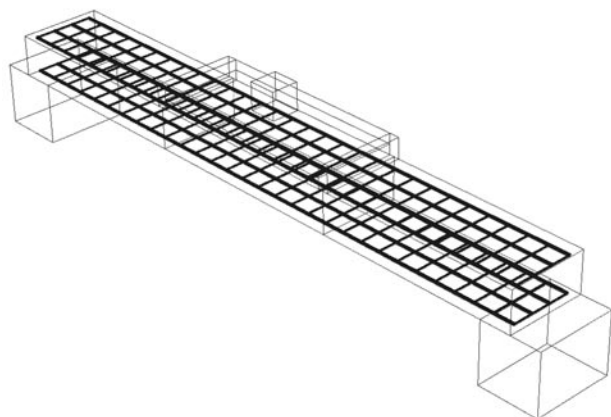
В соответствии со схемой распределенного армирования арматура учитывается в объемных элементах неявно — как распределенная жесткость в направлении ар-

мирования. Материал арматуры может при этом считаться упруго-пластическим. Данный подход широко применяется в случае геометрически простых схем расположения арматуры в объемных бетонных массивах.

В программной системе ABAQUS, как правило, применяются методики встроенного и распределенного армирования. Встроенное армирование реализовано с помощью технологии “Embedded Elements”, которая автоматически формирует уравнения связи между степенями свободы в узлах объемной сетки для бетона и в узлах стержневых элементов арматуры. Распределенное армирование моделируется с помощью технологии “Rebar Layers”, которая позволяет учитывать наличие упорядоченных массивов арматуры с помощью создания геометрических поверхностей (плоскостей, цилиндрических или иных поверхностей) и задания параметров армирования: шага между стержнями арматуры, диаметра стержней, механической модели материала арматуры. В обоих случаях возможно использование нелинейных механических моделей для стали арматуры.

Нами был проведен сравнительный анализ обоих указанных методов моделирования арматуры. Рассматривалась задача о статическом нагружении железобетонной плиты. Нагрузка на плиту передается на две симметричные области на верхней грани плиты посредством контакта с абсолютно твердым телом. Амплитуда вертикального

а)



б)

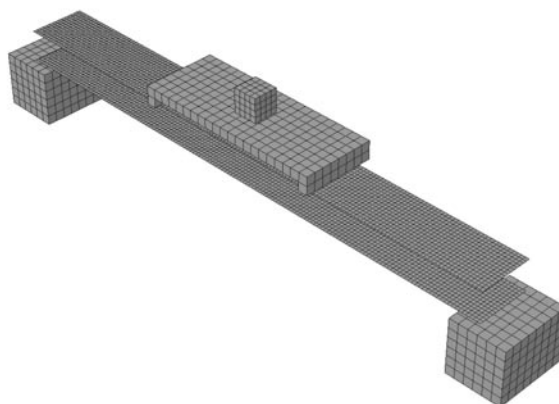


Рис. 2. Модели железобетонной плиты со встроенным (а) и с распределенным (б) армированием (бетонная часть не показана)

перемещения достигала 100 мм. На рис. 2 приведены геометрические модели балки с двумя видами армирования.

Плоскости, показанные на рис. 2,б, представляют собой слои распределенного армирования, соответствующие дискретной структуре арматуры (см. рис. 2, а).

На рис. 3, а показаны напряжения σ_1 в бетоне, в центральном элементе на нижней грани балки, в зависимости от вертикального перемещения плиты; на рис. 3, б —

соответствующее изменение суммарной по модели энергии деформации в процессе нагружения. Данные результаты соответствуют модели с десятью стержнями продольной арматуры в слое.

Результаты как для напряжений в конкретной точке конструкции, так и для энергии деформации совпадают с достаточной степенью точности. График изменения энергии деформации наглядно указывает на диссипацию энергии вследствие обра-

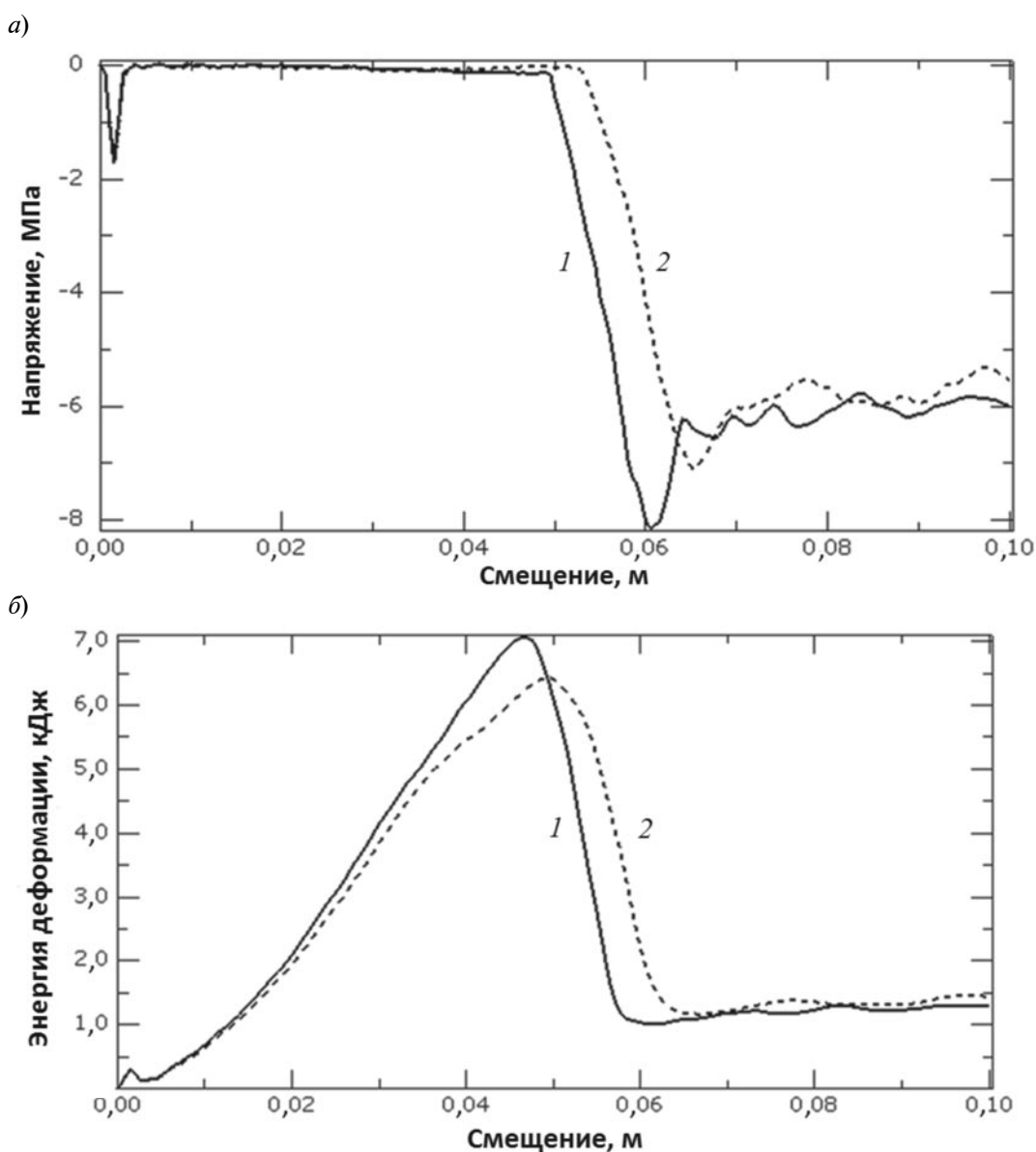


Рис. 3. Зависимости напряжения σ_1 (а) и энергии деформации (б) в бетоне (в центральном его элементе на нижней грани балки) от вертикального смещения плиты; 1, 2 — встроенное и распределенное армирование соответственно



зования трещин в процессе нагружения. В целом по результатам исследований сделан вывод о том, что распределенная методика армирования преувеличивает несущую способность для малой плотности армирования и обеспечивает соответствие с более подробной встроенной моделью для высокой плотности армирования (отношение шага армирования к характерному размеру конструкции в направлении армирования — примерно 1 : 10).

Аналогичное сравнение проведено в программной системе ANSYS. Использовалась нелинейная модель бетона “Concrete” и соответствующий ей тип конечного элемента Solid65. Были рассмотрены дискретный и распределенный методы армирования. Установлено, что второй метод обеспечивает запас прочности по напряжениям и перемещениям, по сравнению с первым.

Определение параметров распределенного армирования неразрывно связано с процедурой гомогенизации, т. е. с определением эффективных физико-механических свойств композитного материала на макроуровне. В связи с этим потребовалось проведение дополнительного исследования, которое ставило своей целью отработку методики моделирования арматуры по распределенной схеме в программной системе ANSYS.

При построении конечно-элементной модели железобетонной конструкции геометрическая область задания материала со свойствами распределенного армирования,

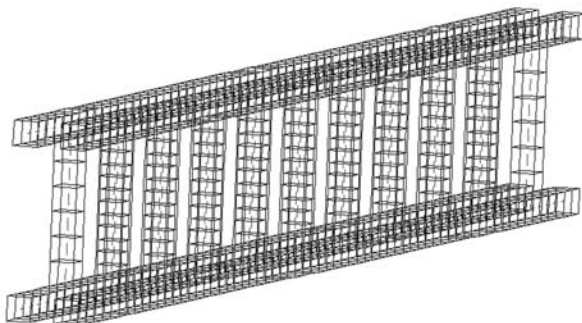
соответствующая области расположения арматуры в реальной конструкции, может определяться с большей или меньшей степенью детализации. На рис. 4 показана одна и та же балка с продольной и поперечной арматурой в качестве примера применения детальной и обобщенной схем распределенного армирования.

Сравнение результатов расчетов, рассматривающих действие статических силовых нагрузок, показало, что использование обобщенной схемы армирования обеспечивает запас прочности по напряжениям и перемещениям, относительно детальной распределенной схемы. В то же время обе указанные схемы распределенного армирования обеспечивают запас прочности по перемещениям и напряжениям относительно дискретной схемы армирования.

Таким образом, расчетным путем нами обоснована пригодность распределенных методов армирования в программной системе ANSYS для обоснования прочности железобетонных конструкций, в том числе ответственных сооружений АЭС.

Развитые подходы использованы для решения задачи расчетного обоснования конструктивно-технологических решений при модульном возведении монолитных железобетонных конструкций. Постановка настоящих исследований вызвана острой необходимостью расширения номенклатуры стыков рабочей арматуры на объектах атомного энергетического строительства с целью снижения трудоемкости их изготовления и ускорения сроков строительства,

а)



б)

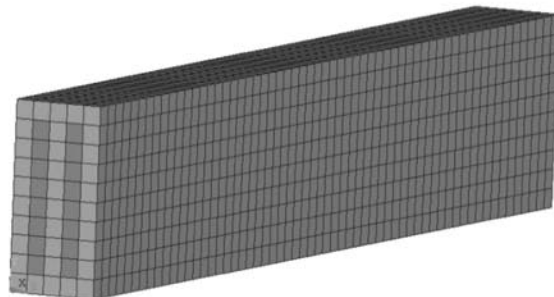


Рис. 4. Модели балки с продольной и поперечной арматурой с применением детальной (а) и обобщенной (б) схем распределенного армирования

но без ущерба надежности и безопасности АЭС.

Анализ нагрузений монолитных железобетонных плит

Рассматривались задачи о статическом знакопостоянном и динамическом ударном нагружении монолитных железобетонных плит с моделями петлевых арматурных стыков (стыков Передерия). Такие плиты представляют собой объединение стыкуемых железобетонных конструкций, которое выполняется с помощью петлевых арматурных выпусков; внутри них бетон объединения работает в условиях всестороннего сжатия. Данный стык является универсальным: он обеспечивает работу объединенной конструкции не только на срез, изгиб, но и на растяжение.

В разработанном алгоритме создания конечно-элементной модели, расчета и анализа результатов все геометрические размеры конструкции и физико-механические свойства материалов задаются параметрически. Это позволяет определять оптимальные размеры конструкции, схемы армирования, типы бетона и арматуры, исходя из условий работы и степени ответственности сооружений.

Особый интерес в этой задаче представляло определение механизма разрушения, а также общих закономерностей процесса трещинообразования плит с петлевыми стыками. На рис. 5 показана диаграмма по-

врежденности, которая характеризует процесс образования трещин и разрушения бетона, а также распределение осевых напряжений в арматуре в области петлевого стыка.

Полученные в результате численного расчета напряженно-деформированное состояние плит с петлевым армированием и процесс образования трещин согласуются с экспериментальными данными, а также подтверждают некоторые из гипотез, относящихся к процессу разрушения подобных конструкций [12]. Расчетным путем было подтверждено предположение о том, что определяющим фактором, влияющим на несущую способность подобных конструкций, следует считать возникновение радиально расположенных трещин по контуру петлевых стыков, а не первичных трещин на нижней грани плиты под областями приложения нагрузки, как это случается при простом продольном армировании. При моделировании наблюдалось возникновение диагональных трещин в горизонтальной плоскости между соседними петлевыми стыками. Кроме того, подтверждено предположение, что наличие поперечной арматуры внутри петлевых стыков (замковая арматура) существенно влияет на несущую способность железобетонных плит. Установлено, что наибольшие растягивающие напряжения в арматуре локализованы в местах перехода прямолинейных участков нижнего ряда стержней в окружающие участки.

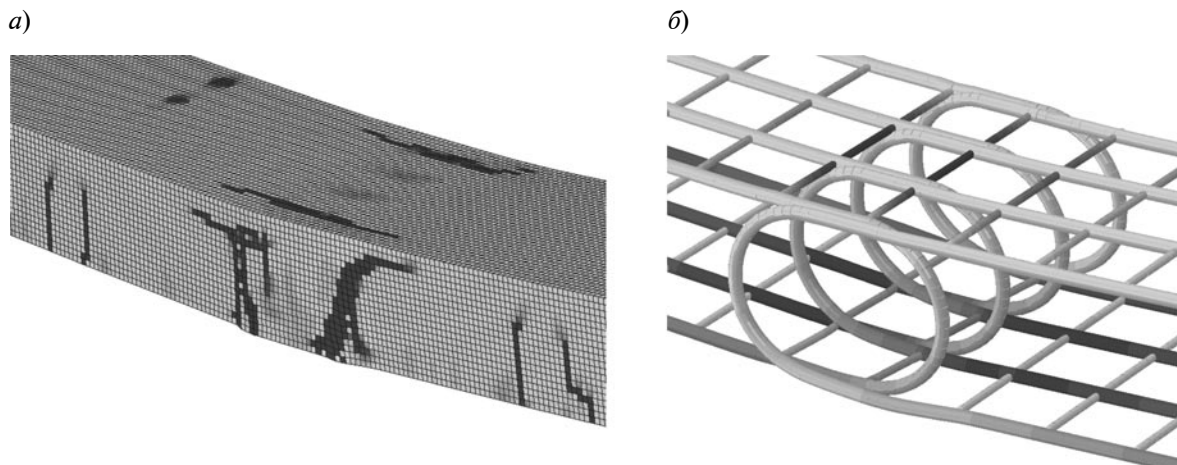


Рис. 5. Диаграмма поврежденности бетона (а) и распределение напряжений (б) в арматуре



Заключение

Итак, в результате проведенных исследований были получены следующие результаты:

определены области применимости различных методов конечно-элементного моделирования арматуры в бетоне;

сформулированы рекомендации по выбору и применению нелинейных ма-

тематических моделей деформирования и прочности бетона в различных программных системах конечно-элементного анализа;

определены расчетным путем характер напряженно-деформированного состояния и свойства процесса разрушения монолитных железобетонных плит с моделями петлевых арматурных стыков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Карпенко Н.И. Общие модели механики железобетона. М.: Стройиздат, 1996. 416 с.
2. ANSYS Help. ANSYS, Inc. <http://www.ansys.com/Support/Documentation>, 2013.
3. LS-DYNA User's Keyword Manual. Livermore Software Technology Corporation, <http://www.lstc.com/download/manuals>, 2012.
4. ABAQUS Analysis User's Manual, Vol. III – Materials. Dassault Systems, <http://www.3ds.com/support/documentation/users-guide>, 2013.
5. Ишлинский А.Ю., Ивлев Д.Д. Математическая теория пластичности. М.: Физматлит, 2011. 702 с.
6. Brannon R.M., Leelavanichkul S. Survey of Four Damage Models for Concrete// Sandia National Laboratories. <http://prod.sandia.gov/techlib/access-control.cgi/2009/095544.pdf>, 2009.
7. Gudehus G. Elastoplastische Stoffgleichungen fr trockenen sand. *Ingenieur Arch.* 1973. Vol. 42, pp. 151-169.
8. ABAQUS Theory Manual. Dassault Systems. <http://www.3ds.com/support/documentation/users-guide>, 2013.
9. Riks E. An incremental approach to the solution of snapping and buckling problems. *International Journal of Solids and Structures.* 1979. Vol. 15. Iss. 7, pp. 529-551.
10. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977. 456 с.
11. Wolanski A.J. Flexural behavior of reinforced and prestressed concrete beams using finite element analysis. A Thesis ... for the Degree of Master of Sci., Milwaukee, Marquette University 2004. 87 p.
12. Передерий Г.П. Курс мостов. Изд. 6-е. Т. 3. Железобетонные мосты. М.: Гострансиздат, 1951. 416 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛУКИН Алексей Вячеславович – инженер кафедры «Механика и процессы управления» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lukin@compmechlab.com

МОДЕСТОВ Виктор Сергеевич – ведущий инженер кафедры «Механика и процессы управления» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
modestov@compmechlab.com

Lukin A.V., Modestov V.S. FINITE ELEMENT MODELING AND AN ANALYSIS OF THE STRESS-STRAIN STATE OF REINFORCED CONCRETE STRUCTURES.

One of the tasks for engineers in the field of feasibility of strength of designs and constructions of nuclear power plants is the analysis of reactor buildings safety under dynamic loads such as earthquakes, fall after-effects of a heavy passenger plane, etc. An application of linear-elastic material models and equations of the linear theory of elasticity results in excessively conservative outcomes, designs and constructions parameters being non-optimal economically and technologically. Reinforced concrete bearing elements of the reactor building of the nuclear power plant with wall thicknesses of up to two meters, according to requirements of standard documentation, offers a clear example.

This work considers the present-day methods of computational mechanics and uses them for the analysis of stress-strain state of reinforced concrete designs taking into account nonlinear physical and mechanical properties of concrete and the cracking phenomenon.

REFERENCES

1. **Karpenko N.I.** *General mechanical models of reinforced concrete*. Moscow: Stroyizdat, 1996, 416 p. (rus)
2. ANSYS Help. ANSYS, Inc. <http://www.ansys.com/Support/Documentation>, 2013.
3. LS-DYNA User's Keyword Manual. Livermore Software Technology Corporation, <http://www.lstc.com/download/manuals>, 2012.
- ABAQUS Analysis User's Manual, Vol. 3. Materials. Dassault Systems. <http://www.3ds.com/support/documentation/users-guide>, 2013.
5. **Ishlinsky A.Y., Ivlev D.D.** *Mathematical theory of plasticity*. Moscow: Fizmatlit, 2011, 702 p. (rus)
6. **Brannon R.M., Leelavanichkul S.** Survey of Four Damage Models for Concrete// Sandia National Laboratories, <http://prod.sandia.gov/techlib/access-control.cgi/2009/095544.pdf>, 2009.
7. **Gudehus G.** Elastoplastische stoffgleichungen für trockenen sand. *Ingenieur Arch*, 1973, Vol. 42, pp. 151-169.
8. ABAQUS Theory Manual. Dassault Systems, <http://www.3ds.com/support/documentation/users-guide>, 2013.
9. **Riks E.** An incremental approach to the solution of snapping and buckling problems. *International Journal of Solids and Structures*, 1979, Vol. 15, Iss. 7, pp. 529-551.
10. **Marchuk G.I.** *Methods of numerical mathematics*. Moscow, Nauka, 1977, 456 p. (rus)
11. **Wolanski A.J.** *Flexural behavior of reinforced and prestressed concrete beams using finite element analysis*. Marquette University, Milwaukee, 2004, 87 p.
12. **Perederiy G.P.** *Treatise on bridges. Edition 6. Vol. 3. Reinforced concrete bridges*. Moscow, Gostransizdat, 1951, 416 p. (rus)

THE AUTHORS

LUKIN Alexei V.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

lukin@compmechlab.com

MODESTOV Victor S.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

modestov@compmechlab.com

УДК 501, 530.1

М.Р. Петриченко, Н.С. Харьков

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

ПРЕДЕЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ КРОККО В ТЕОРИИ ПЕРЕНОСА

С целью расширения множества решений предельная задача Крокко для переноса консервативной примеси заменяется условием минимума положительного функционала. Показано, что существуют инварианты предельной задачи Крокко, фиксирующие моменты распределения концентрации первой и второй степени. При этом плотность распределения концентрации в формулировке экстремальной задачи удовлетворяет двойственному условию Дюгема, типичному для слабой топологии на сопряженном пространстве. Установлено, что действительные решения предельной задачи Крокко не зависят от рода предельных условий в задаче Фурье: предельные условия для уравнения Крокко инвариантны и его решения обладают инвариантностью по отношению к предельным условиям.

ПРЕДЕЛЬНАЯ ЗАДАЧА, РЕШЕНИЕ, ЭКСТРЕМАЛЬНОЕ УСЛОВИЕ, ТОПОЛОГИЯ СЛАБАЯ, ДВОЙСТВЕННОСТЬ, КОНТАКТНАЯ ГРАНИЦА.

Введение

Распространение консервативной примеси в сплошных средах, как правило, изучается в терминах предельной задачи Фурье. Такая постановка предельной задачи для уравнений переноса используется в известных автору классических работах по математическому анализу (Л. Шварца, С.Г. Михлина, С.Г. Крейна и др.), а также в курсах гидродинамики [1, 2].

Исходным пунктом для описания распространения теплоты (и иной пассивной и консервативной примеси) в одном измерении служит условие неразрывности для теплового потока:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial \dot{q}}{\partial x} = 0,$$

где $dh = \rho c_p dT$ — дифференциал объемной плотности распределения энтальпии, $\dot{q} = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x}$ — плотность потока теплоты (вычисляется по закону Фурье).

Частное $a := \frac{\kappa}{\rho c_p}$ известно как коэффициент переноса (коэффициент температуропроводности).

Ввиду консервативности примеси (температура, энтальпия) дивергентные члены отсутствуют. С учетом указанных условий получаем уравнение следующего вида:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (1)$$

Вместо явления теплопроводности можно рассматривать, например, диффузию влаги в пористом теле, и пусть тогда $z = z(t, x)$ — плотность распределения консервативной примеси. Условие неразрывности для потока примеси принимает вид:

$$\frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(b(z) \frac{\partial z}{\partial x} \right), \quad (1a)$$

где b — коэффициент переноса консервативной примеси с плотностью распределения (концентрацией) $z = z(t, x)$. Во всех случаях коэффициенты переноса a, b име-

ют размерность m^2/c .

Пусть

$$D(z) = (0 < t < \infty, 0 < x < \infty);$$

$$z(0, x) = z(t, 0) - 1 = z(t, \infty) = 0$$

– предельные условия для уравнения (1а).

Вместо простейших (типичных) предельных условий можно рассматривать их смешанный вариант (см. ниже). Далее считаем, что существует гомеоморфизм

$$f: (0, 1) \rightarrow R^1, f \geq 0,$$

такой, что $b = b_0 f(z)$.

Достаточно предполагать, что $f \in L_1(0, 1)$, т. е. распределение f отличается от непрерывного распределения на множестве нулевой меры. Преобразование $\zeta := \frac{x}{2\sqrt{b_0 t}}$ приводит предельную задачу для уравнения (1а) к следующему виду:

$$\frac{d}{d\zeta} \left(f(z) \frac{dz}{d\zeta} \right) + 2\zeta \frac{dz}{d\zeta} = 0, \quad (2)$$

$$z(0) - 1 = z(\infty) = 0.$$

Согласно известным представлениям, предельная задача (2) возникает в различных диффузионных проблемах: в неустановившейся фильтрации, в гидродинамике пограничного слоя (предельная задача Блазиуса) и других [3–6]. Как правило, ищутся либо численные, либо приближенные решения уравнения (2). Например, известно следующее приближенное решение предельной задачи (2):

$$z = \sqrt{\operatorname{erfc}(\zeta)}. \quad (3)$$

Цель настоящей статьи состоит в демонстрации преимущества преобразования переменных

$$\frac{dz}{d\zeta} = j(z), \quad \varphi(z) = \int_0^z \zeta d\tau, \quad (3a)$$

сводящего предельную задачу (2) к предельной задаче Крокко:

$$2\varphi \frac{d^2 \varphi}{dz^2} + f(z) = 0, \quad \varphi(0) = \varphi'(1) = 0. \quad (4)$$

Основные преимущества преобразования (3а)

Действительно, уравнение в предельной задаче (2) приводится к виду

$$j \left(\frac{d}{dz} (f(z)j) + 2\zeta \right) = 0.$$

Это означает, что либо $j = 0$, либо

$$\frac{d}{dz} (f(z)j) + 2\zeta = 0.$$

Если провести формальное интегрирование, а именно

$$f(z)j(z) = -2\varphi(z), \quad \varphi(z) := \int_0^z \zeta(t)dt,$$

$$\varphi(0) = 0, \quad \zeta = \frac{d\varphi}{dz}, \quad \varphi'(1) = 0, \quad j = \frac{1}{\varphi''(z)},$$

то уравнение в предельной задаче (4) получается немедленно.

Решение предельной задачи (4) приводится в статье [3] для случая $f(z) = z$ (задача Блазиуса); оно получено в виде степенного ряда по z , т. е. по схеме Блазиуса. Удобство полученного автором статьи [3] решения состоит в том, что радиус сходимости ряда не меньше единицы и аналитического продолжения решения (изменения шкалы), в отличие от решения Блазиуса, не требуется.

В работе [4] изучены предельные квазилинейные задачи вязкого взаимодействия, связанные с уравнением Крокко, и указаны классы точных решений. Работа [5] (это известный справочник по дифференциальным уравнениям) содержит набор групп Ли, удобных при построении автоморфизмов решений нелинейных предельных задач. Недавняя работа [6] (препринт) содержит обзор классической задачи Блазиуса. Приводятся оценки нижней и верхней границ для частичных сумм степенных и асимптотических разложений.

Предельная задача Крокко

Типичная предельная задача Крокко (4) обладает рядом преимуществ, по сравнению с традиционной предельной задачей (2). К таким преимуществам следует отнести следующие утверждения:

1. Прежде всего,

$$D(z) = (\zeta; 0 < \zeta < \infty).$$

В задаче Крокко распределение $\varphi: (0, 1) \rightarrow R^1$ задано на компакте;



2. Кроме того, $z \in C^{(2)}(0, \infty)$, тогда как для «потенциала» $\varphi(z)$ ограничения слабее. В связи с этим справедлива следующая лемма.

Лемма 1. *С предельной задачей Крокко (4) связана следующая вариационная задача:*

$$S(\varphi, 1) = \frac{1}{2} \int_0^1 \left(\left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 + f(z) \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right) dz \rightarrow \inf \geq 0. \quad (5)$$

Доказательство. Действительно, уравнение предельной задачи (4) равносильно канонической системе:

$$\frac{d\varphi}{dz} = \psi, \quad \frac{d\psi}{dz} = -\frac{f(z)}{2\varphi},$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} \exists H : (0 < \varphi < \varphi(1), 0 < \psi < \infty) \rightarrow R^1 \Rightarrow \frac{d\varphi}{dz} = \\ = \frac{\partial H}{\partial \psi}, \quad \frac{d\psi}{dz} = -\frac{\partial H}{\partial \varphi}. \end{aligned}$$

Распределение $H(z, \varphi, \psi)$ представляет собой гамильтониан системы. Плотность распределения действия (лагранжиана) $S(\varphi, z)$,

$$\Lambda := \frac{dS}{dz} = -H \left(z, \varphi, \psi := \frac{\partial S}{\partial \varphi} \right) + \psi \frac{d\varphi}{dz},$$

есть распределение, двойственное с распределением H по Юнгу – Лежандру. Тем самым лемма 1 доказана.

Таким образом, для решения вариационной задачи достаточно, чтобы

$$\varphi \in W_2^{(1)}(0, 1); \quad C^{(2)}(0, 1) \subset W_2^{(1)}(0, 1),$$

и топология вариационной формулировки оказывается шире (сильнее) топологии предельной задачи (2), которая не допускает никакой прямой вариационной формулировки;

3. Ввиду предельных условий задачи Крокко выполняется следующее тождество:

$$\int_0^1 \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 dz = \frac{1}{2} \int_0^1 f(z) dz. \quad (6)$$

А это и означает, что

$$\zeta = \frac{d\varphi}{dz} \in L_2(0, 1),$$

и в силу неравенства Коши, тем более $\zeta \in L_1(0, 1)$.

Следовательно, для любой неотрицательной функции $f \in L_1(0, 1)$, отделенной от нуля почти всюду, существует ненулевое решение предельной задачи (4);

4. Вдоль характеристики предельной задачи Крокко (4) выполняется следующее условие:

$$\left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 - f(z) \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} = \alpha \zeta^2, \quad (6a)$$

где α – константа.

Для равенства (6a) справедлива и другая запись:

$$\left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 = \beta f(z) \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}, \quad \beta := \frac{1}{1 - \alpha}. \quad (6b)$$

При $z = 1, \zeta = 0$ условие (6a) выполняется тождественно. Пусть

$$\zeta \rightarrow +0, \quad z \rightarrow 1-0, \quad f(1) = 1.$$

Тогда в этом случае

$$\varphi(z) = \varphi(1) \exp \left(-\frac{\zeta^2}{\beta f(z)} \right)$$

и распределение

$$\varphi: (0, 1) \rightarrow (0, \varphi(1)) \subset R^1$$

непрерывно слева в точке $z = 1$:

$$\varphi(z) \rightarrow \varphi(1-0), \quad z \rightarrow 1-0.$$

Константа α или связанная с ней константа β выбираются так, чтобы при $z \rightarrow 0$ ($\zeta \rightarrow \infty$) условия (6a) и (6b) выполнялись асимптотически, т. е.

$$\lim_{\zeta \rightarrow \infty} \left(\zeta^2 - \beta f(z) \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right) = 0.$$

Отсюда видно, что константы α и β играют роль демпфирующих множителей.

Далее в наших конкретных расчетах предполагается, что $\alpha = 0, \beta = 1$.

Кратко сформулируем полученные важные выводы, необходимые для решения предельной задачи Крокко.

Во-первых, задача (4) связана с некоторой вариационной задачей, допускающей значительное расширение топологии.

Во-вторых, в этой задаче существуют инварианты, трактуемые как моменты первого и второго порядка концентрации z ,

а именно —

$$\varphi(1) = \int_0^1 \zeta dz = \sup_z \varphi(z);$$

$$\int_0^1 \zeta^2 dz = \frac{1}{2} \|f\|,$$

причем норма исчисляется в $L_1(0, 1)$.

В-третьих, ввиду равенств (5) и (6), а также неравенства Коши, оказывается справедливым неравенство

$$\begin{aligned} \int_0^1 \left(\left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 + f(z) \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right) dz = \\ = \int_0^1 f(z) \left(\frac{1}{2} + \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right) dz \leq \\ \leq \sqrt{\int_0^1 f^2(z) dz} \sqrt{\int_0^1 \left(\frac{1}{2} + \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right)^2 dz}. \end{aligned}$$

Теперь допустим, что кроме этого, $f \in L_2(0, 1)$ и

$$\sqrt{\int_0^1 f^2(z) dz} \sqrt{\int_0^1 \left(\frac{1}{2} + \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right)^2 dz} \rightarrow \inf \geq 0,$$

т. е. нижняя грань для распределения (5) выбрана с некоторым «запасом», достаточным для увеличения левой части (5). Это означает, что если коэффициент переноса $f(z)$ ограничен по норме $L_2(0, 1)$, и, тем более по норме $L_1(0, 1)$, то распределения $\varphi(z)$ и $-j(z)$ достигают максимума. Если же ограничено распределение $\varphi(z)$ (ограничен поток концентрации $-j(z)$), то коэффициент переноса минимален по норме $L_2(0, 1)$, и, тем более по норме $L_1(0, 1)$ [7]. Легко видеть, что сформулированное утверждение представляет перефразировку принципа Дюгема.

Для дальнейшего изложения материала важна следующая лемма.

Лемма 2. Пусть $f(z) \geq 0$ почти всюду на промежутке $0 < z < 1$. Тогда в предельной задаче Крокко (4) не существует точки, сопряженной с $z = 1$. Другими словами, существуют ненулевые решения предельной задачи (4) такие, что либо $\varphi(z) \geq 0$, $\varphi''(z) < 0$, либо $\varphi(z) < 0$, $\varphi''(z) > 0$.

Доказательство мотивировано тем, что в предельной задаче (4) $\zeta > 0$, $\varphi > 0$ и

имеет место первый случай — положительного монотонно возрастающего решения (2-диффеоморфизм).

Результаты решения предельной задачи Крокко (4)

Решение 1. На характеристике предельной задачи (4) запишем следующее равенство:

$$H \left(z, \varphi, \frac{d\varphi}{dz} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{d\varphi}{dz} \right)^2 - \frac{f(z)}{2} \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} = 0,$$

и тогда переменные разделяются, а именно:

$$\begin{aligned} \int_0^z \sqrt{f(\tau)} d\tau = \int_0^\varphi \frac{d\omega}{\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\omega}}}; \\ \zeta = \sqrt{f(z) \ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}}. \end{aligned} \quad (7)$$

В правой части равенства (7) можно выполнить простые преобразования:

$$\int_0^z \sqrt{f(\tau)} d\tau = \sqrt{\pi} \varphi(1) \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \right), \quad (7a)$$

откуда для плотности потока концентрации сквозь плоскость $\zeta = 0$ ($x = 0$) получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} \varphi(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 \sqrt{f(\tau)} d\tau, \\ -j(1) = \frac{2}{\sqrt{\pi} f(1)} \int_0^1 \sqrt{f(\tau)} d\tau. \end{aligned} \quad (8)$$

Пусть $f(z) = z^m$, $m \geq 0$. Тогда решение (7) принимает вид

$$z = \left(\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \right) \right)^{\frac{2}{m+2}}. \quad (76)$$

В этом случае справедливо выражение

$$\zeta = \sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \left(\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \right) \right)^{\frac{m}{m+2}}, \quad (7b)$$

и для степенного распределения коэффициента переноса получим:

$$\varphi(1) = \frac{2}{\sqrt{\pi(m+2)}}, \quad -j(1) = \frac{4}{\sqrt{\pi(m+2)}}. \quad (8a)$$

Тестирование решения. Пусть $m = 0$. Тог-



да, в силу справедливости выражений (76) и (7в), получаем:

$$z = \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \right) = \operatorname{erfc}(\zeta),$$

и, как легко видеть, $-j(1) = 2 / \sqrt{\pi}$, т. е. решения задачи Крокко (4) и задачи (2) совпадают.

Теперь пусть $m = 1$. Это «чистый» случай традиционной задачи Крокко. Тогда получаем такие выражения:

$$\begin{aligned} z &= \left(\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \right) \right)^{\frac{2}{3}}, \\ \zeta &= \sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \cdot \left(\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \right) \right)^{\frac{1}{3}}, \\ \varphi(z) &= \varphi(1) \exp \left(-\frac{2\zeta}{\sqrt{z}} \right). \end{aligned}$$

Интегральные характеристики переноса приобретают следующие значения:

$$\varphi(1) = \frac{2}{3\sqrt{\pi}} = 0,37; \quad -j(1) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}},$$

и они близки к решению Блазиуса.

Далее, пусть $m = 2$. Тогда получается известная аппроксимация:

$$z = \sqrt{\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \right)},$$

и затем —

$$\begin{aligned} \zeta &= \sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \cdot \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \right), \\ \varphi &= \varphi(1) \exp \left(-\frac{2\zeta}{z} \right), \\ \varphi(1) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}}, \quad -j(1) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}. \end{aligned}$$

Наконец, если $m \gg 1$, то мы можем записать, что

$$\begin{aligned} z &= 0, \quad \varphi < \varphi(1), \quad z = 1, \quad \varphi = \varphi(1); \\ \zeta &= \sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \left(\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}} \right) \right); \\ \varphi(1) &= \frac{2}{\sqrt{\pi m}}, \quad -j(1) = \frac{4}{\sqrt{\pi m}}. \end{aligned}$$

Примечание. Особая точка распределения (7в) — это $\varphi = 0$. Рассмотрим поведение $\zeta(\varphi)$ в окрестности нуля. Пусть в (7в) $\varphi \ll 1$, тогда справедлива асимптотика:

$$\zeta \cong \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{m}{m+2}} \left(\frac{\varphi(1)}{\varphi} \right)^{\frac{m}{m+2}} \left(\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi} \right)^{\frac{2}{m+2}}.$$

Очевидно, при $m \ll 1$ полученное асимптотическое распределение совпадает с (7в) и $\zeta(0) = \infty$. Наоборот, при $m \gg 1$ получается распределение

$$\zeta = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\varphi}{\varphi(1)},$$

и $\zeta(0) = 0$. Следовательно, при малых значениях параметра m распределение $\zeta(\varphi)$ представляет собой биективный диффеоморфизм, т. е. $\zeta(0) = \infty$, $\zeta(\varphi(1)) = 0$. Другими словами, перенос плотности распределения концентрации в условиях, «близких» к линейным, охватывает весь промежуток $0 < \zeta < \infty$. При сильной нелинейности, когда $m \gg 1$, распределение $\zeta(\varphi)$ — сюръективный диффеоморфизм и всякому значению ζ соответствует не менее двух значений φ в промежутке значений φ , $0 < \varphi < \varphi(1)$. Распределения $\zeta(\varphi)$ для различных значений m представлены на рис. 1.

Левые ветви графиков показаны пунктиром. Это означает, что ненулевые значения плотности распределения концентрации локализованы на промежутке $0 < \zeta < \zeta_{\max}$, а при $\zeta > \zeta_{\max}$ — концентрация нулевая. Такого рода решения нелинейных предельных задач известны, например в теории нестационарной фильтрации, и связаны с образованием локальной водяной линзы при нестационарной подаче воды в грунт [1].

Решение 2. Пусть теперь вместо условия при $x = 0$ ($\zeta = 0$) в предельной задаче (2) используется смешанное условие вида

$$\alpha \left(\frac{dz}{d\zeta} \right)_{\zeta=0} + z(0) = \beta, \quad (2a)$$

где α, β — постоянные.

Тогда

$$D(\varphi) = (0, z_0), \quad z_0 := z(0)$$

и предельная задача Крокко формулируется следующим образом:

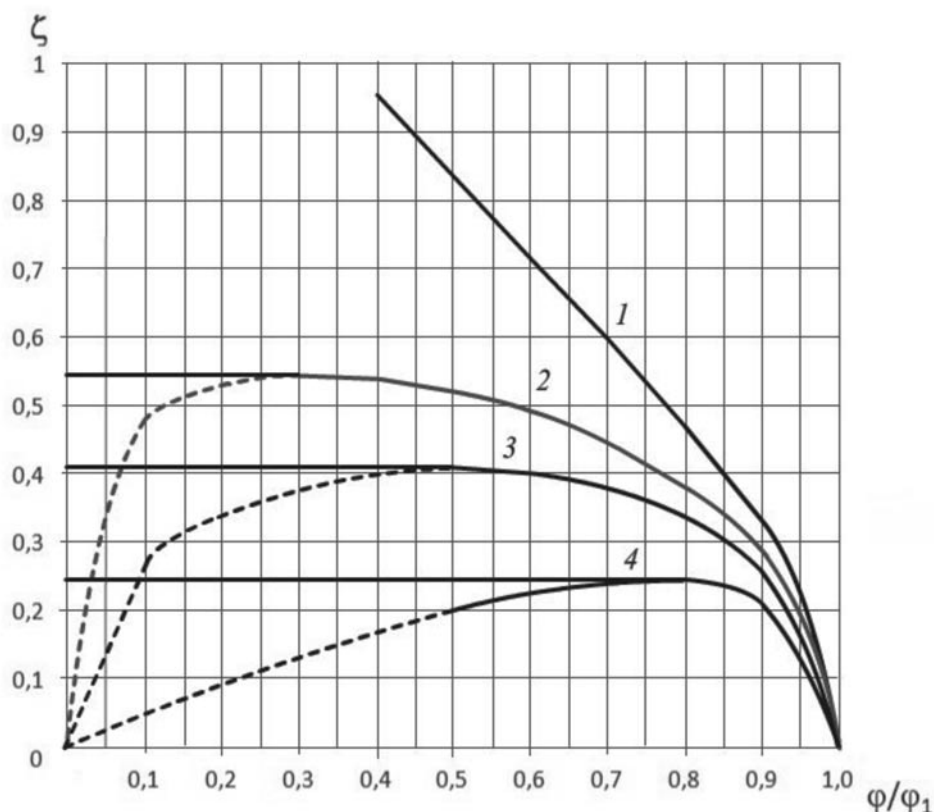


Рис. 1. Результаты тестирования решения 1 предельной задачи Крокко. Представлены плотности распределения концентрации $\zeta(\varphi/\varphi_1)$ при различных значениях параметра m : 0 (1), 1 (2), 2 (3), $m = \infty$ (4). Пунктиром показаны левые ветви графиков

$$2\varphi\varphi'' + f(z) = 0, \quad \varphi(0) = \varphi'(z_0) = 0. \quad (4a)$$

Ее решение имеет вид

$$\int_0^z \sqrt{f(\tau)} d\tau = \sqrt{\pi}\varphi(z_0) \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(z_0)}{\varphi}}\right), \quad (7г)$$

$$\zeta = \sqrt{f(z) \ln \frac{\varphi(z_0)}{\varphi}}. \quad (7г)$$

В частности, для степенного изменения коэффициента переноса, т. е. когда $f(z) = z^m$,

$$\frac{z}{z_0} = \left(\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(z_0)}{\varphi}}\right)\right)^{\frac{2}{m+2}}. \quad (7д)$$

В этом случае вместо (7в) получается распределение вида

$$\zeta = \sqrt{z^m \ln \frac{\varphi(z_0)}{\varphi}} = \quad (7е)$$

$$= \left(\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}}\right)\right)^{\frac{m}{m+2}} \sqrt{\ln \frac{\varphi(1)}{\varphi}}. \quad (7е)$$

Для нахождения максимальной предельной плотности распределения концентрации z_0 для степенного распределения коэффициента переноса, в силу соотношения (7д), имеем следующее условие:

$$\frac{2}{m+2} z_0^{\frac{m+2}{2}} = \sqrt{\pi}\varphi(z_0). \quad (9)$$

Кроме этого условия, из уравнения (2а) следует еще одно:

$$z_0 = \beta - \alpha j(0) = \beta + 2\alpha \frac{\varphi(z_0)}{z_0^m}.$$

Тогда, с учетом условия (9), получаем:

$$z_0 = \beta + \frac{4\alpha}{\sqrt{\pi}(m+2)} z_0^{\frac{2-m}{2}}.$$

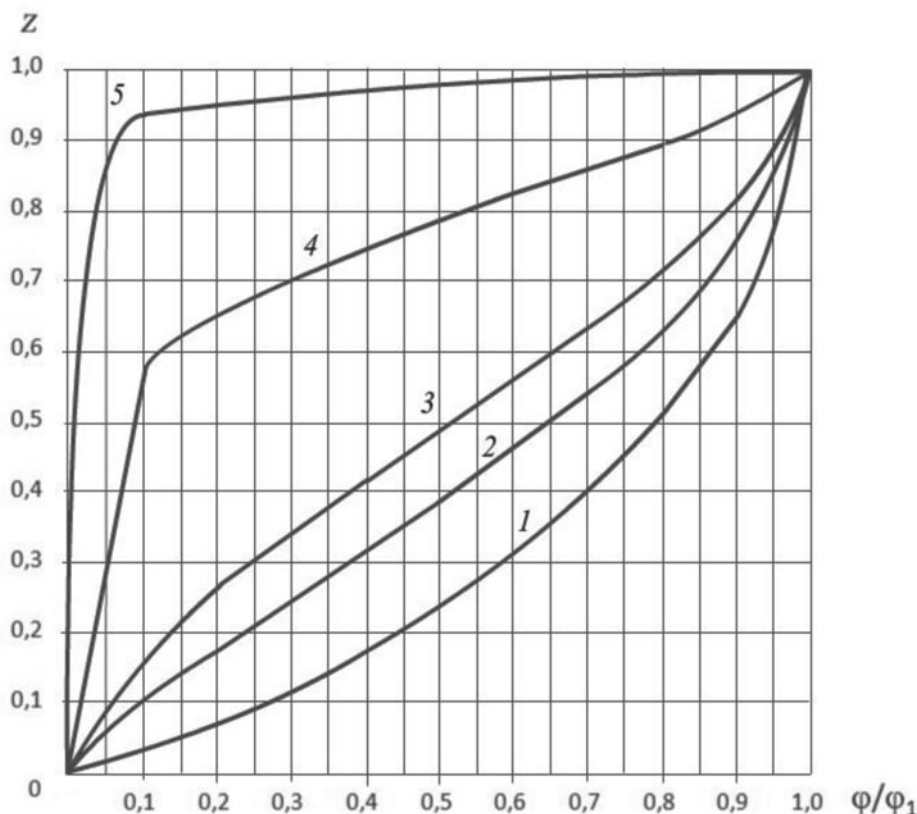


Рис. 2. Типичные распределения потенциала Крокко по концентрации при различных значениях параметра m : 0 (1), 1 (2), 2 (3), 10 (4), 100 (5)

Например, пусть $m = 0$. Тогда

$$z_0 = \frac{\beta}{1 - \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}}.$$

При $m = 2$

$$z_0 = \beta + \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}$$

и т. д.

Очевидно, что формулы (7б) и (7д) задают типичные для всех предельных задач распределения потенциала Крокко по концентрации (рис. 2), пригодные для всех значений параметров внешнего теплообмена β , α .

Поток концентрации на левом конце промежутка изменения переменной ζ , $-j(z_0)$, явно зависит от параметров задачи β , α :

$$-j(z_0) = \frac{2\varphi(z_0)}{z_0^m} = \frac{4}{\sqrt{\pi}(m+2)} z_0^{\frac{2-m}{2}} = \frac{z_0 - \beta}{\alpha}.$$

Решение 3. Пусть $f(z)$ — кусочно-постоянное распределение вида

$$\begin{cases} f(z) = f_0, & 0 < z < z_0; \\ f(z) = f_1, & z_0 < z < 1, \end{cases}$$

где z_0 — концентрация примеси в точке контакта (на контактной плоскости).

Требуется найти положение контакта, т. е. значение $\zeta = \zeta_0$ в предположении, что контакт идеальный, т. е. что $z(\zeta)$ — непрерывное распределение концентрации:

$$z(\zeta_0 - 0) - z(\zeta_0 + 0) = 0.$$

В данном случае удобно применить следующее аналитическое продолжение решений предельной задачи Крокко: сперва нужно решить предельную задачу Крокко при условии $D(\varphi) = (0, 1)$ и с коэффициентом переноса f_0 . Это решение позволит найти значение $\varphi(z_0)$ и решить предельную задачу Крокко на промежутке $(z_0, 1)$ с предельным условием на левом конце промежутка:

$$\varphi(z_0 - 0) = \varphi(z_0 + 0),$$

причем очевидно, что непрерывность потенциала Крокко в точке $z = z_0$ не зависит от идеальности контакта.

Итак, полагаем, что

$$\begin{aligned} 0 < z < z_0, \quad 2\varphi_* \varphi'' + f_0 = 0, \\ \varphi_*(0) = \varphi'_*(1) = 0, \end{aligned} \quad (10a)$$

причем

$$\varphi_*(1) := \Phi_*.$$

Тогда решение предельной задачи (10a) есть

$$\sqrt{f_0} z = \sqrt{\pi} \Phi_* \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\Phi_*}{\varphi_*}} \right). \quad (11a)$$

Из решения (11a) следует выражение

$$z_0 = \sqrt{\frac{\pi}{f_0}} \Phi_* \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\Phi_*}{\varphi_*(z_0)}} \right). \quad (12a)$$

На промежутке $z_0 < z < 1$ ставится предельная задача при $D(\varphi^*) = (z_0, 1)$:

$$\begin{aligned} 2\varphi^* \varphi^{*''} + f_1 = 0, \\ \varphi^*(z_0) - \varphi_*(z_0) = \varphi^{*'}(1) = 0, \end{aligned} \quad (10b)$$

которая имеет решение

$$\begin{aligned} \sqrt{f_1}(z - z_0) = \sqrt{\pi} \Phi^* \left(\operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\Phi^*}{\varphi}} \right) - \right. \\ \left. - \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\ln \frac{\Phi^*}{\varphi_0}} \right) \right), \end{aligned} \quad (11b)$$

где введены обозначения:

$$\varphi^*(1) := \Phi^*, \quad \varphi_*(z_0) = \varphi^*(z_0) := \varphi_0.$$

Пусть в формуле (11b) $z = 1$; тогда

$$1 - z_0 = \sqrt{\frac{\pi}{f_1}} \Phi^* \operatorname{erf} \left(\ln \sqrt{\frac{\Phi^*}{\varphi_0}} \right). \quad (12b)$$

Введем число Прандтля для переноса σ и безразмерный потенциал Крокко F , определив их как

$$\sigma := \frac{\Phi_*}{\Phi^*}, \quad F := \frac{\Phi^*}{\varphi_0}.$$

По определению $F > 1$, так как $\varphi(z)$ — монотонно возрастающая функция. В этом случае формулы (12a) и (12b) можно переписать однотипно, т. е.

$$\begin{aligned} z_0 &= \sqrt{\frac{\pi}{f_0}} \sigma \Phi^* \operatorname{erfc}(\sqrt{\ln(\sigma F)}); \\ 1 - z_0 &= \sqrt{\frac{\pi}{f_1}} \Phi^* \operatorname{erf}(\ln \sqrt{F}). \end{aligned} \quad (13)$$

И, наконец, справедливо тождество, равносильное условию трансверсальности на контакте, т. е. непрерывности первой производной $\varphi(z)$ на контакте —

$$\begin{aligned} \zeta(z_0 - 0) = \zeta(z_0 + 0): \\ f_0 \ln(\sigma F) = f_1 \ln F. \end{aligned} \quad (14)$$

Допустим, что $n f_0 = f_1$. Тогда из тождества (14) сразу же получается формула

$$\sigma = F^{n-1}.$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \sigma > 1, \text{ если } n > 1 \ (f_0 < f_1); \\ \text{и } \sigma < 1, \text{ если } n < 1 \ (f_0 > f_1). \end{aligned}$$

Следовательно, в силу равенств (13), имеем:

$$\frac{z_0}{1 - z_0} = \sqrt{n} F^{n-1} \frac{\operatorname{erfc}(\sqrt{n \ln F})}{\operatorname{erf}(\sqrt{\ln F})}. \quad (13a)$$

Теперь пусть $n = 1$ ($\sigma = 1$). Тогда в силу формулы (13a) получается тождество, справедливое для любого z_0 на интервале $0 < z_0 < 1$.

Итак, пусть $z_0, f_{0,1}, n$ — заданы. Тогда последовательность решения задачи, поставленной в этом разделе, такая:

1. Из равенства (13a) находим значение F ;

2. Из равенства

$$\zeta_0 = \sqrt{f_1 \ln F} = \sqrt{f_0 n \ln F}$$

находим мгновенное значение координаты контакта;

3. Из равенства

$$j(z_0 - 0) f_0 = j(z_0 + 0) f_1,$$

определяем изменение плотности потока примеси на контакте.

Получаем в результате следующие распределения потенциала Крокко на промежутках $(0, z_0)$, $(z_0, 1)$:

$$\begin{cases} \varphi(z) = \varphi_*(z), & 0 < z < z_0; \\ \varphi(z) = \varphi^*(z), & z_0 < z < 1, \end{cases}$$

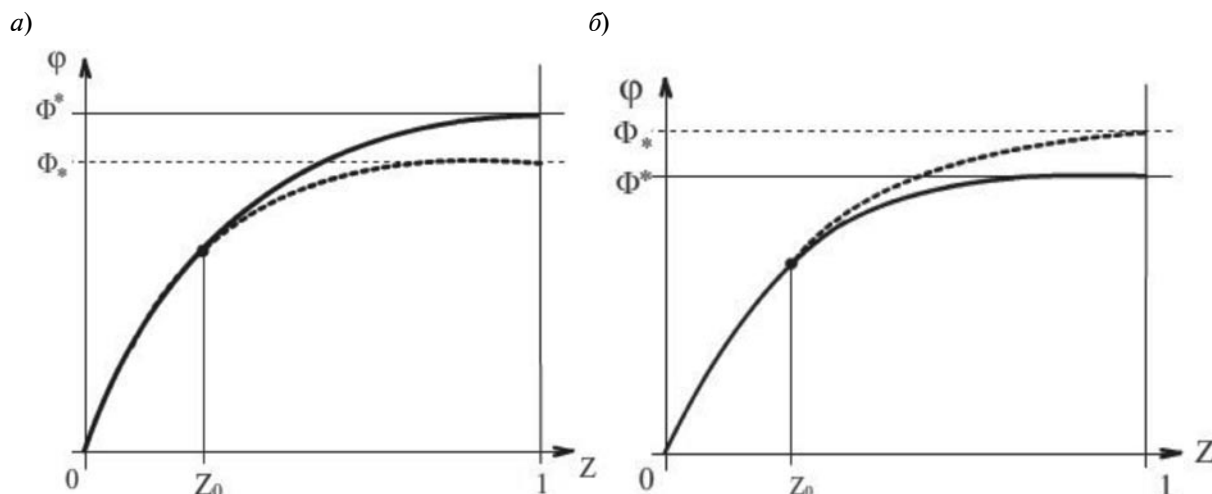


Рис. 3. Распределения потенциала Крокко на промежутке $D(\varphi) = (0, 1)$ для случаев $\sigma < 1$, $n < 1$ (а) и $\sigma > 1$, $n > 1$ (б); $\sigma = \Phi_*/\Phi^*$; $\Phi_* = \varphi_*(1)$, $\Phi^* = \varphi^*(1)$

как один диффеоморфизм на всем промежутке $D(\varphi) = (0, 1)$ для различных чисел $\sigma(n)$ (рис. 3).

Видно, что потенциал φ_* есть сужение φ на промежуток $(0, z_0)$, а φ^* есть сужение φ на промежуток $(z_0, 1)$. Геометрически распределение φ_* совпадает с распределением φ^* на промежутке $0 < z < z_0$ и служит огибающей для распределения $\varphi(z)$ на всем промежутке $0 < z < 1$.

Выводы

Предельная задача для уравнения Крокко сводится к однородным предельным условиям на концах промежутка, независимо от рода граничных условий.

Достаточное условие, разделяющее

действительные и виртуальные решения предельной задачи Крокко, обнаруживает двойственность, типичную для слабых топологий: либо ограничивается коэффициент переноса для распределения концентрации при максимальном потоке концентрации, либо минимизируется распределение коэффициента переноса при ограниченном потоке концентрации.

Существуют инварианты предельной задачи Крокко. При заданном распределении коэффициента переноса неизменны моменты второй степени плотности распределения концентрации, и при заданной наибольшей плотности потока концентрации остается неизменным момент первой степени плотности распределения концентрации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Баренблатт Г.И. Подобие, автомодельность, промежуточная асимптотика. М.: Гидрометеоиздат, 1978. 204 с.
2. Олейник О.А., Самохин В.Н. Математические методы в теории пограничного слоя. М.: Наука, 1997. 592 с.
3. Фаиз А. Применение уравнения Крокко – Ванга для решения уравнения Блазиуса // Техническая акустика (электронный журнал). 2007. Т. 7. № 7. Режим доступа: <http://cyberleninka.ru/article/n/primeneniye-uravneniya-krokko-vanga-k-resheniyu-zadachi-blasiusa#ixzz38ed1AsyD>.
4. Полянин А.Д., Аристов С.Н. Системы уравнений гидродинамического типа: точные решения, преобразования, нелинейная устойчивость // Доклады Академии наук. 2009. Т. 428. № 2. С. 180–185.
5. Полянин А.Д. Преобразования типа Мизеса и Крокко: понижение порядка нелинейных уравнений, RF-пары и преобразования Беклунда // Доклады Академии наук. 2010. Т. 430. № 2. С. 160–165.
6. Varin V.P. A solution of the Blasius problem. Moscow, KIAM Preprint. 2013. № 40. 21 p.
7. Глазман И.М., Любич Ю.И. Конечномерный линейный анализ. М.: Наука, 1968. 476 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

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

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

ХАРЬКОВ Никита Сергеевич — кандидат технических наук, доцент кафедры гидравлики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
nkharkov@mail.ru

Petritchenko M.R., Kharkov N.S. BOUNDARY PROBLEMS FOR THE CROCCO EQUATION IN THE TRANSPORT THEORY.

The Crocco boundary problem is more convenient than the Fourier limit problem when either is applied to the transfer problem of passive and conservative tracers for a number of advantages given below. Firstly, the concentration density distribution is generally sought on the standard compact interval from 0 to 1 in the distribution class of the limited growth instead of a semi-infinite interval. Secondly, the dual variational formulation of the problem being equivalent to the marginal one is admitted, and it reduces the solutions topology from $C^2(0, 1)$ to $W_2^{(1)}(0, 1)$. Thirdly, there are simple invariants of the solution which are convenient for estimating the solution norms and have a simple interpretation for moments of the density distribution. And finally, the Crocco boundary problem is “insensitive” to the nonlinearity of the equation coefficients. In this problem with piecewise-constant coefficients boundary conditions on the contact within the $(0, 1)$ interval of variation in the density distribution are equivalent to the transversality conditions. The paper presents the demonstration of these arguments and the solution examples of the limiting problem for the Crocco equation with a power variation in the transfer coefficient.

BOUNDARY PROBLEM, SOLUTION, EXTREME CONDITION, WEAK TOPOLOGY, DUALITY, CONTACT BOUNDARY.

REFERENCES

1. **Barenblatt G.I.** *Podobiye, avtomodel'nost', promezhutochnaya asimptotika.* Moscow, Gidrometeoizdat, 1978, 204 p. (rus)
2. **Olejnuk O.A., Samokhin V.N.** *Matematicheskiye metody v teorii pogrannichnogo sloya.* Moscow, Nauka, 1997, 592 p. (rus)
3. **Faiz A.** *Primeneniye uravneniya Krokko-Vanga dlya resheniya uravneniya Blaziusa. Tekhnicheskaya akustika,* 2007, Vol. 7, No. 7. Available at: <http://cyberleninka.ru/article/n/primeniye-uravneniya-krokko-vanga-k-resheniyu-zadachi-blaziusa#ixzz38ed1AsyD>.
4. **Polyanin A.D., Aristov S.N.** *Sistemy uravneniy gidrodinamicheskogo tipa: tochnye resheniya, preobrazovaniya, nelineynaya ustojchivost'.* *Doklady Akademii nauk,* 2009, Vol. 428, No. 2, pp. 180-185.
5. **Polyanin A.D.** *Preobrazovaniya tipa Mizesa i Krokko: ponizhenie poryadka nelinejnykh uravnenij, RF-pary i preobrazovaniya Beklunda.* *Doklady Akademii nauk,* 2010, Vol. 430, No. 2, pp. 160-165. (rus)
6. **Varin V.P.** *A solution of the Blasius problem.* Moscow, KIAM Preprint, 2013, No. 40, 21 p.
7. **Glazman I.M., Lyubich Yu.I.** *Konechnomernyj linejnyj analiz.* Moscow, Nauka, 1968, 476 p. (rus)

THE AUTHORS

PETRITCHENKO Mikhail R.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

fonpetrich@mail.ru

KHARKOV Nikita S.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

nkharkov@mail.ru

УДК 534.16

В.Е. Чабанов, В.А. Жуков

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

РАСЧЕТ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНО-АКУСТИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ДЛЯ УЛЬТРАЗВУКОВОГО НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ

Статья посвящена проектированию электромагнитно-акустических преобразователей (ЭМАП) для ультразвукового неразрушающего контроля металлических изделий. Выполнены теоретические расчеты ряда параметров преобразователей и магнитной системы, а также измерены диаграммы направленности излучения прямых и наклонных ЭМАП для разных типов волн на нескольких частотах. Проведено сравнение экспериментальных и теоретических данных. Результаты могут быть использованы для оптимизации параметров ЭМАП при их проектировании.

УЛЬТРАЗВУКОВОЙ НЕРАЗРУШАЮЩИЙ КОНТРОЛЬ, ЭЛЕКТРОМАГНИТНО-АКУСТИЧЕСКИЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ (ЭМАП), УЛЬТРАЗВУКОВАЯ ВОЛНА, SV - И SH -ПОЛЯРИЗОВАННЫЕ ВОЛНЫ, ДИАГРАММА НАПРАВЛЕННОСТИ.

Введение

Неразрушающий контроль с применением ультразвука находит все большее применение в современном машиностроении. И это вполне закономерно, поскольку детали современных машин и оборудования становятся все более сложными и дорогостоящими, а последствия их непредсказуемых разрушений катастрофическими. Наша страна является родиной ультразвукового неразрушающего контроля (УЗК): С.Я. Соколов, работавший в Ленинграде, запатентовал его в 1928 году; и поэтому Россия традиционно занимает по УЗК ведущие позиции в мире. Особенно это относится к теоретическим разработкам.

Вместе с тем традиционная ультразвуковая методика с применением пьезопреобразователей (ПЭП), наряду с множеством преимуществ по сравнению с другими неразрушающими методами контроля (радиационным, магнитным, оптическим, вихрековым и др.) обладает своими специфическими недостатками. Среди них

самым существенным следует считать необходимость поддерживать хороший акустический контакт излучающей поверхности ПЭП с поверхностью контролируемых изделий.

В связи с этим одним из самых перспективных считается разработанный в СССР метод ультразвукового неразрушающего контроля с применением электромагнитно-акустических преобразователей (ЭМАП). Измерения с помощью этого прибора позволяют осуществлять контроль бесконтактно, без использования согласующих сред, с высокими скоростями и даже при наличии грубых, шероховатых поверхностей изделий. При этом диапазон волн, используемых при таком контроле, оказывается шире, чем таковой с использованием пьезопреобразователей, и это открывает дополнительные возможности для УЗК. Так, с применением ЭМАП соответствующей конструкции можно:

возбуждать и принимать волны, способные проходить вдоль изделий вне зависимости от состояния их границ;

использовать волны, в которых частицы среды колеблются как в нормальной к поверхности контроля плоскости (SV -поляризованные волны), так и поперек нее (SH -поляризованные волны);

применять волны радиальной поляризации;

производить измерения сквозь защитные покрытия, слои ржавчины, краски, в условиях высоких и низких температур, радиации и вакуума.

Тем не менее, в настоящее время УЗК с применением ЭМАП используется все же достаточно редко. И на это есть объективные причины. Прежде всего, конструкция ЭМАП оказывается значительно сложнее, чем у ПЭП. В самом деле, если работа ПЭП определяется пятью-семью конструктивными параметрами, то ЭМАП зависит уже от тридцати и более параметров. В связи с этим создание наилучших конструктивных решений ЭМАП вызывает существенные трудности. А если принять во внимание, что достаточно полной теории, с помощью которой можно было бы оптимизировать все их характеристики, не существует до настоящего времени даже для ПЭП, то это тем более относится к теоретическому аппарату ЭМАП. С другой стороны, и экспериментальное исследование ЭМАП не дает всей полноты необходимых для этого сведений. В самом деле, опытное изучение какого-либо явления эффективно только тогда, когда изменяется один из его параметров, а все остальные при этом остаются прежними. Для ЭМАП такое состояние достигается с большим трудом. А поэтому ныне существующие и зачастую неплохо работающие ЭМАП обязаны своим возникновением в большей мере таланту и опыту разрабатывающих их исследователей, чем теории или накопленным опытным данным.

В целом можно констатировать, что типовые ЭМА-преобразователи представляют собой конструкцию из магнитов большой индукции, экранов и катушек токопроводов, расположенных по отношению друг к другу различным образом. При этом чаще всего применяются устройства, в которых магнит, экран и катушка располагаются последовательно над поверхностью контро-

ля. Магнит служит для создания мощного магнитного поля, которое проникает в поверхность контроля по нормали и по касательной к ней. Катушка применяется для создания вихревого электрического поля заданной поляризации, которое возбуждает в токопроводящей среде токи Фуко. Последние, вступая во взаимодействие с постоянным магнитным полем, генерируют силы Ампера, служащие источником механических напряжений. Именно таким является основной механизм возбуждения ультразвуковых сигналов с помощью ЭМАП в токопроводящих объектах. Экран служит для отражения вихревого электромагнитного поля, создаваемого катушкой, с целью увеличения его полезной составляющей, понижения уровня акустических шумов, идущих от магнитопровода, и управления направленностью излучаемого звука.

Другим механизмом возбуждения ультразвуковых сигналов в объектах контроля служит эффект магнитоstriction, т. е. изменение размеров и формы локальных объемов ферромагнитных материалов в переменном магнитном поле. Однако последний механизм реализуется сравнительно редко, поскольку он эффективен только на сравнительно низких частотах и зачастую сопровождается значительными акустическими шумами.

Обратный эффект, т. е. прием акустических сигналов с помощью ЭМАП, осуществляется благодаря возникновению ЭДС в токопроводах катушки, которые находятся в постоянном магнитном поле и подвергаются электромагнитным излучениям свободных электронов объекта контроля под действием акустических волн. При этом, в соответствии с теоремой взаимности, акустические характеристики преобразователей при излучении и приеме оказываются идентичными. Так, избирательность волн и диаграммы направленности излучения преобразователей соответствуют таковым при их работе в качестве приемников.

В большинстве ЭМАП применяются постоянные магниты. Они дешевле, проще в эксплуатации, надежны и не требуют специальной электрической системы подмагничивания. Однако указанные маг-



ниты настолько сильно притягиваются к ферромагнитным объектам контроля, что их перемещение вдоль поверхности требует значительных усилий или использования специальных механических устройств. И данное обстоятельство в определенной мере усложняет эксплуатацию ЭМАП, особенно при контроле быстродвижущихся объектов. Поэтому в последнее время все чаще используют электромагниты, которые свободны от указанного недостатка.

Характеристики излучения и приема ЭМАП

При конструировании магнитной системы ЭМАП встречаются определенные трудности. Так, при использовании однополюсных плоских магнитов не всегда удается получить большие индукции, что в значительной мере понижает амплитуды излучаемых и принимаемых ими акустических сигналов. В то же время с помощью двухполюсных магнитов индукция постоянного магнитного поля может быть существенно повышена, однако однородность этого поля оказывается невысокой. И данное обстоятельство ухудшает направленные характеристики излучения и приема ЭМАП. Разумеется, есть способы, с помощью которых указанные факторы можно несколько скорректировать, однако исключить их полностью нельзя. Для демонстрации этого утверждения на рис. 1 – 3 приведены соответствующие расчетные (но проверенные экспериментально для поверхности образцов) характеристики вертикальной составляющей индукции указанных полей. На рис. 1 и 2 представлены данные для однополюсных магнитов, а на рис. 3 – для двухполюсных.

Глубина наблюдения во всех выполненных расчетах составляла 10 мкм и выбрана потому, что именно на ней осуществляется наиболее полное преобразование электромагнитного поля токопровода в силы Ампера. Очевидно, что экспериментально получить такие зависимости невозможно.

Как уже отмечалось, к одним из существенных достоинств ЭМАП относится их способность работать с большими зазорами относительно поверхности контроля. При этом величина зазора ограничивается как

уменьшением амплитуды постоянного магнитного поля с расстоянием (см. рис. 2), так и понижением амплитуды электромагнитных волн, возбуждаемых в твердых телах токопроводами катушки. Данные зависимости также можно получить лишь расчетным путем, поэтому далее мы приводим соответствующие теоретические результаты.

Постановка задачи

Рассмотрим типовую конструкцию (рис. 4), состоящую из прямых токопроводов 1, расположенных в воздушной среде 2, объекта контроля 3, экрана 4 и однополюсного магнита 5.

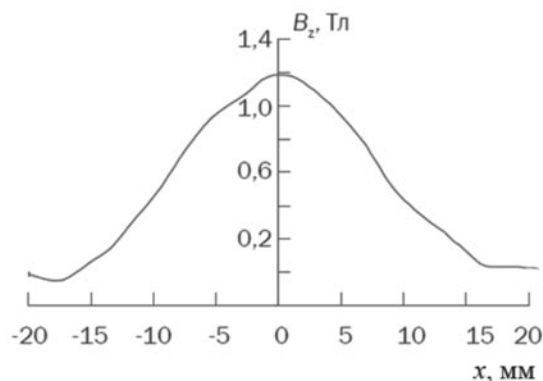


Рис. 1. Характеристика вертикальной составляющей магнитного поля от одного полюса магнита сечением 26×26 мм на глубине 10 мкм при нулевом зазоре относительно поверхности контроля

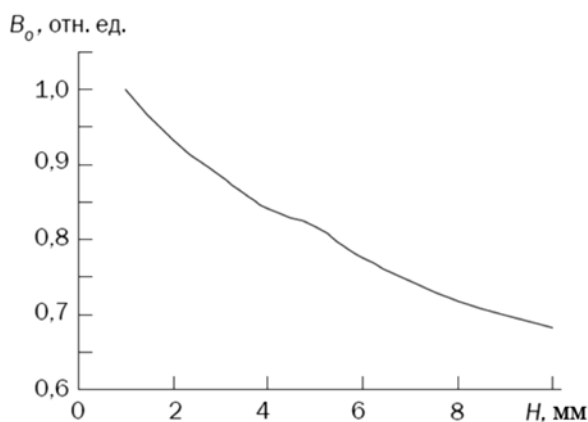


Рис. 2. Нормированное ослабление индукции магнитного поля однополюсного магнита в зависимости от расстояния между ним и поверхностью контроля

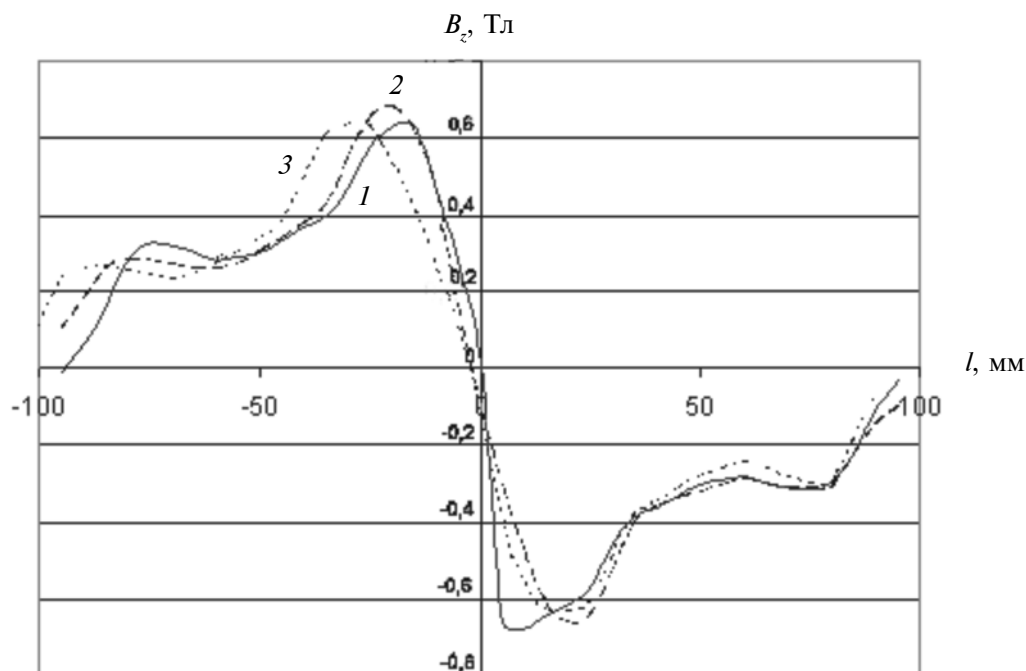


Рис. 3. Распределение вертикальной составляющей магнитного поля двухполюсного магнита размером $90 \times 26 \times 10$ мм с зазором между магнитом и поверхностью контроля 7 мм при разных расстояниях между краями полюсов, мм: 2 (1), 10 (2), 20 (3)

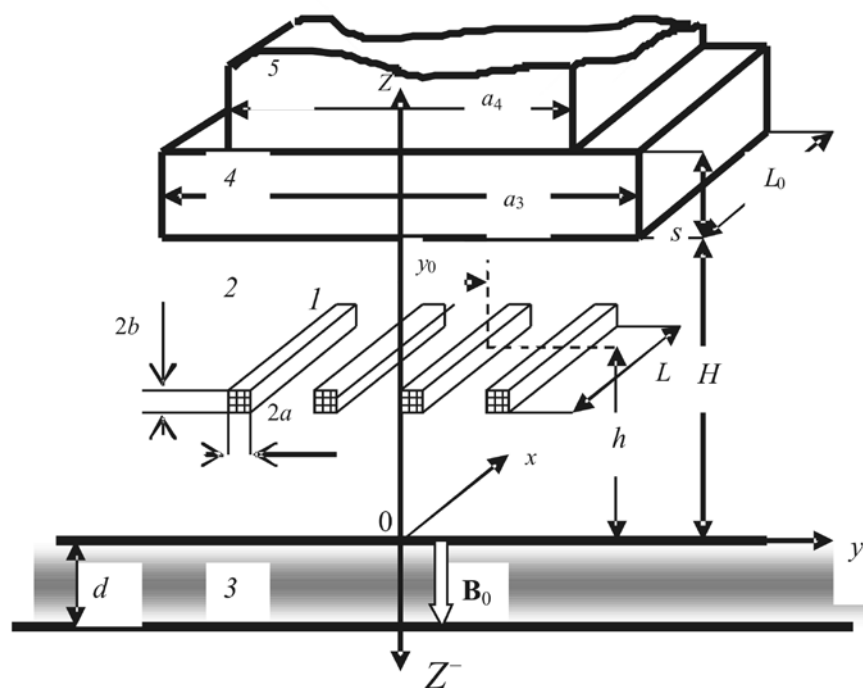


Рис. 4. Схема к постановке задачи: 1 – токопроводы (сечение $2a \times 2b$, L – длина рабочей части); 2 – воздушная среда; 3 – объект контроля (d – глубина контрольного слоя), 4 – экран ($a_3 \times L_0 \times s$); 5 – однополюсный магнит с поперечным сечением a_4 ; $\mathbf{B}_0$ – вектор индукции магнитного поля



Размер экрана 4, отражающего электромагнитные волны в направлении оси y , равен a_3 , а в направлении $x - L_0$. В продольном направлении x длина работающей части токопровода равна L . Введем обозначения: I_0 — сила тока, протекающего в одном токопроводе; y_0 — координата рассматриваемого токопровода в направлении y . Буквами μ_i обозначим магнитные проницаемости каждой из указанных сред i , символом σ_i — их проводимости, а ε_i — магнитные проницаемости.

Решения поставленной задачи

Соответствующие решения были получены нами для горизонтальной (B_y) и вертикальной (B_z) составляющих вихревого магнитного поля, возбуждаемого вблизи поверхности плоских токопроводящих изделий. Они выглядят следующим образом:

$$B_y = -\frac{2\pi D_1 m_2 z}{k_0 R^2} q_2^2 \Psi_2(\alpha_0, \beta_0) \text{Sinc}(\alpha_0 L/2) \times \\ \times \text{Sinc}(\beta_0 a) \exp(ik_0 m_2 R); \quad (1)$$

$$B_z = -i \frac{2\pi D_1 m_2 z}{k_0 R^2} \beta_0 \Psi_2(\alpha_0, \beta_0) \text{Sinc}(\alpha_0 L/2) \times \\ \times \text{Sinc}(\beta_0 a) \exp(ik_0 m_2 R).$$

В решении (1) использованы следующие обозначения:

$$D_1 = \frac{\mu_0 I_0 L}{2(2\pi)^2}; \quad \alpha_0 = m_2 x/R; \quad \beta_0 = m_2 y/R;$$

$R = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ — расстояние от центральной части рассматриваемого токопровода до точки наблюдения; $k_0 = 2\pi/\lambda$ (λ — длина электромагнитной волны в вакууме);

$$m_j = \sqrt{\frac{\mu_j}{\omega} \left(\omega \varepsilon_j - \frac{i\sigma_j}{\varepsilon_0} \right)}$$

— отношение скорости электромагнитной волны в среде с номером j к ее скорости в вакууме;

$$\Psi_2(\alpha_0, \beta_0) = \{Q_3[Q_3 \text{sh}(q_3 s) + Q_4 \text{ch}(q_3 s)] \times \\ \times [\exp(q_1(H-h)) - S_0(\alpha_0, \beta_0) \times \\ \times \exp(-q_1(H-h))] + Q_1[Q_3 \text{ch}(q_3 s) + \\ + Q_4 \text{sh}(q_3 s)][\exp(q_1(H-h)) + S_0(\alpha_0, \beta_0) \times \\ \times \exp(-q_1(H-h))]\} \cdot \{Q_1 \text{ch}(q_1 H)[Q_3 \text{ch}(q_3 s) \times$$

$$\times (Q_2 + Q_4) + \text{sh}(q_3 s)(Q_3^2 + Q_2 Q_4)] + \\ + \text{sh}(q_1 H)[Q_3 \text{ch}(q_3 s)(Q_2 Q_4 + Q_1^2) + \\ + \text{sh}(q_3 s)(Q_2 Q_3^2 + Q_1^2 Q_4)]\}^{-1}.$$

Эта функция учитывает влияние всех описанных выше параметров ЭМАП на индукцию вихревого электромагнитного поля, возбуждаемого одним токопроводом ниже поверхности контроля; в функции $\Psi_2(\alpha_0, \beta_0)$ использованы следующие обозначения:

$$q_j = \sqrt{\alpha_0^2 + \beta_0^2 - m_j^2}; \quad Q_j = q_j/\mu_j;$$

$$S_0(\alpha_0, \beta_0) = \text{Sinc}(\beta_0 a_3/2) \text{Sinc}(\alpha_0 L_0/2) \times \\ \times \exp(-i(\alpha_0 x_0 + \beta_0 y_0))$$

— функция, описывающая отражающую способность экрана и магнита.

$$\text{Sinc}(X) = \sin(X)/X; \quad \alpha_0 = m_2 x/R; \\ \beta_0 = m_2 y/R.$$

Анализ факторов, влияющих на работу ЭМАП

Горизонтальная составляющая индукции магнитного поля. Поскольку для работы ЭМАП наиболее важна горизонтальная составляющая индукции вихревого магнитного поля, рассмотрим только ее поведение. Расчеты проводились для глубины $d = 10$ мкм от поверхности контроля.

Из расчетов следует, что ослабление амплитуды волны с расстоянием от токопровода до объекта контроля носит экспоненциальный характер (рис. 5) с показателями экспоненты, равными примерно $0,324 \text{ мм}^{-1}$ на частоте 100 кГц и $0,348 \text{ мм}^{-1}$ на частоте 1 МГц. При этом амплитуда данной волны в первом случае примерно в 2,5 раза меньше, чем во втором, т. е. повышение частоты способствует росту токов Фуко, а вместе с ними и амплитуды возбуждаемых акустических волн.

Представленный расчет относился к случаю свободного токопровода, расположенного над объектом контроля. Однако при работе ЭМАП токопроводы катушки располагаются, как правило, под магнитопроводами, которые служат экраном, либо

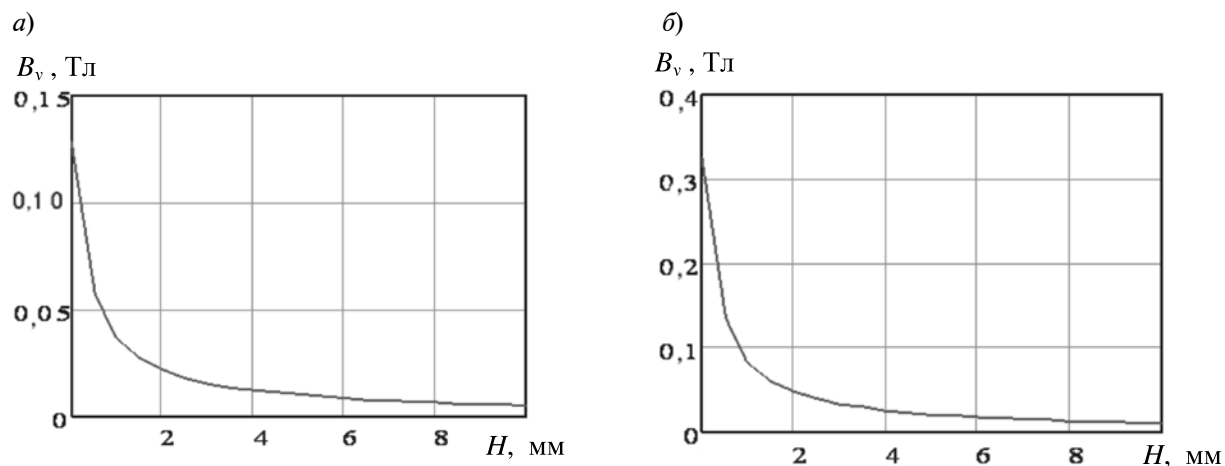


Рис. 5. Зависимости горизонтальной составляющей индукции электромагнитной волны токопровода от расстояния до объекта контроля. Частота, кГц: 100 (а), 1000 (б)

под специальными экранами. В связи с этим представляет интерес выяснить, как эти экраны влияют на магнитное поле, создаваемое токопроводами.

Влияние экранирования. Из результатов расчета следует, что чем меньше расстояние от экрана до токопровода, тем больше оказывается амплитуда излучаемой им электромагнитной волны и тем выше, чем ниже частота (рис. 6). Следует отметить, что имеющиеся теоретические и экспериментальные результаты свидетельствуют, что использование экрана, как правило, понижает амплитуду возбуждаемых электромагнитных волн, и тем сильнее, чем выше

их электропроводность и меньше угол наблюдения относительно нормали к поверхности контроля. Объясняется это тем, что отраженная от экранов электромагнитная волна токопроводов приходит к поверхности в противофазе с прямой падающей волной, ослабляя таким образом их суммарное воздействие на возбуждаемый звук.

С другой стороны, если конструкция постоянных магнитов ЭМАП, магнитопроводов и их взаимное расположение активно влияют на величину возбуждаемых и принимаемых акустических сигналов, то на поляризацию указанных волн, на диаграммы направленности и на особенности

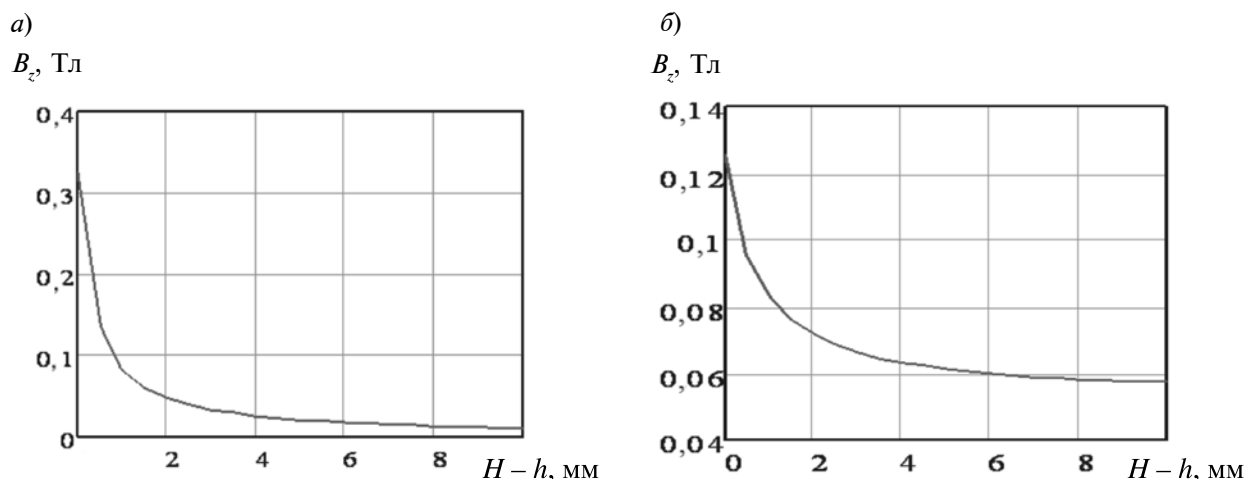


Рис. 6. Зависимости вертикальной составляющей индукции электромагнитной волны, излучаемой токопроводом, от его расстояния до экрана при зазоре между токопроводом и поверхностью контроля 1 мм. Частота, кГц: 100 (а), 1000 (б)

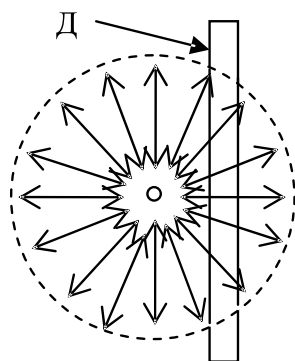


Рис. 7. Направления смещения частиц среды в волне радиальной поляризации; Д – дефект

работы преобразователей с ограниченными телами (пластины, стержни, трубопроводы и проч.) наибольшее воздействие оказывает конструкция катушек. Более того, именно конструкцией регулируется большинство характеристик ЭМАП, поэтому ее исследованию мы уделяли особое внимание.

Влияние конструкции катушек. Большинство катушек состоит либо из круговых витков типа «улитка», либо из токопроводов, соединенных различным образом (прямых или сфокусированных). Рассмотрим особенности их работы.

При использовании катушек в виде круговых витков ЭМАП излучает и принимает поперечные, радиально поляризованные акустические волны. Его преимуществами являются сравнительно высокая чувстви-

тельность, широкополосность, надежность и неплохая направленность. К недостаткам можно отнести способность работать только по нормали к поверхности контроля, невысокая чувствительность к дефектам, в результате чего такие преобразователи нашли применение в толщинометрии, но не нашли его в дефектоскопии.

В самом деле, смещение частиц среды под действием такой волны выглядит так, как показано на рис. 7. Эти частицы колеблются параллельно поверхности контроля, расходясь от центра диаграммы направленности преобразователя (пунктирная окружность на рисунке) и сходясь к нему. Если же такие волны падают на дефект, расположенный под центром диаграммы, то тогда сигналы, отражаемые различными его частями, оказываются в противофазе друг с другом, а это ведет к снижению амплитуды принимаемого сигнала. И если дефект оказывается смещенным относительно центральной части диаграммы, то это не только меняет амплитуду падающей волны, но и приводит к увеличению синфазных составляющих сигналов, отражаемых различными частями дефекта. И тогда амплитуда волны, принимаемой от дефекта, оказывается несколько большей. В случае же толщинометрии указанный эффект не сказывается, поскольку отражателем сигналов здесь служит противоположная плоскость изделия, которая не нарушает распределения поля-

Таблица 1

Расчетные параметры амплитуды излучения катушки круговой намотки

Параметр	Значение
Диаметр катушки, мм внутренний наружный	1,6 14,2
Диаметр провода, мм	0,18
Число витков	30
Индуктивность, мкГн	11,2
Рабочая частота, МГц	1,25
Диаметр отражателя, мм	4,0
Расстояние от отражателя до поверхности, мм	50

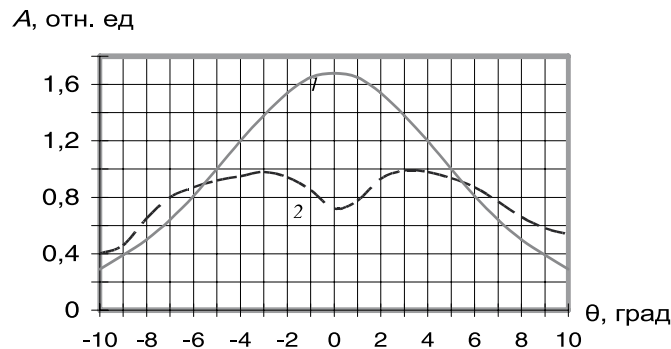


Рис. 8. Нормированные расчетные (1) и экспериментальные (с применением цилиндрических отражателей) (2) характеристики направленности излучения (приема) катушки круговой намотки (см. табл. 1).

ризации отраженной волны.

Для демонстрации данного обстоятельства приведем результаты расчета и измерения амплитуды излучения катушки, которая представляет собой соосно намотанную конструкцию в виде однослойной плотной спирали из медного изолированного провода диаметром 0,18 мм. Ее индуктивность и рабочая частота приведены ниже, отражателем служило цилиндрическое отверстие диаметром 4 мм, расположенное на расстоянии 50 мм от поверхности, по которой при измерении перемещался ЭМАП. Исходные параметры для расчета представлены в табл. 1.

Результаты измерений и расчета представлены графически на рис. 8. Видно, что вместо максимума излучения, соответствующего нормальному углу излучения ЭМАП, на экспериментальной кривой в указанной области наблюдается ослабление сигнала, причина которого объяснялась выше. Данное обстоятельство существенно затрудняет измерение реальной характеристики излучения и приема круговых ЭМАП.

Анализ акустических полей

Пользуясь полученными решениями, исследуем акустические поля, поляризованные различным образом и излучаемые в твердые токопроводящие изделия электромагнитно-акустическими преобразователями с прямыми токопроводами. Поскольку математический аппарат, используемый в расчетах, достаточно сложен,

приведем только его конечные результаты:

$$\begin{aligned} \sigma_{R\theta}(\theta, \varphi, t) &\approx iD^*W_{\varphi}^*(\theta, \varphi) \times \\ &\times \text{Sinc}(k_t L \sin \theta \cos \varphi / 2) \times \\ &\times \text{Sinc}(k_t a \sin \theta \sin \varphi) \times \\ &\times \Psi^*(\theta, \varphi) \cos \theta : [RZ^*(\theta)] \cdot f(t); \\ \sigma_{R\varphi}(\theta, \varphi, t) &\approx -iD^*W_{\theta}^*(\theta, \varphi) \times \\ &\times \text{Sinc}(k_t L \sin \theta \cos \varphi / 2) \times \\ &\times \text{Sinc}(k_t a \sin \theta \sin \varphi) \times \\ &\times \Psi^*(\theta, \varphi) \cos \theta : [RZ^*(\theta)] \cdot f(t). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь приняты следующие обозначения: $\sigma_{R\theta}(\theta, \varphi, t)$ — напряженность поперечных SV -поляризованных волн, зависящих от угла наблюдения θ в вертикальной плоскости и от угла наблюдения φ в горизонтальной плоскости сферической системы координат; $\sigma_{R\varphi}(\theta, \varphi, t)$ — то же для SH -поляризованных волн; R — расстояние от центра токопровода до точки наблюдения; t — текущее время от момента прихода импульсного сигнала к наблюдателю;

$$D^* = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \mu_0 B_0 \sigma_2 c_t I_0 L$$

(B_0 — индукция вертикальной составляющей постоянного магнитного поля с учетом его пространственной неоднородности; c_t — скорость поперечных волн в материале контроля);

$$W_{\theta}^* = [M^*(\sin^2 \theta \cos^2 \varphi F_2^* + F_3^*) +$$

$$+ 2F_1^* q^* \sin^2 \theta] \cos \theta \cos \varphi - \frac{\cos \varphi \sin^2 \theta}{q_t^*} \times \\ \times \{M^*[F_3^* - F_2^*(q_t^{*2} + \sin^2 \theta \sin^2 \varphi)] + \\ + 2q^* q_t^*(2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi F_2^* - 2F_3^* - q_t^* F_1^*)\};$$

$$W_\varphi^* = -[M^*(\sin^2 \theta \cos^2 \varphi F_2^* + F_3^*) + \\ + 2F_1^* q^* \sin^2 \theta] \sin \varphi;$$

$$Z^*(\theta) = M^{*2} - 4q^0 q_t^0 \sin^2 \theta;$$

$$\Psi^*(\theta, \varphi) = 2\{Q_3^*(Q_3^* \text{sh}(k_t q_3^* s) + Q_4^* \text{ch}(k_t q_3^* s)) \times \\ \times [e^{k_t q_1^* (H-h)} - S_3^*(\theta, \varphi) e^{-k_t q_1^* (H-h)}] + \\ + Q_1^*(Q_3^* \text{ch}(k_t q_3^* s) + Q_4^* \text{sh}(k_t q_3^* s)) \times \\ \times [e^{k_t q_1^* (H-h)} + S_3^*(\theta, \varphi) e^{-k_t q_1^* (H-h)}]\} \times \\ \times \{Q_1^* \text{ch}(k_t q_1^* H)[Q_3^* \text{ch}(k_t q_3^* s)(Q_2^* + Q_4^*) + \\ + \text{sh}(k_t q_3^* s)(Q_3^{*2} + Q_2^* Q_4^*)] + \text{sh}(k_t q_1^* H) \times \\ \times [Q_3^* \text{ch}(k_t q_3^* s)(Q_2^* Q_4^* + Q_1^{*2}) + \text{sh}(k_t q_3^* s) \times \\ \times [Q_2^* Q_3^{*2} + Q_1^{*2} Q_4^*]]\}^{-1},$$

причем

$$S_3^* = \frac{\sin(k_t a_3 \sin \theta \sin \varphi / 2)}{k_t a_3 \sin \theta \sin \varphi / 2} \times \\ \times \frac{\sin(k_t L_0 \sin \theta \cos \varphi / 2)}{k_t L_0 \sin \theta \cos \varphi / 2} \times$$

$$\times \exp(-ik_t \sin \theta (x_0 \cos \varphi + y_0 \sin \varphi));$$

$$k_j^2 = \frac{\omega \mu_j}{c_0^2} \left(\omega \varepsilon_j - \frac{i \sigma_j}{\varepsilon_0} \right)$$

— волновое число для электромагнитных волн указанных областей ЭМАП; ω — круговая частота работы преобразователя;

$$q_j^* = \sqrt{\sin^2 \theta - k_j^2 / k_t^2}; \quad q^* = -i \sqrt{p^{-2} - \sin^2 \theta};$$

$$q_t^* = -i \cos \theta; \quad q_2^* = -i \sqrt{m^2 - \sin^2 \theta};$$

$$p = k_t / k = c / c_t; \quad m = k_2 / k_t; \quad M^* = -\cos(2\theta);$$

$$q_j^* = \sqrt{\sin^2 \theta - k_j^2 / k_t^2}; \quad Q_j^* = q_j^* / \mu_j;$$

$$M^* = -\cos(2\theta);$$

$$Z^*(\theta) = \cos^2(2\theta) + \\ + 2 \sin \theta \sin(2\theta) \sqrt{p^{-2} - \sin^2 \theta};$$

x_0, y_0 — смещение центральной части рассматриваемого токопровода относительно

центра преобразователя;

$$F_1^* = \frac{M^*}{2q^*(q_2^* - q^*)} + \frac{2 \sin^2 \theta - p^2 m^2}{m^2 - p^{-2}} + \\ + \frac{q_2^*}{q_2^* - q_t^*} + \frac{2(q_2^*)^2}{m^2 - 1};$$

$$F_2^* = \frac{1}{q_2^* - q^*} + \frac{2q_2^*}{m^2 - p^{-2}} + \\ + \frac{q_2^* + q_t^*}{2q_t^*(q_2^* - q_t^*)} + \frac{2q_2^*}{m^2 - 1};$$

$$F_3^* = \frac{\sin^2 \theta \sin^2 \varphi}{q_2^* - q^*} + \frac{2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi q_2^*}{m^2 - p^{-2}} + \\ + \frac{q_2^*(q_t^{*2} + \sin^2 \theta \sin^2 \varphi) - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi q_t^*}{2q_t^*(q_2^* - q_t^*)} + \\ + \frac{q_2^*(2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - m^2)}{m^2 - 1}.$$

Функция $f(t)$ описывает временную форму применяемого импульсного сигнала и определяется генератором дефектоскопа, возбуждающего ЭМАП. Его наиболее целесообразная форма описывается функцией

$$f(t) = \left(e^{\frac{\eta}{\gamma}} \right)^\gamma \tau^\gamma \exp(-\eta t) \cos(\omega_0 t),$$

в которой $\omega_0 = 2\pi f_0$, f_0 — рабочая частота; параметры γ и η характеризуют быстроту изменения нарастающей и убывающей частей импульсного сигнала. Их величины для импульсов, в наибольшей степени соответствующих реальным сигналам, равны $\gamma = 2$ и $\eta = 0, 2\omega_0$.

Временная и спектральная характеристики указанных импульсов приведены на рис. 9.

Именно при такой временной форме импульсных сигналов генераторов достигается наивысшая чувствительность контроля с помощью ЭМАП при минимальной мертвой зоне и сравнительно невысоком уровне паразитных шумов. Вместе с тем на практике часто применяют импульсные сигналы, представляющие собой экспоненциально затухающую синусоиду (рис. 10).

С одной стороны, ширина спектральной плотности таких сигналов оказывается существенно меньшей, однако это

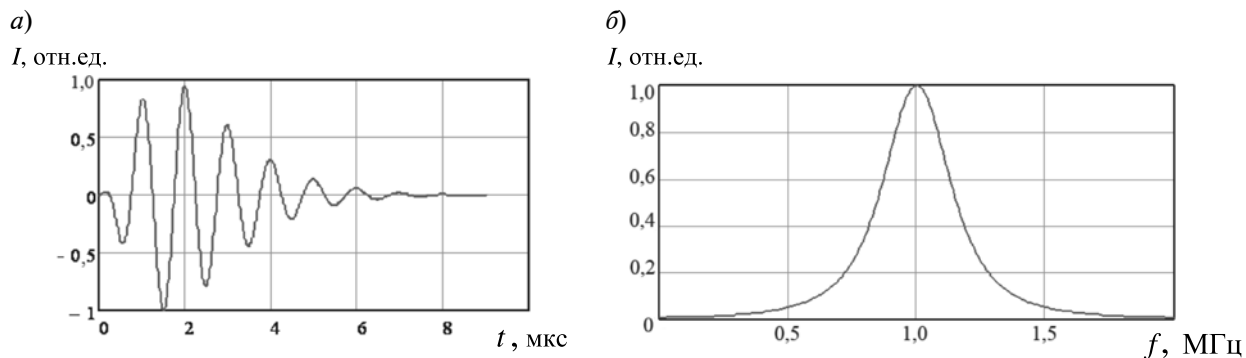


Рис. 9. Временная (а) и спектральная (б) характеристики сигналов, рекомендуемых для работы ЭМАП при $f_0 = 1$ МГц

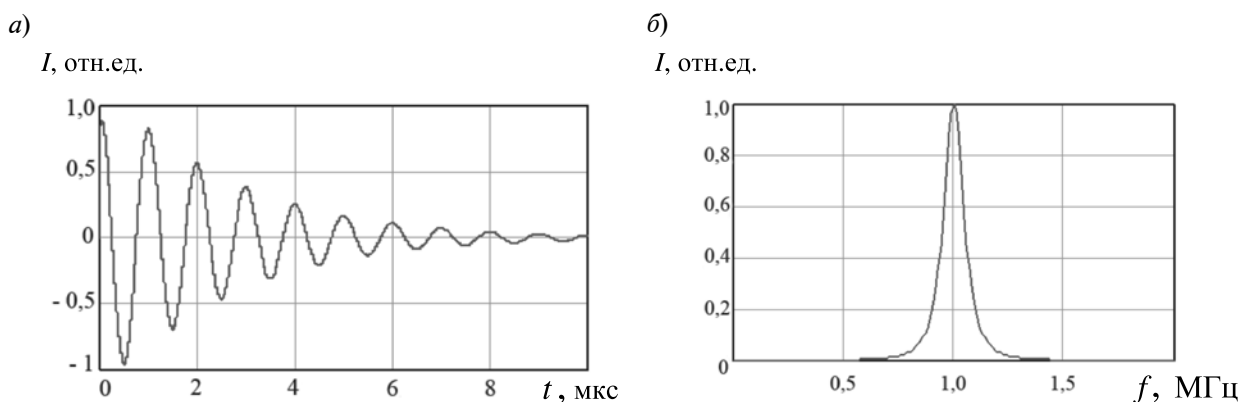


Рис. 10. Временная (а) и спектральная (б) характеристики сигналов, нередко применяемых при работе ЭМАП

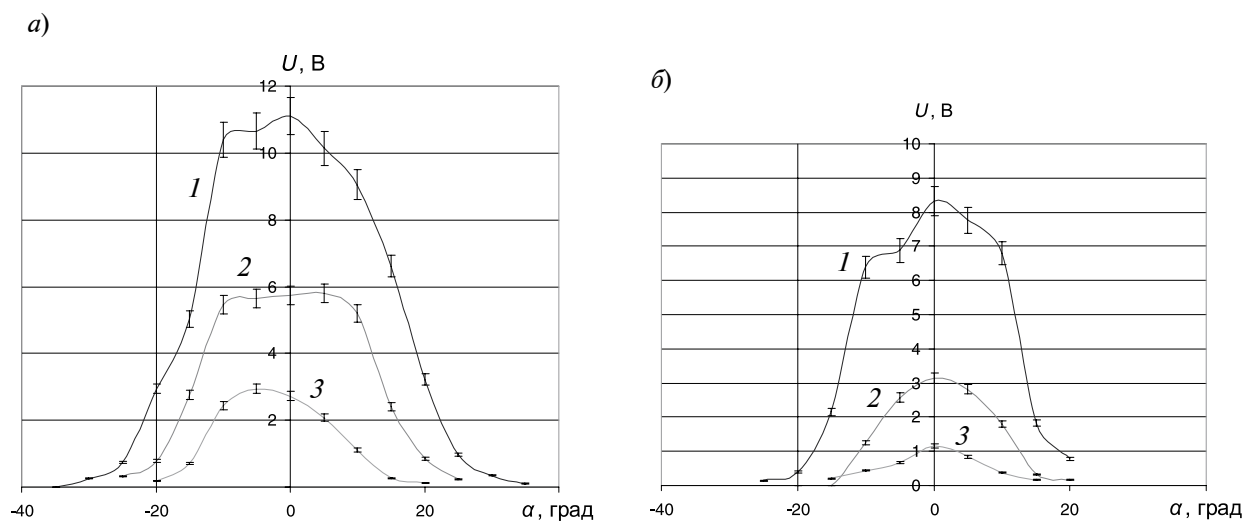


Рис. 11. Диаграммы излучения SV -поляризованных волн одним токопроводом (длина – 30 мм) в направлении, перпендикулярном ему, на частотах 1 МГц (а) и 2 МГц (б) при различных значениях величины зазора, мм: 0 (1), 1 (2), 2 (3).

Показаны доверительные интервалы, соответствующие 90 %-м вероятностям обработки результатов

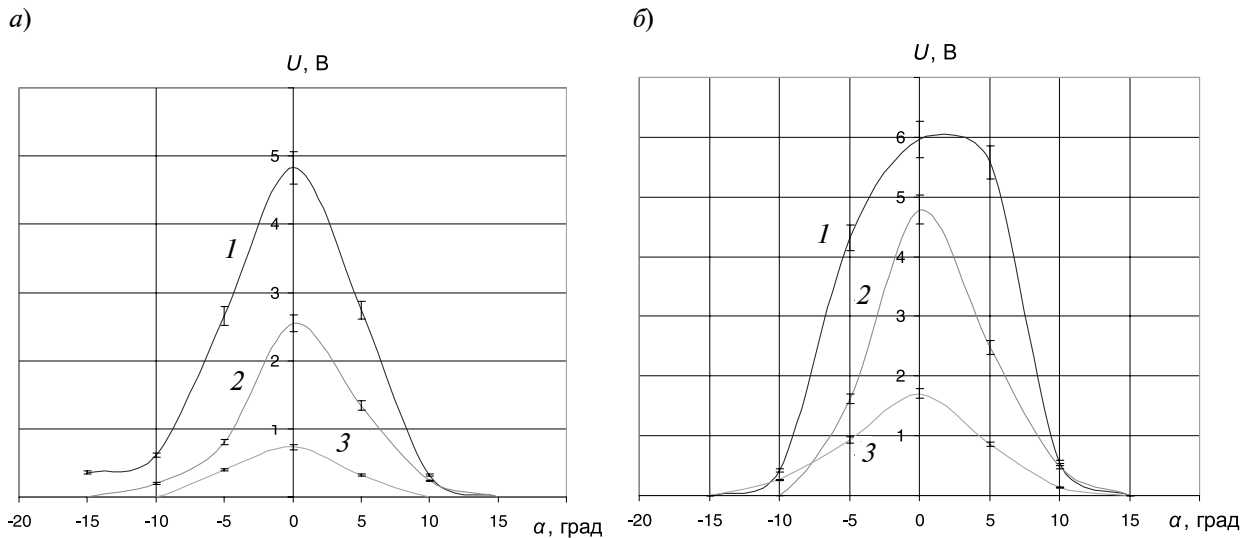


Рис. 12. Диаграммы излучения SH -поляризованных волн одним токопроводом (30 мм) в направлении, соответствующем его длине, на частотах 1 МГц (a) и 2 МГц (b) при различных значениях величины зазора (те же, что на рис. 11)

достигается за счет увеличения мертвой зоны контроля и понижения его разрешающей способности. В то же время сокращение спектральной плотности сигналов при работе ЭМАП не приводит к улучшению ситуации.

Диаграммы направленности излучения токопровода

Данные измерений диаграмм направленности излучения одного токопровода представлены в качестве примера на рис. 11 и 12 с указанием доверительных интервалов.

Для сравнения расчет тех же полей при зазоре, равном нулю, был выполнен с применением формул (2) и использованием параметров, приведенных в табл. 2. Результаты расчета представлены на рис. 13.

Разумеется, что в данном случае трудно было ожидать полного соответствия расчетных и экспериментальных кривых, поскольку отсутствуют достоверные значения таких параметров ЭМАП, как электропроводность, диэлектрическая и магнитная проницаемости магнитопровода, экрана и самого объекта контроля, а также величины всех зазоров. Тем не менее, если учитывать

Таблица 2

Параметры, использованные для расчета акустических полей по формуле (2)

Параметр	Значение
Размер экрана, мм	30 × 20 × 0,5
Расстояние между экраном и токопроводом, мм	0,5
Магнитная проницаемость экрана объекта контроля	50 20
Электропроводность, Ом·м экрана объекта контроля	0 6·10 ⁵

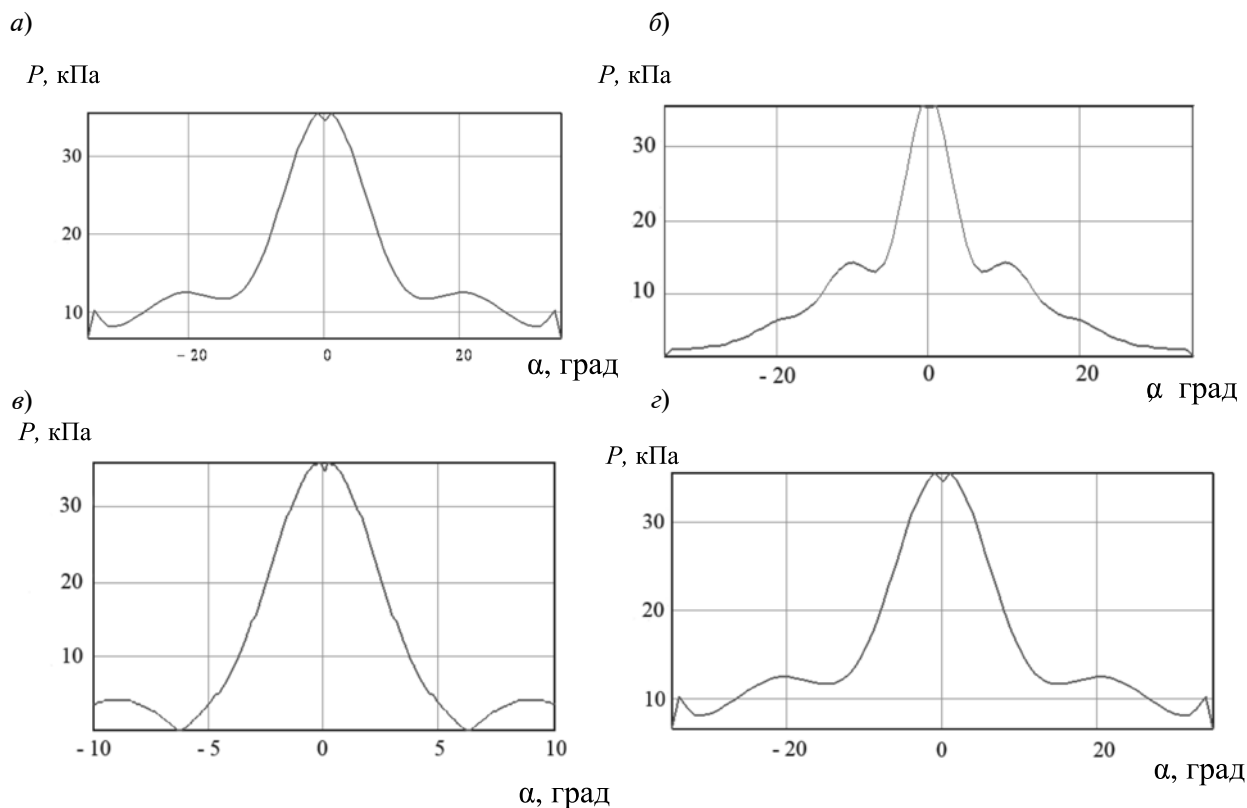


Рис. 13. Расчетные излучения SV -(а,б) и SH -(в,г)-поляризованных волн, создаваемые тем же токопроводом ЭМАП (см. рис. 11 и 12) на частотах 1 МГц (а, в) и 2 МГц (б, г)

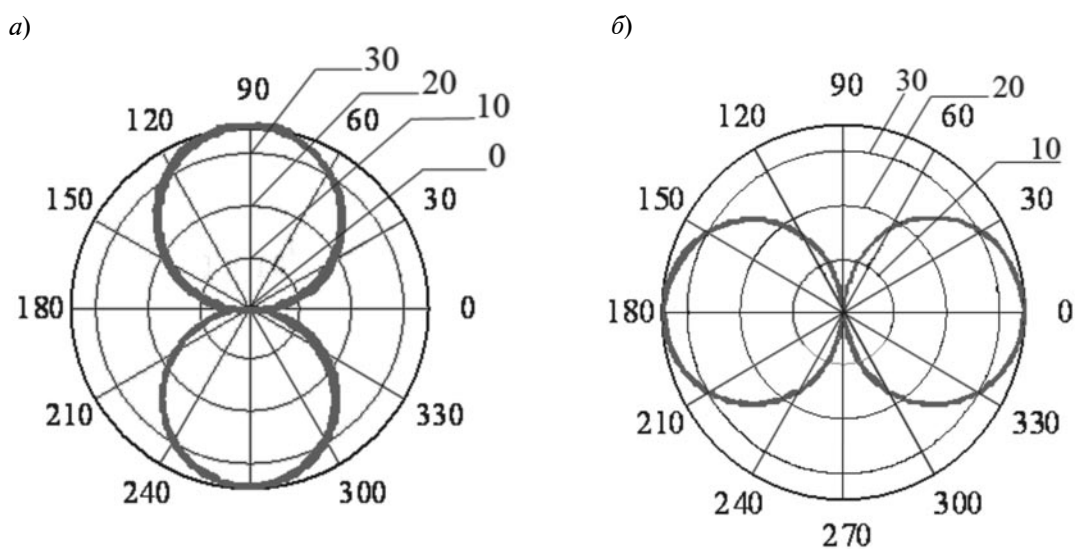


Рис. 14. Диаграммы направленности излучения SV -(а) и SH -(б) поляризованных волн, излучаемых токопроводом длиной 30 мм на частоте 1 МГц в двух плоскостях: по направлению токопровода (а) и по нормали к поверхности объекта контроля (б)

Таблица 3

Расчетные типовые характеристики прямого ЭМАП

Параметр	Значение
Количество параллельных токопроводов	36
Диаметр токопровода, мм	0,2
Длина токопровода, мм	15
Толщина медного экрана, мм	0,2
Размеры поперечного сечения экрана, мм	11,2 × 15,0

Примечание: Токопроводы питаются током генератора синфазно

сложность задачи, то качественное совпадение теоретических и экспериментальных закономерностей здесь налицо. На рис. 14 приведены расчетные характеристики указанного токопровода в двух плоскостях: первая совпадает с поверхностью образца контроля и расположена по направлению токопровода, вторая перпендикулярна этой поверхности и расположена внутри образца.

Таким образом, если максимум излучения SV -поляризованных волн соответствует нормали к длине токопроводов, то максимум SH -поляризованных — направлению токопроводов. При этом направленность излучения определяется не только частотой, но и длиной токопроводов, параметрами материалов, размерами экранов и магнитопроводов.

Кроме описанных объемных волн поперечной поляризации, указанный токо-

провод излучает также волны продольные, рэлеевские, головные, конусные и подповерхностные. Их анализ выходит за пределы данной статьи. В случае работы ЭМА-преобразователя с объектами ограниченных размеров, таких как пластины, трубопроводы, рельсы и др., параметры указанных изделий оказывают решающее влияние на все характеристики излучаемых и принимаемых преобразователем волн. В связи с указанными сложностями подобный анализ представляет собой отдельную серьезную задачу.

В целом можно констатировать, что именно из токопроводов, обладающих описанными характеристиками, формируется подавляющая часть современных ЭМАП. И от того, каким образом они располагаются на поверхности контролируемых изделий, зависят все параметры приборов, использующих ЭМАП.

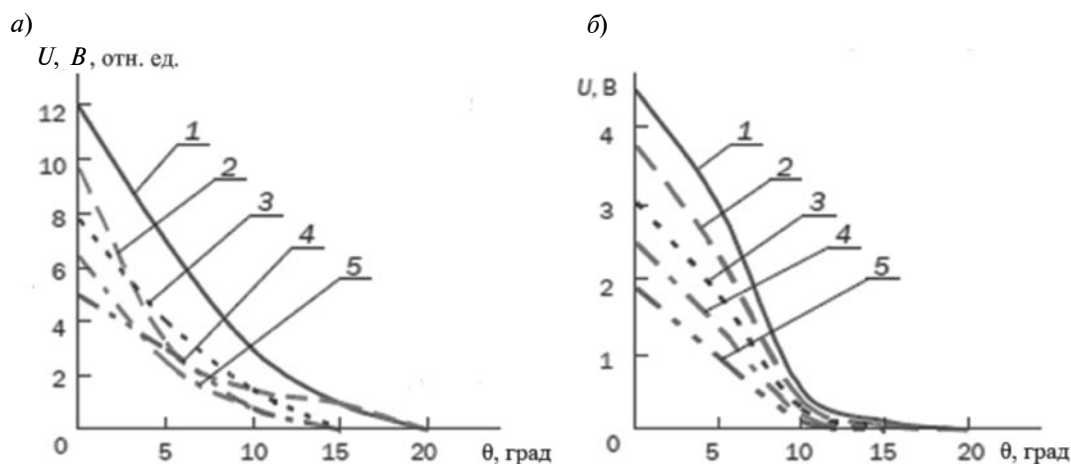


Рис. 15. Расчетная (а) и экспериментальная (б) диаграммы направленности прямого ЭМАП, работающего на частоте 1 МГц, для различных значений величины зазора, мм: 0,65 (1), 1,65 (2), 2,65 (3), 3,65 (4), 4,85 (5); U — напряжение на выходе усилительного тракта

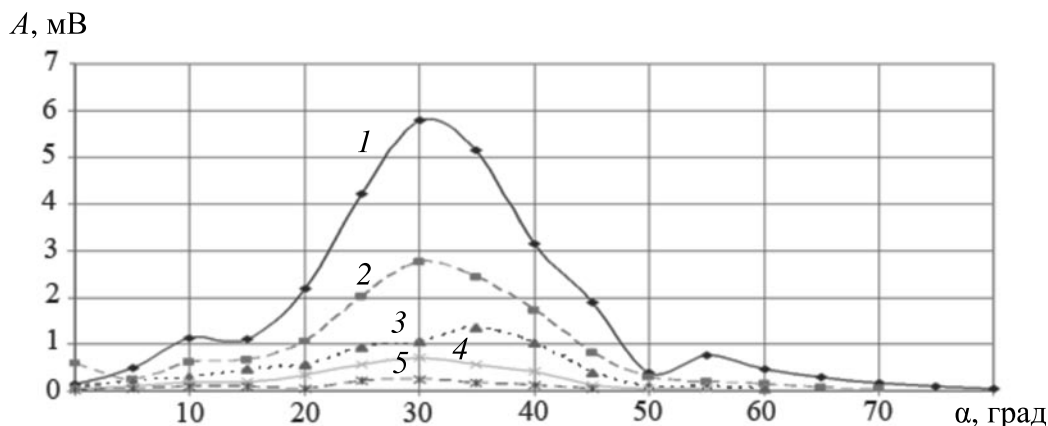


Рис. 16. Экспериментальные диаграммы направленности наклонного ЭМАП, состоящего из трех меандров (расстояние между их токопроводами – 5,4 мм) на частоте 0,6 МГц при различных значениях величины зазора, мм: 0 (1), 1 (2), 2 (3), 3 (4), 4 (5)

Так, если токопроводы питаются током генератора синфазно, то они излучают (и принимают) ультразвуковые сигналы по нормали к поверхности контроля. Типовые характеристики излучения таких преобразователей приведены в табл. 3 и на рис. 15.

В поперечном направлении направленность преобразователей определяется известной формулой

$$L = \lambda / \sin \theta_0,$$

где λ – длина поперечной акустической волны; θ_0 – угол первого минимума излучения.

Аналогичные токопроводы применяются и для конструирования наклонных ЭМАП, но к генератору тока они подключаются в противофазе друг к другу. При этом максимум диаграммы направленности θ определяется расстоянием d между соседними токопроводами и устанавливается с помощью формулы $\sin \theta = \lambda/2d$. Для большей чувствительности этот угол стараются приблизить к значению угла

$$\theta = \arcsin (c_r/c),$$

где c_r , c – скорости поперечных и продольных волн (соответственно) в материале контроля.

Ширина указанных максимумов определяется многими конструктивными особенностями преобразователей. Типичные

диаграммы направленности таких ЭМАП представлены на рис. 16. Под «меандром» в данном случае подразумеваются два токопровода, подключенных противофазно. Из результатов эксперимента следует, что с увеличением зазора между преобразователем и объектом контроля амплитуда сигналов существенно убывает, однако максимум направленности и его ширина при этом меняются в меньшей степени.

Влияние количества меандров на направленность излучения. Далее рассмотрим, как изменяется направленность излучения ЭМАП при использовании различного числа меандров (рис. 17 и 18).

На рис. 18 показаны расчетные характеристики тех же излучений (см. рис. 17), полученных при величине зазора 1 мм.

Из сопоставления результатов, приведенных на рис. 17 и 18, следует, что расчетные характеристики излучения в целом соответствуют экспериментальным, несмотря на то, что при расчетах зачастую приходилось применять оценочные значения многих электрических и магнитных параметров материалов.

Заключение

В результате проведенных исследований можно констатировать, что имеющийся теоретический аппарат с точностью, достаточной для практических целей, способен служить хорошим подспорьем при про-

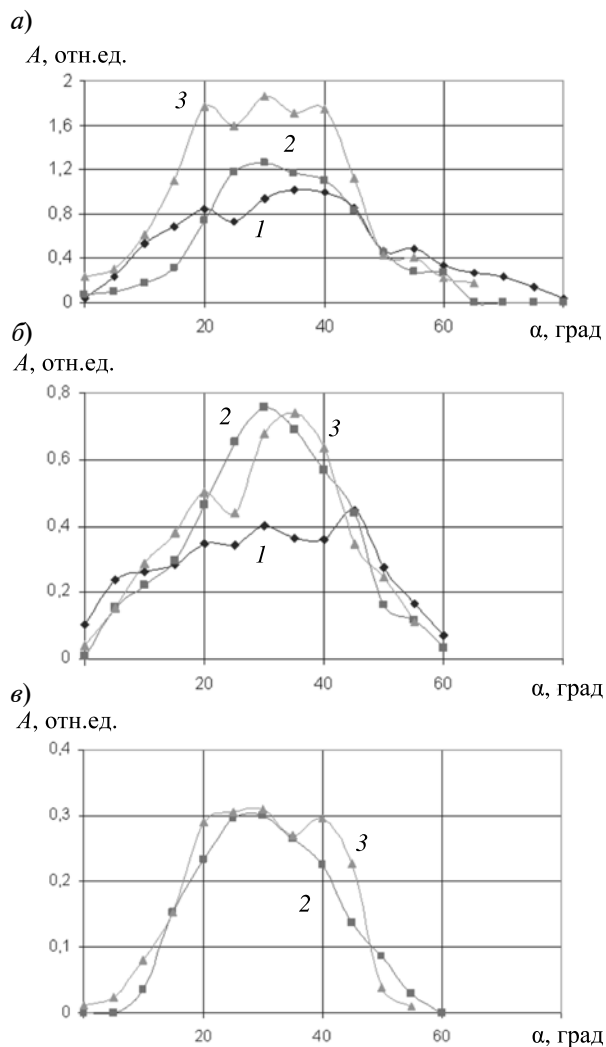


Рис. 17. Экспериментальные зависимости диаграмм направленности ЭМАП от значений величины зазора ($a - e$) и от числа составляющих ЭМАП меандров (1 – 3) на частоте 0,6 МГц. Величина зазора, мм: 0 (а), 1 (б), 2 (в); количество меандров: 1 (1), 2 (2), 3 (3)

ектировании надежных электромагнитно-акустических преобразователей.

Важно отметить, что перспективы развития ультразвукового контроля с применением ЭМАП весьма обширны. Такие преобразователи особенно эффективны при экспресс-контроле таких протяженных объектов, как трубопроводы, пластины, различные емкости и рельсы. Более того, без применения ЭМАП осуществить такой контроль в полной мере и с достаточной

надежностью вряд ли возможно. Однако данная задача далеко не является простой, поэтому без тесного взаимодействия бизнеса, теоретических и экспериментальных исследований, а также практических испытаний ее невозможно разрешить должным образом.

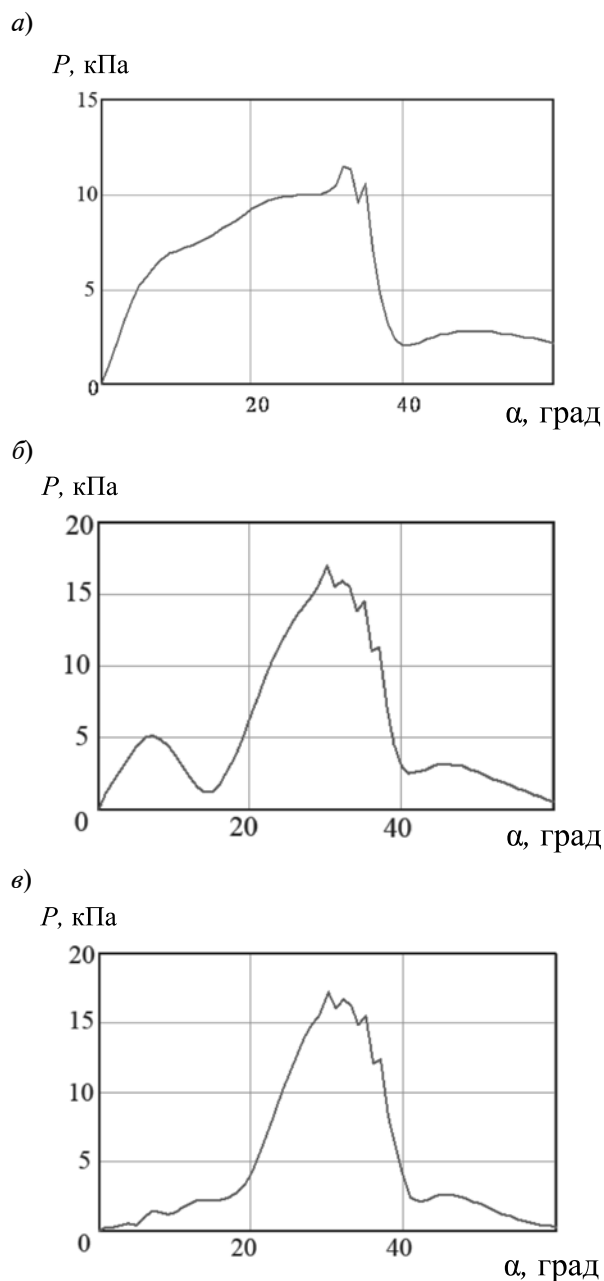


Рис. 18. Расчетные характеристики направленности излучения ЭМАП, состоящих из разного числа меандров: 1 (а), 2 (б), 3 (в). Величина зазора – 1 мм

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Чабанов В.Е., Жуков В.А.** Особенности ультразвукового контроля с применением электромагнитно-акустических преобразователей // В мире неразрушающего контроля. 2013. № 1 (59). С. 36–43.
2. **Чабанов В.Е.** Лазерный ультразвуковой контроль материалов. Л.: ЛГУ, 1986. 232 с.
3. **Горделий В.И., Чабанов В.Е., Неволин О.В.** Исследование теории и особенностей работы вихрековых электромагнитно-акустических преобразователей // Материалы XVI Российской научно-технической конференции «Неразрушающий контроль и диагностика». СПб. 2002. С. 22–25.
4. **Чабанов В.Е., Горделий В.И.** Изучение нормальных волн, распространяющихся в трубопроводах, излучаемых ЭМА-преобразователями // 1-я Национальная научно-техническая конференция и выставка. Кишинёв, 21–24 октября 2003. С. 26–33.
5. **Чабанов В.Е., Горделий В.И.** Наклонные электромагнитно-акустические преобразователи и анализ их работы // Техническая диагностика и неразрушающий контроль. 2004. № 2. С. 40–45.
6. **Горделий В.И., Чабанов В.Е.** Результаты экспериментального изучения влияния экранов на амплитуды и характеристики направленно-сти прямых ЭМА-преобразователей // «Неразрушающий контроль и диагностика», ХУ11 Российская научно-техническая конференция. Екатеринбург, 2005. С. 123.
7. **Чабанов В.Е., Горделий В.И.** Особенности SH-поляризованных акустических волн, генерируемых электромагнитно-акустическими преобразователями // «Неразрушающий контроль и диагностика в промышленности». Тезисы докладов 5-й Международной конференции. М.: 2006. С. 132.
8. **Ермолов И.Н.** Теория и практика ультразвукового контроля. М: Машиностроение, 1981. 240 с.
9. **Ермолов И.Н., Алешин Н.П., Потапов А.И.** Неразрушающий контроль. В 5 кн. Кн. 2. Акустические методы контроля: Практ. пособие. Под ред. В.В. Сухорукова. М.: Высшая школа, 1991. 283 с.
10. **Ермолов И.Н., Ланге Ю.В.** Неразрушающий контроль. В 7 тт. Т. 3. Ультразвуковой контроль: Справочник. М.: Машиностроение, 2004. 860 с.
11. **Шкарлет Ю.М.** Бесконтактные методы ультразвукового контроля. М.: Машиностроение, 1974. 56 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЧАБАНОВ Владимир Емельянович — доктор технических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vtchabanov@mail.ru

ЖУКОВ Виктор Александрович — ассистент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
vic-zhukoff@yandex.ru

Chabanov V.E., Zhukov V.A. CALCULATION AND DESIGN OF EMAT FOR ULTRASONIC NONDESTRUCTIVE TESTING.

The article focuses on the design of electromagnetic acoustic transducer (EMAT) for ultrasonic nondestructive testing of metal products. Some theoretical calculations of a number of the inverter parameters have been carried out; the influence of the screening, the transducer sensitivity dependence on the gap between EMAT and the testing surface have been considered. The article also includes theoretical calculations of magnetic field distribution and parameters of EMAT magnetic system. The measurement results of radiation patterns of direct and oblique EMAT for a number of wave types at different frequencies are given. The experimental and theoretical data were compared. The EMAT radiation directivity dependence on the number and the relative positions of the conductors carrying a current is also presented. The results of those studies can be used in optimizing the EMAT parameters in their design.

ULTRASONIC NON-DESTRUCTIVE TESTING, ELECTROMAGNETIC ACOUSTIC TRANSDUCER (EMAT), ULTRASONIC WAVE, SV- AND SH-POLARIZED WAVES, DIRECTIONAL DIAGRAM.



REFERENCES

1. **Chabanov V.E., Zhukov V.A.** Osobennosti ul'trazvukovogo kontrolya s primeneniem elektromagnitno-akusticheskikh preobrazovateley. *V mire nerazrushayushchego kontrolya*, 2013, No. 1 (59), pp. 36-43. (rus)
2. **Chabanov V.E.** *Lazernyy ul'trazvukovoy kontrol' materialov*. Leningrad, LGU, 1986, 232 p. (rus)
3. **Gordeliy V.I., Chabanov V.E., Nevolin O.V.** Issledovanie teorii i osobennostey raboty vikhretokovykh elektromagnitno-akusticheskikh preobrazovateley. *Materialy XVI Rossiyskoy nauchno-tekhnicheskoy konferentsii "Nerazrushayushchiy kontrol' i diagnostika"*. St. Petersburg, 2002, pp. 22-25. (rus)
4. **Chabanov V.E., Gordeliy V.I.** Izuchenie normal'nykh voln, rasprostranyayushchikhsya v truboprovodakh, izluchaemykh EMA-preobrazovatelyami. *1-ya Natsional'naya nauchno-tekhnicheskaya konferentsiya i vystavka*. Kishinyov, 21-24 oktyabrya 2003, pp. 26-33. (rus)
5. **Chabanov V.E., Gordeliy V.I.** Naklonnye elektromagnitno-akusticheskie preobrazovateli i analiz ikh raboty. *Tekhnicheskaya diagnostika i nerazrushayushchiy kontrol'*, No. 2, 2004, pp. 40-45. (rus)
6. **Gordeliy V.I., Chabanov V.E.** Rezul'taty eksperimental'nogo izucheniya vliyaniya ekranov na amplitudy i kharakteristiki napravlenosti pryamykh EMA-preobrazovateley. *«Nerazrushayushchiy kontrol' i diagnostika»*, 17th Rossiyskaya nauchno-tekhnicheskaya konferentsiya. Ekaterinburg, 2005, P. 123. (rus)
7. **Chabanov V.E., Gordeliy V.I.** Osobennosti SH-polyarizovannykh akusticheskikh voln, generiruemyykh elektromagnitno-akusticheskimi preobrazovatelyami. *"Nerazrushayushchiy kontrol' i diagnostika v promyshlennosti"*, *Tezisy dokladov 5-y Mezhdunarodnoy konferentsii*. Moscow, 2006, P. 132. (rus)
8. **Ermolov I.N.** *Teoriya i praktika ul'trazvukovogo kontrolya*. Moscow, Mashinostroenie, 1981, 240 p. (rus)
9. **Ermolov I.N., Aleshin N.P., Potapov A.I.** *Nerazrushayushchiy kontrol'. V 5 kn. Kn. 2. Akusticheskie metody kontrolya: Prakt. posobie*. Pod red. V.V. Sukhorukova. Moscow, Vyssh. shk., 1991, 283 p. (rus)
10. **Ermolov I.N., Lange Yu.V.** *Nerazrushayushchiy kontrol'. V 7 t. T. 3. Ul'trazvukovoy kontrol': Spravochnik*. Moscow, Mashinostroenie, 2004, 860 p. (rus)
11. **Shkarlet Yu.M.** *Beskontaktnye metody ul'trazvukovogo kontrolya*. Moscow, Mashinostroenie, 1974, 56 p. (rus)

THE AUTHORS

CHABANOV Vladimir E.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29, Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vtchabanov@mail.ru

ZHUKOV Victor A.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29, Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
vic-zhukoff@yandex.ru

УДК 621.373.826

О.Л. Головков, Г.А. Купцова, В.А. Степанов

Рязанский государственный университет им. С.А. Есенина

СТАЦИОНАРНОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ТАНГА – СТАТЦА – ДЕМАРСА ДЛЯ YAG:Nd-ЛАЗЕРА

Представлены два варианта записи системы уравнений Танга – Статца – Демарса, объясняющих генерацию YAG:Nd-лазером двух длин волн при температуре 300 К: 1064,2 и 1061,5 нм. Проведенные расчеты показали некорректность введения релаксационных переходов между населенностями решеток инверсий подуровней мультиплета $^4F_{3/2}$.

ДЛИНА ВОЛНЫ, ЛАЗЕР НА YAG:Nd, СПЕКТР ГЕНЕРАЦИИ, ЛАЗЕРНАЯ МОДА, УРАВНЕНИЯ ТАНГА – СТАТЦА – ДЕМАРСА.

Введение

В настоящее время для объяснения причин одновременной генерации YAG:Nd-лазером двух длин волн – 1064,2 и 1061,5 нм при температуре 300 К выдвинуто два подхода к теоретической интерпретации данного явления.

Впервые для описания двухволновой генерации в микро-чип-YAG-лазере предложены уравнения баланса [1], основанные на системе уравнений Танга – Статца – Демарса [2]:

$$\begin{aligned} \frac{dI_k}{d\tau} &= GI_k [g_k^{(1)}(D_0 - D_k) + \\ &+ (g_k^{(2)} + g_k^{(3)})(N_0 - N_k) - 1]; \\ \frac{dD_0}{d\tau} &= A - D_0 \left(1 + \sum_{m=1}^M g_m^{(1)} I_m \right) + \\ &+ \sum_{m=1}^M g_m^{(1)} I_m D_m - w_{AB} D_0 + w_{BA} N_0; \\ \frac{dD_k}{d\tau} &= -D_k \left(1 + \sum_{m=1}^M g_m^{(1)} I_m \right) + \\ &+ \frac{1}{2} g_k^{(1)} I_k D_0 - w_{AB} D_k + w_{BA} N_k; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_0}{d\tau} &= A - N_0 \left(1 + \sum_{m=1}^M (g_m^{(2)} + g_m^{(3)}) I_m \right) + \\ &+ \sum_{m=1}^M (g_m^{(2)} + g_m^{(3)}) I_m N_m - w_{BA} N_0 + w_{AB} D_0; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_k}{d\tau} &= -N_k \left(1 + \sum_{m=1}^M (g_m^{(2)} + g_m^{(3)}) I_m \right) + \\ &+ \frac{1}{2} (g_k^{(2)} + g_k^{(3)}) I_k N_0 - w_{BA} N_k + w_{AB} D_k, \end{aligned}$$

где I_k – интенсивность k -й моды; D_0 , D_k – пространственно-однородная инверсия и ее решетки на переходе с верхним рабочим подуровнем A (11507 см^{-1}); N_0 , N_k – то же для перехода с верхним рабочим подуровнем B (11423 см^{-1}); $G = 2k / \gamma_{\parallel}$, $\tau = t / \gamma_{\parallel}$ ($\gamma_{\parallel}$ – скорость релаксации инверсии населенности); A – параметр накачки; w_{AB} , $w_{BA} = w_{AB} / w$ – скорости релаксационных переходов между уровнями A и B ($w = \exp[(E_B - E_A) / (k_B T)]$; E_A , E_B – энергии уровней A и B ; k_B – постоянная Больцмана); $g_k^{(i)}$ – лоренцевы формы линий усиления i -й компоненты, нормированные к сечению сильного перехода, равные

$$g_k^{(i)} = \frac{\sigma_i}{\sigma} \left[1 + ((p - k)\Delta_0 + \Delta_i)^2 \right]^{-1};$$



$$\Delta_i = \frac{\omega_0^{(i)} - \omega_0}{\gamma_{\perp}},$$

причем ω_0 — центр сильной линии усиления на длине волны $\lambda = 1064,15$ 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, равная полуширине однородной линии усиления.

Авторы статьи [1] не приводят стационарного решения системы уравнений (1), а дают упрощенный вариант решения для микро-чип-Nd:YAG-лазера, где рассматривают случай одночастотной генерации на длине волны 1061,5 нм, в связи с чем справедливо пренебрегают релаксационными коэффициентами w_{BA} и w_{AB} между решетками инверсий. Приведенная система уравнений (1) для одночастотной генерации, происходящей в микро-чип-Nd:YAG-лазере, достоверно описывает экспериментальные результаты, представленные в статье [1].

Для обоснования важности учета скоростей релаксации w_{BA} , w_{AB} авторы статьи [1] специально приравняли нулю величины w_{BA} , w_{AB} и показали, что учет скоростей релаксации в уравнениях баланса необходим; при температуре 300 К $w_{BA} = 0,2$, $w_{AB} = 0,3$.

Авторы статей [3, 4] обнаружили в YAG-лазере с длиной резонатора 30 мм генерацию двух длин волн — 1064,2 и 1061,5 нм при температуре выше 300 К, когда происходит генерация множества аксиальных мод. Основой для первоначального анализа двухволнового режима генерации была система уравнений (1), но проведенные расчеты показали, что эта система не может корректно описывать спектр генерации многочастотного YAG-лазера.

Описание процессов, происходящих при генерации в YAG-лазере, системой уравнений (1) [1] вызывает сомнение относительно правомерности введения релаксационных коэффициентов w_{BA} и w_{AB} .

Во-первых, наличие ограниченных скоростей релаксации w_{BA} и w_{AB} между одно-

родными инверсиями подуровней в системе уравнений (1) должно приводить к большему обеднению населенности подуровня A мультиплета ${}^4F_{3/2}$ (с него идет генерация на длине волны 1064,2 нм), чем населенности подуровня B (генерация на длине волны 1061,5 нм). Такая математическая модель должна показать генерацию двух длин волн (1064,2 и 1061,5 нм) YAG:Nd-лазером в пиковом режиме, когда инверсия верхнего подуровня A мультиплета ${}^4F_{3/2}$ периодически обедняется и создаются благоприятные условия для генерации с более низкого подуровня B (длина волны — 1061,5 нм) при температуре 300 К, а этого не наблюдается на практике.

Во-вторых, необходимо отметить, что спектры генерации на длинах волн 1064,2 и 1061,5 нм не пересекаются, поэтому и пространственно решетки инверсии не совпадают. В связи с этим применение скоростей релаксации w_{BA} и w_{AB} для решеток инверсий некорректно. Также некорректно утверждение, что индексы k для решеток инверсий N_k и D_k , генерирующих на разных длинах волн, совпадают, и потому решетки инверсий влияют друг на друга.

В-третьих, для обоснования важности учета скоростей релаксации w_{BA} и w_{AB} авторы статьи [1] приравняли нулю скорости релаксаций w_{BA} и w_{AB} , чем постулировали отсутствие какой-либо связи между уровнями A и B . Это привело к ошибочному выводу о необходимости учета скоростей релаксации в уравнениях баланса.

Кроме того, в системе уравнений (1) параметр накачки A одинаков для обоих уровней, а это противоречит известным данным, согласно которым $A' / A = 0,3$ [5] (A , A' — параметры накачки на уровнях A и B соответственно).

На основе того, что «время жизни» на мультиплете ${}^4F_{3/2}$ составляет $2,5 \cdot 10^{-4}$ с и время релаксации между подуровнями мультиплета ${}^4F_{3/2}$ равно 10^{-7} с [6], авторы статей [3, 4] предположили, что как только произойдет обеднение населенности какого-либо из подуровней мультиплета ${}^4F_{3/2}$, тут же восстановятся населенности подуровней в соответствии с распределением Больцма-

на. Такой подход как раз соответствует общепринятой точке зрения [7, 8].

В связи с вышеизложенным, нами предложены уравнения баланса [3, 4], основанные на системе уравнений Танга – Статца – Демарса и теоретическом описании влияния слабой линии усиления (длина волны – 1064,4 нм) на спектр генерации (1064,2 нм) кольцевого лазера, представленного в работе [5]:

$$\begin{aligned} \frac{dm_k}{d\tau} &= Gm_k [L_k^{(1)}(n_0 + n_k) + \\ &+ (L_k^{(2)} + L_k^{(3)})(n'_0 + n'_k) - 1 - \beta_k]; \\ \frac{dn_0}{d\tau} &= A - n_0 \left(1 + \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m \right) - \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m n_m; \\ \frac{dn_k}{d\tau} &= -n_k \left(1 + \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m \right) - \frac{1}{2} L_k^{(1)} m_k n_0; \\ \frac{dn'_0}{d\tau} &= A' - n'_0 \left(1 + \sum_{m=1}^M (L_m^{(2)} + L_m^{(3)}) m_m \right) - \\ &- \sum_{m=1}^M (L_m^{(2)} + L_m^{(3)}) m_m n'_m; \\ \frac{dn'_k}{d\tau} &= -n'_k \left(1 + \sum_{m=1}^M (L_m^{(2)} + L_m^{(3)}) m_m \right) - \\ &- \frac{1}{2} (L_k^{(2)} + L_k^{(3)}) m_k n'_0; \\ \frac{n_0}{n'_0} &= \exp \left(\frac{E_B - E_A}{k_B T} \right) = w. \end{aligned} \quad (2)$$

Системы уравнений (1) и (2) аналогичны, но описывают разные физические процессы в лазерной среде.

В данной статье приведены стационарные решения систем уравнений (1) и (2) для YAG-лазера с длиной резонатора 30 мм и проведен сравнительный анализ расчетов спектров генерации при температурах 300 и 180 К. На этом основании сделаны выводы о правильности представленных теорий.

Анализ системы уравнений (1) для YAG:Nd-лазера

Для корректного анализа указанной системы уравнений Танга – Статца – Демарса считаем, что подуровням A и B мульти-

плета ${}^4F_{3/2}$ соответствуют разные параметры накачки [5]. Тогда получается следующее соотношение:

$$\begin{aligned} (D_0 + w_{AB} D_0 - w_{BA} N_0) + \\ + (N_0 + w_{BA} N_0 - w_{AB} D_0) = \\ = A + A' - (1 + \beta_k) \sum_{n=1}^M I_n. \end{aligned} \quad (3)$$

Известно, что на спектр генерации YAG:Nd-лазера на длине волны 1064,2 нм влияют два контура усиления (длины волн – 1064,15 и 1064,40 нм) [6], расположенных на разных подуровнях мультиплета ${}^4F_{3/2}$. Поэтому для разделения переменных D_0 и N_0 используем известный факт, что линия усиления на длине волны 1064,4 нм вносит вклад в спектр генерации на длине волны 1064,15 нм, смещая его на 0,03 – 0,05 нм. Тогда можно записать следующие выражения:

$$\begin{aligned} D_0 &= \frac{A - cI_1 + w_{BA}(A + A' - I_1 - I_2)}{1 + w_{AB} + w_{BA}}; \\ N_0 &= \frac{A' - (1 - c)I_1 - I_2}{1 + w_{AB} + w_{BA}} + \\ &+ \frac{w_{AB}(A + A' - I_1 - I_2)}{1 + w_{AB} + w_{BA}}, \end{aligned} \quad (4)$$

где c – энергетический вклад линии усиления с длиной волны 1064,4 нм в спектр генерации на длине волны 1064,2 нм; I_1, I_2 – мощности генерации на длинах волн 1064,2 и 1061,5 нм соответственно.

Тогда система уравнений (1) имеет стационарное решение:

$$\begin{aligned} D_0 &= \frac{A - cI_1 + w_{BA}(A + A' - I_1 + I_2)}{1 + w_{AB} + w_{BA}}; \\ N_0 &= \frac{A' - (1 - c)I_1 - I_2}{1 + w_{AB} + w_{BA}} + \\ &+ \frac{w_{AB}(A + A' - I_1 - I_2)}{1 + w_{AB} + w_{BA}}; \\ N_k &= F_1 \left(\frac{(g_k^{(2)} + g_k^{(3)})N_0 - (1 + \beta_k)}{g_k^{(1)}} + D_0 \right) \times \\ &\times \left(F_2 + F_1 \frac{(g_k^{(2)} + g_k^{(3)})}{g_k^{(1)}} \right)^{-1}; \end{aligned} \quad (5)$$

$$D_k = \frac{(g_k^{(2)} + g_k^{(3)})(N_0 - N_k) - (1 + \beta_k)}{g_k^{(1)}} + D_0;$$

$$I_k = \frac{D_k \left(1 + \sum_{m=1}^M g_m^{(1)} I_m + w_{AB} \right) - w_{BA} N_k}{0,5 g_k^{(1)} D_0},$$

где

$$F_1 = N_0 (g_k^{(2)} + g_k^{(3)}) \left(1 + \sum_{m=1}^M g_m^{(1)} I_m + w_{AB} \right) + w_{AB} g_k^{(1)} D_0;$$

$$F_2 = D_0 g_k^{(1)} \left(1 + \sum_{m=1}^M (g_m^{(2)} + g_m^{(3)}) I_m + w_{BA} \right) + N_0 w_{BA} (g_k^{(2)} + g_k^{(3)}).$$

Проведенные расчеты по системе уравнений (5) показали, что спектр генерации YAG:Nd-лазера зависит от коэффициента c . Так, при $c = 0,052$ происходит генерация двух длин волн — 1064,2 и 1061,5 нм при температуре 300 К, а при $c = 0,060$ — гене-

рация одной длины волны 1064,2 нм при 150 К. Максимум спектра генерации YAG:Nd-лазера при температуре 300 К обычно равен 1064,2 нм, чему, согласно расчетам, соответствует значение $c = 0,052 - 0,060$.

На рис. 1 графически представлены результаты расчетов модового состава генерации YAG:Nd-лазера при температурах 300 и 180 К по системе уравнений (1) для следующих исходных данных:

длина резонатора — 30 мм ($\Delta_0 = 0,05$);

параметры накачки $A = 7,7$ и $A' = 2,3$;

потери $\beta_k = 0,034$;

коэффициент $c = 0,054$ (максимальная мощность генерации на длине волны 1061,5 нм при температуре 180 К).

С учетом межмодового интервала $\Delta_0 = 0,05$, для удобства расчетов положим произвольным образом, что мода, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1064,15 нм, имеет номер 70. Тогда мода, соответствующая максимуму усиле-

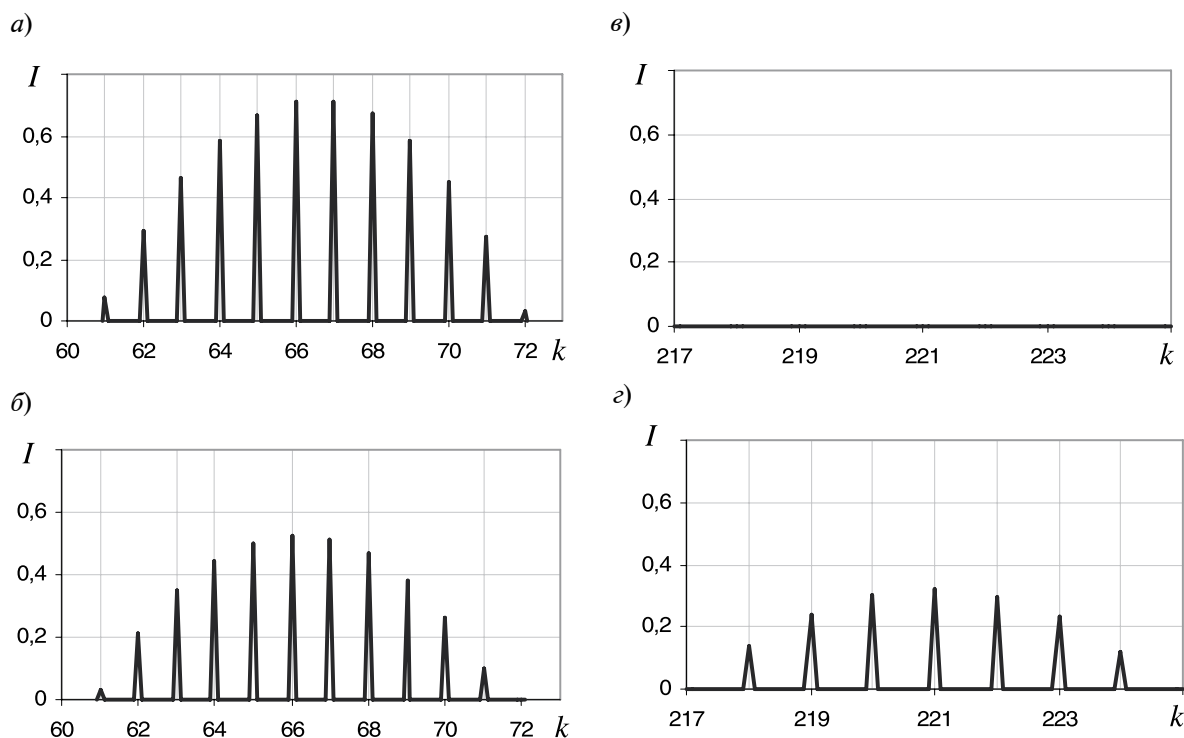


Рис. 1. Результаты расчета модового состава генерации YAG:Nd-лазера на длинах волн 1064,2 нм (а, б) и 1061,5 нм (в, г), рассчитанные по системе уравнений (1) для температуры 300 К (а, в) и 180 К (б, г)

ния на длине волны 1064,4 нм, имеет номер 56, и мода, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1061,5 нм, имеет номер 222.

При температуре 180 К мощность генерации на длине волны 1061,5 нм меньше, чем на длине волны 1064,2 нм (см. рис. 1), что противоречит общеизвестным данным. Кроме того, не проявляется сдвиг спектра генерации на длине волны 1064,2 нм в режиме генерации двух длин волн, обнаруженный в работе [3].

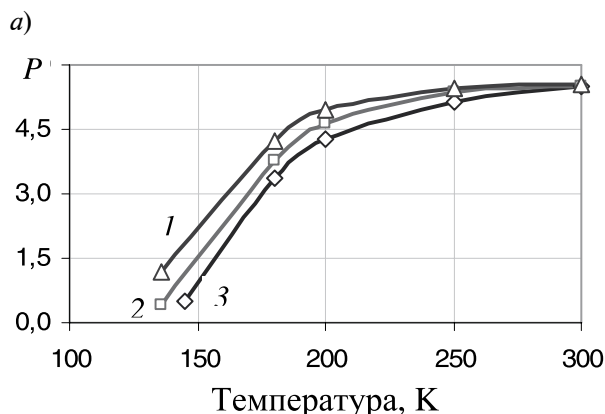
Проведены также расчеты мощности генерации YAG:Nd-лазера по той же системе уравнений (1) для разных температур кристалла и разных значений параметра c (рис. 2). Видно, что перескока с одной длины волны генерации на другую не происходит, а осуществляется устойчивая одновременная генерация двух длин волн; при этом данный процесс протекает в диапазоне температур 135 – 300 К, что также противоречит общеизвестным данным [9].

Анализ системы уравнений (2) для YAG:Nd-лазера

Система уравнений Танга – Статца – Демарса (2) имеет стационарное решение [3, 4]:

$$n'_0 = \frac{1}{1+w} \left(A + A' - (1+\beta_k) \sum_{m=1}^M m_m \right);$$

$$n_0 = \frac{w}{1+w} \left(A + A' - (1+\beta_k) \sum_{m=1}^M m_m \right);$$



$$n'_k = F_1 \left(\frac{1 + \beta_k - (L_k^{(2)} + L_k^{(3)})n'_0}{L_k^{(1)}} - n_0 \right) \times$$

$$\times \left(F_2 + F_1 \frac{L_k^{(2)} + L_k^{(3)}}{L_k^{(1)}} \right)^{-1}; \quad (6)$$

$$n_k = \frac{(1 + \beta_k) - (L_k^{(2)} + L_k^{(3)})(n'_0 + n'_k)}{L_k^{(1)}} - n_0;$$

$$m_k = \frac{n_k \left(1 + \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m \right)}{-0,5 L_k^{(1)} n_0},$$

где

$$F_1 = n'_0 (L_k^{(2)} + L_k^{(3)}) \left(1 + \sum_{m=1}^M L_m^{(1)} m_m^{(1)} \right);$$

$$F_2 = n_0 L_k^{(1)} \left(1 + \sum_{m=1}^M (L_m^{(2)} + L_m^{(3)})(m_m^{(2)} + m_m^{(3)}) \right).$$

Видно, что решение (6) значительно проще решения (5). На рис. 3 приведены результаты расчетов модового состава генерации YAG:Nd-лазера при температуре 300 и 180 К в соответствии с системой уравнений (2) для следующих исходных данных:

длина резонатора – 30 мм ($\Delta_0 = 0,05$);
 параметр накачки $A = 10$;
 потери $\beta_k = 0,03A$.

Мощность генерации лазера на длине волны 1061,5 нм при температуре 180 К значительно выше, чем соответствующая мощность на 1064,2 нм (см. рис. 3); при этом замечен сдвиг максимума спектра генерации на длине волны 1064,2 нм при

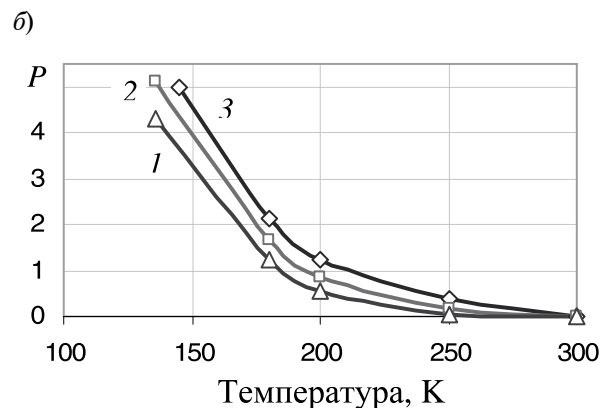


Рис. 2. Температурные зависимости мощности генерации лазера на длинах волн 1064,2 нм (а) и 1061,5 нм (б), рассчитанные по системе уравнений (1) для разных значений параметра c : 0,052 (1), 0,054 (2), 0,056 (3)

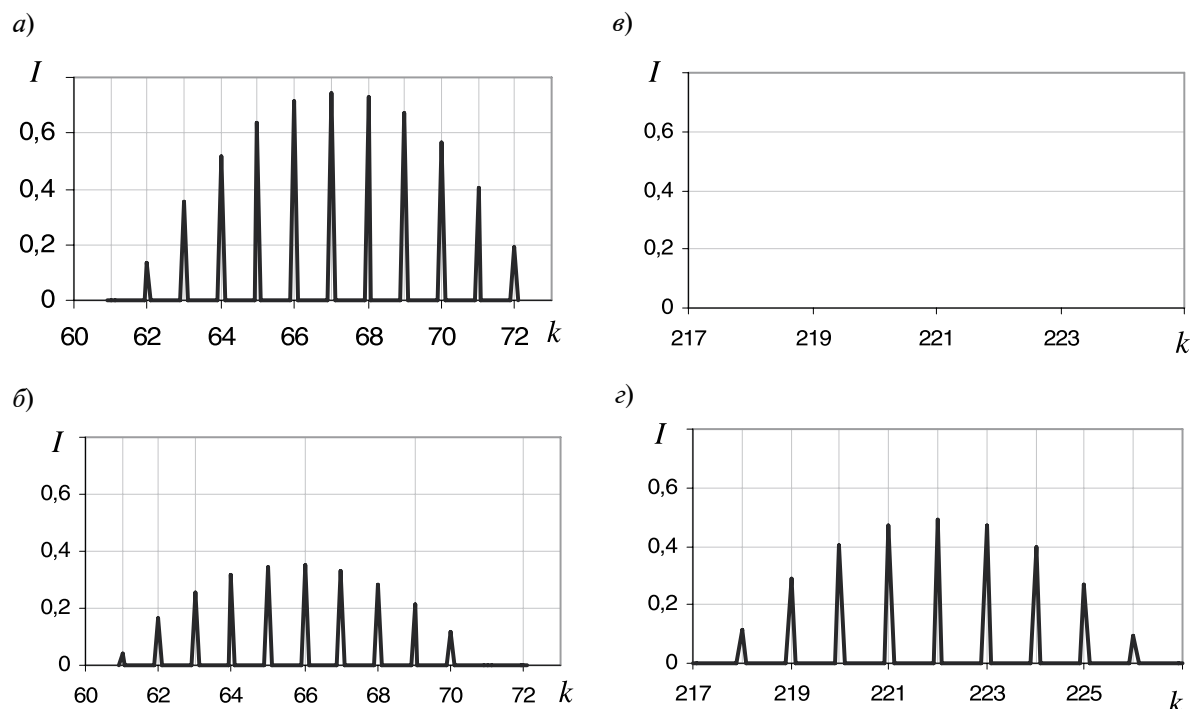


Рис. 3. Результаты расчета модового состава генерации лазера на длинах волн 1064,2 нм (а, б) и 1061,5 нм (в, г), полученные по системе уравнений (2) для температуры 300 К (а, в) и 180 К (б, г)

одновременной генерации лазером двух длин волн, (этот сдвиг описан нами в работе [3]).

Проведены расчеты мощности генерации YAG:Nd-лазера в соответствии с системой уравнений (2) для разной температуры кристалла (рис. 4). Видно, что при понижении температуры ниже 210 К происходит перескок длины волны генерации с 1064,2

на 1061,5 нм, а это согласуется с уже известными научными данными [9].

Выводы

В результате проведенного теоретического анализа и сопоставления полученных данных с общеизвестными научными результатами для YAG:Nd-лазера установлено следующее:

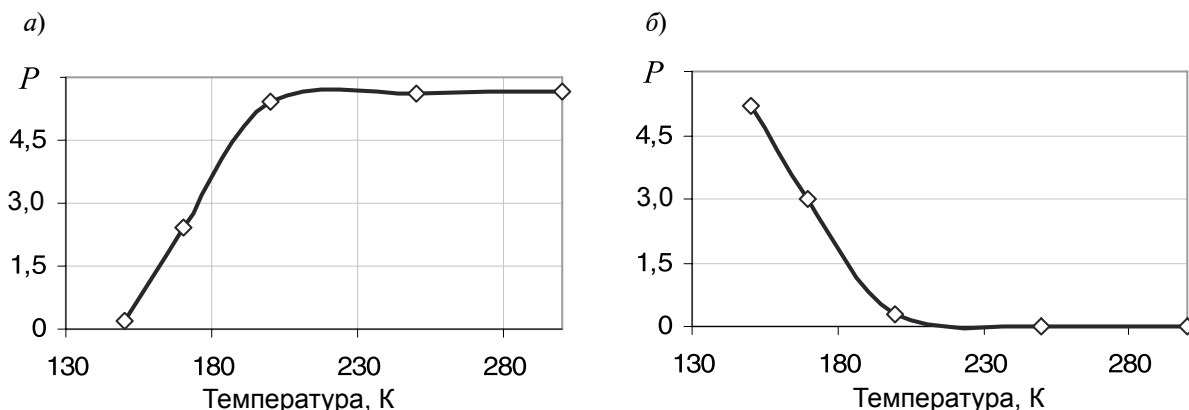


Рис. 4. Температурные зависимости мощности генерации лазера на длинах волн 1064,2 нм (а) и 1061,5 нм (б), рассчитанные по системе уравнений (2)

система уравнений (1), описывающая двухволновую генерацию 1064,2 и 1061,5 нм при температуре 300 К в микро-чип-YAG:Nd-лазере, оказывается непригодной для описания процессов генерации YAG:Nd-лазером множества продольных мод;

учет универсальности распределения Больцмана для населенностей подуровней мультиплета ${}^4F_{3/2}$ (учет был введен в статьях [3, 4]) обеспечивает с высокой достоверно-

стью адекватное описание спектров генерации множества продольных мод YAG:Nd-лазера;

следует признать некорректным применение условия релаксационных переходов между решетками инверсий подуровней мультиплета ${}^4F_{3/2}$;

применение условия релаксационных переходов между однородными инверсиями подуровней мультиплета ${}^4F_{3/2}$ требует всестороннего дополнительного анализа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иевлев И.В., Корюкин И.В., Лебедева Ю.С., Хандохин П.А. Непрерывная двухволновая генерация в микрочип-Nd:YAG-лазерах // Квантовая электроника. 2011. Т. 41. № 8. С. 715–721.
2. Tang C.L., Statz H., DeMars G. Spectral output and spiking behavior of solid-state lasers. *J. Appl. Phys.* 1963. Vol. 34. P. 2289.
3. Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. Особенности спектра излучения YAG:Nd-лазера в режиме одновременной генерации двух длин волн // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 2 (170). С. 110–114.
4. Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. Влияние потерь, вызванных двулучепреломлением в YAG-кристалле, на генерацию двух длин волн 1064,15 и 1061,5 нм // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2013. № 2. С. 171–177.
5. Ханин Я.И. Основы динамики лазеров. М.: Наука. Физматлит, 1999. 360 с.
6. 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.
7. Карлов Н.В. Лекции по квантовой электронике. М.: Наука, 1983. 319 с.
8. Мезенов А.В., Сомс Л.Н., Степанов А.И. Термооптика твердотельных лазеров. Л.: Машиностроение, 1986. 199 с.
9. Каминский А.А. Лазерные кристаллы. М.: Наука, 1975. 256 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, Россия, 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, Россия, 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, Россия, г. Рязань, ул. Свободы, 46

Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. STATIONARY SOLUTION OF THE TANG – STATZ – DEMARS SYSTEM OF EQUATIONS FOR YAG:Nd-LASER.

The paper focuses on deciding between two notations of the Tang – Statz – DeMars system of equations for a YAG:Nd laser, explaining the generation of two wavelengths: of 1064,2 nm and of 1061,5 nm at a temperature of 300 K. In the former case relaxation transitions between homogeneous inversions and inversion



gratings between the $^4F_{3/2}$ multiplet sublevels were used. In the latter case we have used the condition, which supposed that the inversions of the $^4F_{3/2}$ multiplet sublevels always followed the Boltzmann distribution. We found two solutions of the equations in question taking into account three lines of amplification and two upper sublevels of levels. Calculations performed showed it was incorrect to insert the relaxation transitions between inversion gratings populations of the $^4F_{3/2}$ multiplet sublevels.

If the universal character of the Boltzmann distribution in populations of the $^4F_{3/2}$ multiplet sublevels is taken into account it supplies reliably an adequate description of the generation spectra of longitudinal mode assemblage for a YAG:Nd laser.

WAVELENGTH, YAG : Nd LASER, SPECTRUM OF GENERATIONS, LASER MODE, TANG – STATZ – DEMARS EQUATIONS.

REFERENCES

1. Ievlev I.V., Koryukin I.V., Lebedeva Yu.S., Khandokhin P.A. Continuous two-wave lasing in microchip Nd : YAG lasers. *Quantum Electronics*, 2011, Vol. 41, No. 8, pp. 715-721.
2. Tang C.L., Statz H., DeMars G. Spectral output and spiking behavior of solid-state lasers. *J. Appl. Phys.*, 1963, Vol. 34. P. 2289.
3. Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. Spectral features of YAG:Nd laser emission in regime of simultaneous generation of two wavelengths. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2013, No. 2 (170), pp. 110-114. (rus)
4. Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. The influence of losses caused by birefringent in YAG-crystal on generation of waves of 1064.15 and 1061.5 nm length. *University proceedings. Volga region. Physics and Mathematics Sciences*, 2013, No. 2, pp. 171-177. (rus)
5. Khanin Ya.I. *Osnovy dinamiki lazerov*. Moscow, Nauka. Fizmatlit, 1999, 360 p. (rus)
6. Zverev G.M., Golyaev Yu.D., Shalaev E.A., Shokin A.A. *Lazery na alyumoitrievom granate s neodimom*. Moscow, Radio i svyaz', 1985, 144 p. (rus)
7. Karlov N.V. *Lektsii po kvantovoy elektronike*. Moscow, Nauka, 1983, 319 p. (rus)
8. Mezenov A.V., Soms L.N., Stepanov A.I. *Termooptika tverdotel'nykh lazerov*. Leningrad, Mashinostroenie, 1986, 199 p. (rus)
9. Kaminskiy A.A. *Lazernye kristally*. Moscow, Nauka, 1975, 256 p. (rus)

THE AUTHORS

GOLOVKOV Oleg L.

Ryazan State University named for S.A. Yesenin
46 Svobody St., Ryazan, Russia, 390000
golovkow@mail.ru

KUPTSOVA Galina A.

Ryazan State University named for S.A. Yesenin
46 Svobody St., Ryazan, Russia, 390000

STEPANOV Vladimir A.

Ryazan State University named for S.A. Yesenin
46 Svobody St., Ryazan, Russia, 390000

УДК 535.375.51; 577.2.08

Ф.Б. Байрамов^{1,2}, Е.Д. Полоскин², А.Л. Чернев^{1,2}, В.В. Топоров²,
М.В. Дубина¹, Е. Лахдеранта (E. Lähderanta)³, А. Лашкул (A. Lashkul)³,
Г. Липсанен (H. Lipsanen)⁴, Б.Х. Байрамов²

¹ Санкт-Петербургский академический университет, Россия

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Россия

³ Лаппеэнрантский технологический университет, Финляндия

⁴ Университет Аалто, Финляндия

РАМАНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА В ОЛИГОНУКЛЕОТИДАХ

Сообщается о детектировании спектров высокого спектрального разрешения высокочувствительным методом нерезонансного комбинационного рассеяния света в биомакромолекулах на примере одноцепочных коротких олигонуклеотидов d(20G, 20T), где d — дезоксирибонуклеотид, G — гуанин, T — тимин. Обнаружение узких спектральных линий позволило определить характерный масштаб времен и дало новые возможности для изучения динамики быстропротекающих релаксационных процессов колебательных движений атомов в биомакромолекулах. Установлено, что для одной из наиболее узких линий при $1355,4 \text{ см}^{-1}$, приписанной колебаниям метильной группы dT, полная ширина на половине ее высоты равна $14,6 \text{ см}^{-1}$; соответствующее время жизни оказалось равным 0,38 пс.

РАМАНОВСКОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА, ОЛИГОНУКЛЕОТИДЫ, ХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ, АМИДОФОСФИТНЫЙ МЕТОД.

Введение

Синтетические олигонуклеотиды, получаемые путем химического синтеза, являются фрагментами дезоксирибонуклеиновых (ДНК) или рибонуклеиновых (РНК) кислот. Они представляют собой линейные полимеры, состоящие из фрагментов нуклеотидов (НК) с заданной химической структурной последовательностью. Нуклеотиды, в свою очередь, являются комбинацией азотистого основания, рибозы или дезоксирибозы и остатка фосфорной кислоты. Синтетические олигонуклеотиды находят многофункциональное применение во многих областях современной молекулярной биологии, генетической инженерии и медицине [1]. В частности, они используются в качестве зондов для определения комплементарных последовательностей

ДНК и РНК или праймеров для секвенирования и амплификации ДНК при проведении полимеразной цепной реакции (ПЦР). В настоящее время метод ПЦР можно отнести к одному из важнейших достижений молекулярной биофизики; он позволяет многократно копировать и получать большие фрагменты исследуемых последовательностей ДНК. При проведении ПЦР используются различные реакционные смеси, и одним из их основных компонентов являются синтетические олигонуклеотиды. Они служат затравкой — отправной точкой для начала синтеза новой цепи НК ферментом ДНК полимеразой.

На основе коротких синтетических олигонуклеотидов также интенсивно развиваются новые направления биотехнологии, связанные с конструированием и создани-



ем новейших лекарственных препаратов.

Таким образом, правильный дизайн, синтез и методы оценки степени чистоты олигонуклеотидов на молекулярном уровне, определяющие эффективность амплификации и их последующее применение, имеют решающее значение.

Современный синтез коротких олигонуклеотидов с заранее заданными химическими составными элементами и с определенной последовательностью мононуклеотидов — это высокотехнологичный, трудоемкий и дорогостоящий процесс. Он осуществляется наиболее экономичным путем, с помощью интенсивно развиваемых методов автоматического параллельного синтеза на многоканальных синтезаторах. Они синтезируются в несколько этапов и, как правило, в одной емкости. При этом используются реагенты очень высокой степени чистоты, очистка которых осуществляется с использованием новейших методов высокоэффективной жидкостной хроматографии, либо электрофореза в полиакриламидном геле.

Несмотря на все отмеченные достижения, различные пост-синтетические обработки (такие как удаление из его состава различных защитных функциональных групп, непрореагировавших компонентов и недостроенных продуктов) не способствуют получению особо чистых олигонуклеотидов.

Получение высокочистых олигонуклеотидов очень важно как в научных, так и в технологических целях. Чрезвычайно актуальными представляются исследования, направленные на фундаментальное понимание структуры и механизмов взаимодействия между отдельными атомами, молекулами и функциональными группами самих олигонуклеотидов, а также их зависимости от физико-химических свойств окружающей среды. Актуальной является необходимость развития и разработки новых эффективных методов изучения структуры олигонуклеотидов на молекулярном уровне.

Существующие проблемы

Обычно визуализацию и выявление олигонуклеотидов осуществляют с использованием флуоресцентных красителей,

которые встраиваются между отдельными мононуклеотидами. К недостаткам такого метода следует отнести возможное накопление неспецифического продукта, которое может приводить к росту флуоресценции в процессе ПЦР. Кроме того, атомы и молекулы красителей иногда сами вступают в химические реакции с атомами и молекулами олигонуклеотидов. Следовательно, для получения корректных сведений о молекулярной структуре и механизмах межмолекулярных взаимодействий необходимы новые методы, не использующие олигомеров, содержащих такие метки.

Эффективным аналитическим методом исследования структуры материалов на молекулярном уровне служит спектроскопия рамановского рассеяния света. С обнаружением эффекта гигантского поверхностного усиления рамановского рассеяния (SERS — Surface Enhanced Raman Scattering [2 — 4]) на 6 — 12 порядков величины в присутствии металлических наноструктур, на которых адсорбируются органические молекулы, интерес к этому важному явлению привлекает все возрастающее внимание исследователей [5 — 21]. Значительный интерес к SERS, помимо чисто научного, связан с новыми возможностями для создания высокочувствительных аналитических методик и развития высокоселективных биосенсорных технологий с вовлечением в исследования разных новых высокоэффективных наноструктурированных металлов (см., например, работу [21] и ссылки в ней). Для получения большого отклика системы важно, чтобы агрегирующие металлические наночастицы образовывали дискретные кластеры. Для их создания используются различные красители, адсорбированные на наночастицах, и к такой модифицированной поверхности присоединяются молекулы ДНК.

Несмотря на отсутствие единого мнения о механизмах такого усиления, считается, что поверхностно-усиленное рамановское рассеяние света вызывается совместным действием двух механизмов усиления: электромагнитного [5 — 7] и химического [8, 10, 12].

Большинство исследователей считают, что электромагнитный механизм доминирует при усилении. Он обусловлен значительным усилением напряженности локального электрического поля падающей световой волны вблизи шероховатостей на поверхностях металлических частиц путем резонансного возбуждения локализованных плазменных колебаний. При этом параметры такого резонансного возбуждения, масштаб усиления и спектральные характеристики существенно зависят от морфологии поверхности, проводимости металла и свойств диэлектрического окружения [21].

Помимо этого, для адсорбированных молекул, находящихся в непосредственном контакте с металлической поверхностью, может иметь место дополнительное усиление, которое обусловлено возникновением связи электронных орбиталей молекулы с состояниями зоны проводимости металла. Масштаб такого усиления может достигать одного-двух порядков величины [8], но при этом могут образовываться комплексы адсорбированных молекул с металлическими наночастицами.

В результате двух таких эффектов возникающие внутренние гигантские электрические поля и комплексообразование молекул сильно зависят от целого ряда физико-химических свойств рассматриваемой системы и могут существенно влиять на спектральные параметры детектируемых линий рассеянного света.

Задача исследования

Ключом к более корректным исследованиям может служить развитие высокочувствительных методов молекулярной спектроскопии, не использующих металлические наноструктуры и флуоресцентные метки.

Представленное исследование ставило целью разработать альтернативную высокочувствительную методику нерезонансной спектроскопии неупругого рассеяния света высокого спектрального разрешения, с тем, чтобы ее использовать для изучения молекулярной структуры и выяснения химической природы межмолекулярных и внутримолекулярных взаимодействий в синтетических олигонуклеотидах.

Экспериментальная часть

Исследования рамановского рассеяния света выполнены для одноцепочных олигонуклеотидов 20G (гуанин) и 20T (тимин) нуклеотидных оснований — d(20G, 20T), синтезированных твердофазным амидофосфитным методом.

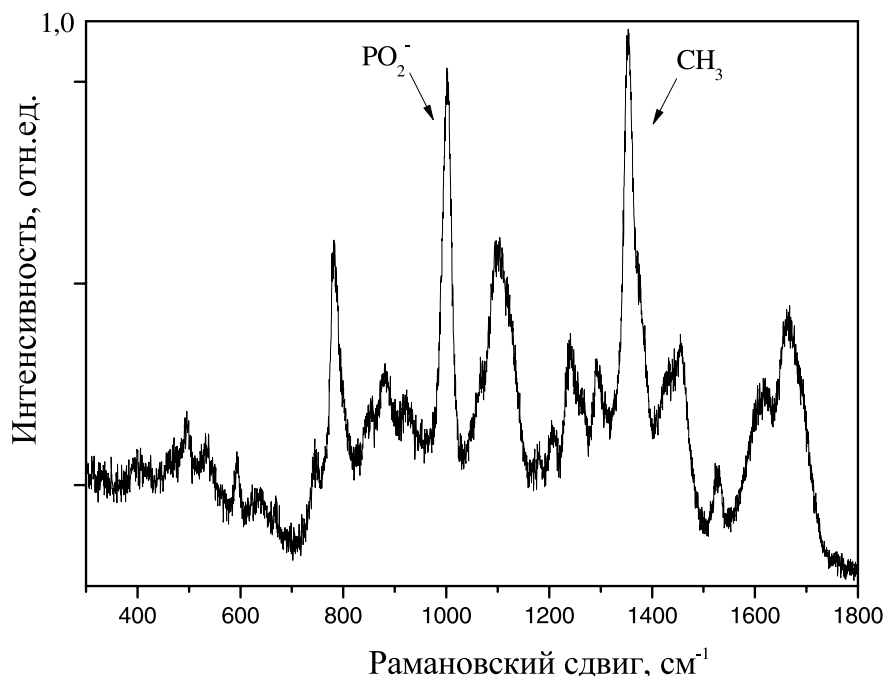
Спектры рамановского рассеяния света возбуждались излучением второй гармоники лазера на алюмо-иттриевом гранате с длиной волны $\lambda = 532,170$ нм по методике, приведенной в монографии [22]. Спектральный состав рассеянного света анализировался с помощью спектрометра LabRAM HR800 (Франция), с охлаждаемой ПЗС-матрицей в качестве детектора. Излучение мощностью 0,05 мВт фокусировалось на поверхность образца с использованием микроскопного объектива (Olympus) с усилением 100×. Диаметр лазерного пятна составлял в фокусе 0,9 мкм, что и задавало пространственное разрешение измерительной системы. Спектральное разрешение составляло 2 см^{-1} .

Основные результаты и их обсуждение

Разработанная нами высокочувствительная методика спектроскопии неупругого рассеяния света высокого спектрального и пространственного разрешений, позволяет детектировать высококачественные спектры биомакромолекул. Типичный спектр нерезонансного комбинационного рассеяния света для синтетических одноцепочных олигонуклеотидов d(20G, 20T), полученный нами в диапазоне низких частот $150 - 1800 \text{ см}^{-1}$ (линия возбуждения — 532 нм), приведен на рисунке. Аналогичные спектры были зарегистрированы с использованием линии возбуждения 632,817 нм.

Независимость характера спектров от частоты возбуждающего излучения указывает на общность их происхождения, т. е. наблюдаемые спектральные особенности объектов обусловлены комбинационным рассеянием света (КРС).

В целом спектры КРС коротких олигонуклеотидов определяются их пространственной структурой, которая задается



Спектр нерезонансного комбинационного рассеяния света, полученный для синтетического олигонуклеотида d(20G, 20T) при температуре 300 К.

Длина волны возбуждающего лазерного излучения $\lambda = 532$ нм; спектральное разрешение $R = 2$ см⁻¹

большим количеством входящих в нее атомов, совершающих колебания относительно положений равновесия. Соответственно, в спектрах КРС таких макромолекул для множества колебательных возбуждений и для всех функциональных групп неизбежно должны наблюдаться сильно перекрывающиеся спектральные вклады, которые генерируются большими наборами атомов и молекул. Такие полосы должны испытывать влияние как парных взаимодействий, так и окружающей среды. Макромолекулы коротких олигонуклеотидов, как и макромолекулы белков, не содержат ни центров инверсии, ни зеркальной симметрии. Структурное упорядочение таких систем (в любом масштабе) происходит вследствие низкой симметрии их элементарных ячеек.

Казалось бы, для биомacroмолекул трудно ожидать наблюдения узких спектральных полос в процессах КРС. Однако немаловажной особенностью полученных нами спектров нерезонансного КРС (специально несглаженных) является совокупность множества спектральных линий (см. рисунок). Видно, что наряду с довольно

широкими полосами, наблюдаются и достаточно узкие интенсивные спектральные линии. Естественным критерием реальности наблюдаемых спектральных особенностей может служить их строгая воспроизводимость в независимых сериях измерений. Наблюдаемые линии, несомненно, отражают химическую индивидуальность отдельных молекул в составе функциональных групп и их структурные свойства. При этом они определяются совокупностью и конфигурацией большого числа химических связей, а значит и валентными взаимодействиями между входящими в их состав атомами; последние определяют стабильность всей макромолекулы d(20G, 20T) и ее основные свойства.

Несмотря на высокую активность многоплановых экспериментальных исследований КРС в олигонуклеотидах и ДНК и достигнутые большие успехи (см., например, работы [9 – 21]), между спектрами, полученными при невысоком и высоком спектральных разрешениях, при их внешнем сходстве, имеются и принципиальные различия. В сильно сглаженных (из-за не-

большого отношения сигнал/шум) спектрах с перекрывающимися широкими полосами (в частности, и вследствие невысокого спектрального разрешения) не были выделены узкие спектральные линии, которые бы позволили выявить их естественную ширину. Соответственно, времена жизни колебательных состояний в биомакромолекулах не определялись.

В отличие от уже обсуждавшихся литературных данных, полученных с невысоким спектральным разрешением, когда наблюдались спектральные полосы существенно нелоренцевой формы, искаженные суперпозицией с другими спектральными линиями, наши прецизионные измерения контуров исследуемых спектральных линий позволяют выявить их лоренцеву форму. Это дает принципиально новые возможности для количественного исследования сложных молекулярных систем. Так, для наиболее узкой спектральной линии при $1355,4 \text{ см}^{-1}$, соответствующей колебаниям метильной группы dT, наблюдается существенное (в 2 – 3 раза) сужение ширины линии, по сравнению со спектрами, полученными для водного раствора олигонуклеотидов. Такое сужение до величины порядка естественной ширины позволило надежно выделить лоренцеву форму этой узкой линии с полушириной (полной шириной на половине высоты) $\Gamma = 1/2\pi\tau c$, где c – скорость света, τ – время жизни возбуждения.

Непосредственное измерение естественной полуширины спектральной линии впервые дало возможность определить временной масштаб элементарных колебательных возбуждений в биомакромолекулах. Для измеренного значения полуширины $\Gamma = 14,6 \text{ см}^{-1}$ соответствующее характерное время жизни для колебаний метильной группы dT при комнатной температуре оказалось равным 0,38 пс.

Таким образом, обнаружение узких спектральных линий делает возможным экспериментальное изучение внутренних динамических свойств быстропротекающих релаксационных процессов колебательных движений атомов в биомакромолекулах. Измеренная величина естественной полу-

ширины линий и/или времени жизни колебательных состояний может также служить надежной мерой специфичности и степени совершенства молекулярной структуры биомакромолекул. Другая узкая полоса при 1000 см^{-1} характерна для фосфатных групп PO_2^- сахарофосфатного остова спиральной структуры ДНК. Ее обнаружение прямо указывает на формирование устойчивой и стабильной пространственной молекулярной структуры синтезированных коротких одноцепочечных олигонуклеотидов длиной 40 нуклеотидов последовательности d(20G, 20T), состоящей из четырех витков спирали, а также сохранение этой структуры в лиофилизированном твердом состоянии. В целом, выводы об устойчивости, стабильности и высоком совершенстве молекулярной структуры синтезированных одноцепочечных олигонуклеотидов d(20G, 20T) также подтверждаются многими спектральными особенностями и наличием наиболее характерных максимумов, наблюдаемых во всем диапазоне частот на спектре (см. рисунок). Кроме того, полученные результаты прямо указывают на значительно большую эффективность механизма подавления различных молекулярных взаимодействий в водном растворе олигонуклеотидов, чем влияние ангармонических взаимодействий элементарных колебаний их решетки.

Заключение

Полученные в настоящей работе результаты показывают, что разработанная высокочувствительная методика рамановского рассеяния света высокого спектрального разрешения оказывается достаточной для обнаружения узких спектральных линий. Методика дает возможность выделить спектральные составляющие, которые отвечают колебаниям отдельных молекул, в сложных спектрах коротких олигонуклеотидов с достаточно большим количеством атомов в элементарной ячейке. Выделение лоренцевой формы таких узких линий позволяет получать новую информацию о динамических свойствах биомакромолекул, а именно – определять в них временной масштаб элементарных колебательных воз-



буждений. В частности, для наиболее узкой спектральной линии при $1355,4\text{ см}^{-1}$, приписанной колебаниям метильной группы dT, полная ширина на половине ее высоты оказалось равной $14,6\text{ см}^{-1}$, а соответствующее время жизни — $0,38\text{ пс}$. Кроме того, обнаруженная узкая полоса при 1000 см^{-1} , характерная для фосфатных групп PO_2^- сахарофосфатного остова спиральной структуры ДНК, указывает на формирование устойчивой и стабильной молекулярной структуры синтезированных коротких олигонуклеотидов d(20G, 20T), состоящей всего из четырех витков одноцепочечной спирали, и сохранение этой структуры в твердом состоянии.

Таким образом, высокочувствительная методика нерезонансного комбинационно-го рассеяния света высокого спектрального разрешения может быть успешно использована для исследования молекулярной

структуры коротких синтетических олигонуклеотидов и ДНК. Результаты указывают на высокие потенциальные возможности и многообещающие перспективы использования обнаруженных узких линий в качестве спектральных маркеров; они позволяют изучать природу различного рода внутри- и межмолекулярных слабых взаимодействий, а также динамику молекулярных изменений и структурных флуктуаций в биомакромолекулах.

Работа выполнена при финансовой поддержке программ фундаментальных исследований Президиума РАН № 24, Санкт-Петербургского научного центра РАН по комплексным междисциплинарным проектам, гранта Президента РФ НШ-3008.2012.2, проекта Академии Финляндии по программируемым материалам № 263 566 и проекта Финского агентства по поддержке технологий и инноваций (Tekes) по функциональным материалам “Granbis”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Marnix H., Medema M.H., Raaphorst R., Takano E., Breitling R. Computational tools for the synthetic design of biochemical pathways. *Nature Reviews Microbiology*. 2012. Vol. 10. No. 3, pp. 191–202.
2. Fleischmann M., Hendra P.J., McQuillan A.J. Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode. *Chem. Phys. Lett.* 1974. Vol. 26. No. 2, pp. 163–166.
3. Jeanmaire D.L., Van Duyne R.P. Surface Raman spectroelectro-chemistry Part I. Heterocyclic, aromatic, and aliphatic amines adsorbed on the anodized silver electrode. *J. Electroanal. Chem.* 1977. No. 84, pp. 1–20.
4. Albrecht M.G., Creighton J.A. Anomalous intense Raman spectra of pyridine at a silver electrode. *Journal of the American Chemical Society*. 1977. Vol. 99. No.15, pp. 5215–5217.
5. McCall S.L., Platzman P.M., Wolff P.A. Surface enhanced Raman scattering. *Physics Letters A*. 1980. Vol. 77, Iss. 5, pp. 381–383.
6. Wang D.-S., Kerker M., Chew H.W. Raman and fluorescent scattering by molecules embedded in dielectric spheroids. *Appl. Opt.* 1980. Vol. 19. No. 14, pp. 2315–2328.
7. Gersten J.I., Nitzan A. Spectroscopic properties of molecules interacting with small dielectric particles. *J. Chem. Phys.* 1981. Vol. 75. No. 3, pp. 1139–1152.
8. Otto A. On light scattering in solids IV. Electronic scattering, spin effects, SERS and morphic effects (ed. by M. Cardona and G. Guntherodt). Berlin, Springer-Verlag, 1984, 530 p.
9. Kneipp K., Fessler D. SERS excitation profile investigation of a cyanine dye adsorbed on silver colloidal particles. *Chem. Phys. Lett.* 1984. Vol. 106. No. 6, pp. 498–502.
10. Moskovits M. Surface-enhanced spectroscopy. *Rev. Mod. Phys.* 1985. Vol. 57. No. 3, pp. 783–826.
11. Набиев И.Р., Ефремов Р.Г., Чуманов Г.Д. Гигантское комбинационное рассеяние и его применение к изучению молекул // УФН. 1988. Т. 154. Вып. 3. С. 459–496.
12. Otto A., Mrozek I., Grabhorn H., Ake-mann W. Surface-enhanced Raman scattering. *J. Phys.: Condens. Matter*. 1992. Vol. 4. No. 5, pp. 1143–1212.
13. Kneipp K., Wang Y., Kneipp H., Perelman L.T., Itzkan I., Dasari R.R., Feld M.S. Single molecule detection using surface-enhanced Raman scattering (SERS). *Physical Review Letters*. 1997. Vol. 78. No. 9, pp. 1667–1670.
14. Nie S., Emory S.R. Probing single molecules and single nanoparticles by surface-enhanced Raman scattering. *Science*. 1997. Vol. 275. No. 5303, pp. 1102–1106.
15. Campion A., Kambhampati P. Surface enhanced Raman scattering. *Chem. Soc. Rev.* 1998. Vol. 27. No. 4, pp. 241–249.
16. Cao Y.C., Jin R., Mirkin C.A. Nanoparticles with Raman spectroscopic fingerprints for

DNA and RNA detection. *Science*. 2002. Vol. 297. No. 5586, pp. 1536-1540.

17. Drachev V.P., Thoreson M.D., Khaliullin E.N., Davison V.J., Shalaev V.M. Surface-enhanced Raman difference spectroscopy with adaptive nanostructures: Human insulin and insulin lispro. *Journal of Physical Chemistry*. 2004. Vol. 108. No. 46, pp. 18046-18052.

18. Vo-Dinh T., Yan F., Wabuyele M.B. Surface-enhanced Raman scattering for medical diagnostics and biological imaging. *J. Raman Spectrosc.* 2005. Vol. 36. No. 6-7, pp. 640-647.

19. Qian X., Peng X., Ansari D.O., Yin-Goen Q., Chen G.Z., Shin M.D., Yang L., Young A.N., Wang M.D., Nie S. *In vivo* tumor targeting and spectroscopic detection with surface-enhanced Raman nanoparticle tags. *Nature Biotechnology*. 2008. Vol. 26. No. 1, pp. 83-90.

20. Sun L., Irudayar J. Quantitative surface-enhanced Raman for gene expression estimation. *Biophysical Journal*. 2009. Vol. 96. No. 11, pp. 4709-4716.

21. Кукушкин В.И., Ваньков А.Б., Кукушкин И.В. К вопросу о дальностействии поверхностно-усиленного рамановского рассеяния // Письма

в ЖЭТФ. 2013. Т. 98. № 2. С. 72-77.

22. Байрамов Б.Х., Топоров В.В., Байрамов Ф.Б., Irmer G., Dutta M., Strosio M.A. Неупругое резонансное рассеяние света в полупроводниках: от объемных материалов до квантовых точек, функционализированных с биомедицинскими структурами. Коллективная монография, Комбинаторное рассеяние — 80 лет исследований, М.: ФИАН им. П.Н. Лебедева, 2008. С. 326-338.

23. Bayramov F.B., Irmer G., Toporov V.V., Bairamov B.H. Structural, optical and electrical properties of semiconductor compounds studied by means of inelastic light scattering from phonon, electron and coupled electron-phonon excitations: From bulk to nanoscale structures. *Jap. J. Appl. Phys.* 2011. Vol. 50. No. 5. Iss. 3. 05FE06 (4 p.).

24. Байрамов Ф.Б., Топоров В.В., Полоскин Е.Д., Байрамов Б.Х., Roder C., Sprung C., Bohmhammel K., Seidel J., Irmer G., Lashkul A., Lahderanta E., Song Y.W. Резонансное неупругое рассеяние света и фотолюминесценция в изолированных коллоидных квантовых точках пс-Si/SiO₂ // ФТП. 2013. Т. 47. № 5. С. 608-612.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БАЙРАМОВ Фарид Бахыш-оглы — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории нанобиотехнологий Санкт-Петербургского академического университета — Научно-образовательного центра нанотехнологий РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3.
pharid@gmail.com

ПОЛОСКИН Егор Дмитриевич — младший научный сотрудник лаборатории оптики полупроводников Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
e.poloskin@mail.ioffe.ru

ЧЕРНЕВ Андрей Леонидович — аспирант кафедры нанобиотехнологий, младший научный сотрудник лаборатории нанобиотехнологий Центра нанотехнологий Санкт-Петербургского академического университета — Научно-образовательного центра нанотехнологий РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
chernev.andrew@gmail.com

ТОПОРОВ Владимир Васильевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории оптики полупроводников Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
toporov@mail.ioffe.ru

ДУБИНА Михаил Владимирович — член-корреспондент РАН, доктор медицинских наук, первый проректор по научной и учебной работе, директор центра, зав. лабораторией нанобиотехнологий Санкт-Петербургского академического университета — Научно-образовательного центра нанотехнологий РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, 8, к. 3
michael.dubina@gmail.com



ЛАХДЕРАНТА Эрки (LÄHDERANTA E.) — доктор наук, профессор Лаппеэнрантского технологического университета, г. Лаппеэнранта, Финляндия.

Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta, FI-53851, Finland.

ЛАШКУЛ АЛЕКСАНДР (LASHKUL A.) — доктор наук, сотрудник Лаппеэнрантского технологического университета, г. Лаппеэнранта, Финляндия.

Lappeenranta University of Technology, Lappeenranta, FI-53851, Finland.

ЛИПСАНЕН Гарри (LIPSANEN H.) — доктор наук, профессор университета Аалто, г. Хельсинки, Финляндия.

Department of Micro- and Nanosciences, Micronova, Aalto University, FI-00076, Aalto, Finland.

БАЙРАМОВ Бахыш Халил-оглы — доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории оптики полупроводников, профессор Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

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

bairamov@mail.ioffe.ru

Bayramov F.B., Poloskin E.D., Chernev A.L., Toporov V.V., Dubina M.V., Lähderanta E., Lashkul A., Lipsanen H., Bairamov B.H. RAMAN SCATTERING OF LIGHT IN OLIGONUCLEOTIDES.

The purpose of our investigation was to develop a highly sensitive technique of the Raman light scattering spectroscopy with high spectral resolution for later use as an experimental procedure for closer examination of molecular structure and clarification of the chemical nature of intermolecular and intramolecular interactions in synthetic oligonucleotides. This task has been accomplished with optimal results. High resolution spectra being sensitive to secondary, tertiary, and quaternary structures were obtained by a highly sensitive method of non-resonant Raman scattering of light in biomacromolecules through the example of single-stranded short oligonucleotides (20G, 20T), where d — deoxynucleotide, G — guanine, T — thymine. The high-quality compounds involved were synthesized using the solid-phase phosphoramidite method.

The detection of narrow spectral lines allowed to determine the characteristic scale of times and gave new opportunities for studying the dynamics of fast relaxation processes of vibrational motions of atoms in biomacromolecules. The full width at its half-height for one of the narrowest lines (1355.4 cm^{-1}) was found to be 14.6 cm^{-1} ; this line belongs to the vibrations of methyl group of dT. The corresponding lifetime was equal to 0.38 ps.

RAMAN SCATTERING OF LIGHT, OLIGONUCLEOTIDES, SOLID-PHASE SYNTHESIS, PHOSPHORAMIDITE METHOD.

REFERENCES

1. Marnix H., Medema M.H., Raaphorst R., Takano E., Breitling R. Computational tools for the synthetic design of biochemical pathways. *Nature Reviews Microbiology*, 2012, Vol. 10. No. 3, pp. 191-202.
2. Fleischmann M., Hendra P.J., McQuillan A.J. Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode. *Chem. Phys. Lett.*, 1974, Vol. 26, No. 2, pp. 163-166.
3. Jeanmaire D.L., Van Duyne R.P. Surface Raman spectroelectro-chemistry. Part I. Heterocyclic, aromatic, and aliphatic amines adsorbed on the anodized silver electrode. *J. Electroanal. Chem.*, 1977, No. 84, pp. 1-20.
4. Albrecht M.G., Creighton J.A. Anomalousy intense Raman spectra of pyridine at a silver electrode. *Journal of the American Chemical Society*, 1977, Vol. 99. No. 15, pp. 5215-5217.
5. McCall S.L., Platzman P.M., Wolff P.A. Surface enhanced Raman scattering. *Physics Letters. A.*, 1980, Vol. 77, Iss. 5, pp. 381-383.
6. Wang D.-S., Kerker M., Chew H.W. Raman and fluorescent scattering by molecules embedded in dielectric spheroids. *Appl. Opt.*, 1980, Vol. 19, No. 14, pp. 2315-2328.
7. Gersten J.I., Nitzan A. Spectroscopic properties of molecules interacting with small dielectric particles. *J. Chem. Phys.*, 1981, Vol. 75, No. 3, pp. 1139-1152.
8. Otto A. *Light scattering in solids IV. Electronic*

scattering, spin effects, SERS and morphic effects (ed. by M. Cardona and G. Guntherodt). Berlin, Germany Springer-Verlag, 1984, 530 p.

9. Kneipp K., Fessler D. SERS excitation profile investigation of a cyanine dye adsorbed on silver colloidal particles. *Chem. Phys. Lett.*, 1984, Vol. 106, No. 6, pp. 498-502.

10. Moskovits M. Surface-enhanced spectroscopy. *Rev. Mod. Phys.*, 1985, Vol. 57, No. 3, pp. 783-826.

11. Nabiev I.R., Efremov R.G., Chumanov G.D. Gigantskoe kombinatsionnoe rasseyaniye i ego primeneniye k izucheniyu molekul. *UFN*, 1988, Vol. 154, Iss. 3, pp. 459-496. (rus)

12. Otto A., Mrozek I., Grabhorn H., Ake-mann W. Surface-enhanced Raman scattering. *J. Phys.: Condens. Matter*, 1992, Vol. 4, No. 5, pp. 1143-1212.

13. Kneipp K., Wang Y., Kneipp H., Perel-man L.T., Itzkan I., Dasari R.R., Feld M.S. Single molecule detection using surface-enhanced Raman scattering (SERS). *Phys. Rev. Lett.*, 1997, Vol. 78, No. 9, pp. 1667-1670.

14. Nie S., Emory S.R. Probing single molecules and single nanoparticles by surface-enhanced Raman scattering. *Science*, 1997, Vol. 275, No. 5303, pp. 1102-1106.

15. Campion A., Kambhampati P. Surface enhanced Raman scattering. *Chemical Soc. Rev.*, 1998, Vol. 27, No. 4, pp. 241-249.

16. Cao Y.C., Jin R., Mirkin C.A. Nanopar-ticles with Raman spectroscopic fingerprints for DNA and RNA detection. *Science*, 2002, Vol. 297, No. 5586, pp. 1536-1540.

17. Drachev V.P., Thoreson M.D., Khaliullin E.N., Davison V.J., Shalaev V.M. Surface-enhanced Raman difference spectroscopy with adaptive nano-structures: Human insulin and insulin lispro. *J. Phys. Chem.*, 2004, Vol. 108. No. 46, pp. 18046-18052.

18. Vo-Dinh T., Yan F., Wabuyele M.B. Sur-face-enhanced Raman scattering for medical diag-nostics and biological imaging. *J. Raman Spectrosc.*, 2005, Vol. 36. No. 6-7, pp. 640-647.

19. Qian X., Peng X., Ansari D.O., Yin-Goen Q., Chen G.Z., Shin M.D., Yang L., Young A.N., Wang M.D., Nie S. In vivo tumor targeting and spectroscopic detection with surface-enhanced Raman nanoparticle tags. *Nature Biotechnology*, 2008, Vol. 26, No. 1, pp. 83-90.

20. Sun L., Irudayar J. Quantitative surface-enhanced Raman for gene expression estima-tion. *Biophysical Journal*, 2009, Vol. 96, No. 11, pp. 4709-4716.

21. Kukushkin V.I., Van'kov A.B., Kukushkin I.V. K voprosu o dal'nodeystvii poverkhnostno-usilennogo ramanovskogo rasseyaniya. *Pis'ma v ZhETF*, 2013, Vol. 98, No. 2, pp. 72-77. (rus)

22. Bayramov B.Kh., Toporov V.V., Bayramov F.B., Irmer G., Dutta M., Stroschio M.A. Neuprugoe rezonansnoe rasseyaniye sveta v poluprovodnikakh: ot ob'emnykh materialov do kvantovykh tochek, funk-tsionalizirovannykh s biomeditsinskimi strukturami. *Kollektivnaya monografiya, Kombinatsionnoe rassey-anie - 80 let issledovaniy*, Moskva, FIAN im. P.N. Lebedeva, 2008, pp. 326-338. (rus)

23. Bayramov F.B., Irmer G., Toporov V.V., Bairamov B.H., Structural, optical and electrical properties of semiconductor compounds studied by means of inelastic light scattering from phonon, electron and coupled electron-phonon excitations: From bulk to nanoscale structures. *Jap. J. Appl. Phys.*, 2011, Vol. 50, No. 5, Iss. 3, 05FE06 (4 p.).

24. Bayramov F.B., Toporov V.V., Poloskin E.D., Bairamov B.H., Röder C., Sprung C., Bohmhammel G., Seidel K., Irmer G., Lashkul A., Lähderanta E., Song Y.W. Resonance inelastic light scattering and photoluminescence of individual nc-Si/SiO₂ quan-tum dots. *FTT*, 2013, Vol. 47. pp. 608-612.

THE AUTHORS

BAYRAMOV Farid B.

St. Petersburg Academic University of the Russian Academy of Sciences
8/3 Khlopina St., St. Petersburg, 195220, Russia
pharrid@gmail.com

POLOSKIN Egor D.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Politeknicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
e.poloskin@mail.ioffe.ru

CHERNEV Andrei L.

St. Petersburg Academic University of the Russian Academy of Sciences
8/3 Khlopina St., St. Petersburg, 195220, Russia
chernov.andrew@gmail.com

TOPOROV Vladimir V.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
toporov@mail.ioffe.ru

DUBINA Michael V.

St. Petersburg Academic University of the Russian Academy of Sciences
8/3 Khlopina St., St. Petersburg, 195220, Russia
michael.dubina@gmail.com

LÄHDERANTA Erkki

Lappeenranta University of Technology
Lappeenranta, FI-53851, Finland

LASHKUL Alexander

Lappeenranta University of Technology
Lappeenranta, FI-53851, Finland

LIPSANEN Harri

Department of Micro- and Nanosciences, Micronova, Aalto University
FI-00076, Aalto, Finland
harri.lipsanen@aalto.fi

BAIRAMOV Bakhysh H.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences
26 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
bairamov@mail.ioffe.ru

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЗМОВ АВТОРЕГУЛЯЦИИ ТРАНСКРАНИАЛЬНОГО КРОВООБРАЩЕНИЯ В РЕЖИМЕ РЕАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ

В работе изложены архитектура и особенности программной реализации клиент-серверной системы, разработанной для изучения процессов мозгового кровообращения в режиме реального времени. Представлены результаты клинических испытаний созданного программного обеспечения, в ходе которых исследовался феномен *M*-волн.

КЛИЕНТ-СЕРВЕРНАЯ АРХИТЕКТУРА, АВТОРЕГУЛЯЦИЯ ТРАНСКРАНИАЛЬНОГО КРОВООБРАЩЕНИЯ, *M*-ВОЛНА, МОДИФИКАЦИЯ НЕПАРАМЕТРИЧЕСКОГО МЕТОДА УЭЛЧА, СОСТОЯТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА СПЕКТРА.

Введение

Разработка неинвазивных методов для изучения биологических систем — одно из актуальных направлений исследований в медицинской биофизике и физике. Научный аспект подобных разработок приобретает еще большее значение, когда идет речь об исследованиях органических и функциональных патологий в медицинской практике.

Центральное место в человеческом организме занимает мозг. Отклонения в работе систем поддержания гомеостаза на уровне этого управляющего центра приводят к серьезным осложнениям в работе как самого мозга, так и других органов. Диагностика отклонений, которые имеют динамический характер, позволяет планировать оперативное хирургическое вмешательство, адекватное состоянию больного, а затем и послеоперационный период.

Исследования механизмов авторегуляции в живых системах имеют (помимо прочих) несомненное фундаментальное значение. Природа создала, выражаясь языком математики, уникальные сжимающие отображения, которые обеспечивают состояния динамического равновесия — гомеостазис — в живых организмах. Новые оценки и модели систем управления гомеостазисом дают возможность переосмыслить многие количественные характеристики и связи между ними. Получаемые в клиниках дан-

ные могут быть проанализированы в контексте содержательных моделей, а также моделей, адекватных этим данным.

Церебральная гемодинамика — одно из направлений в исследованиях систем гомеостаза на уровне мозга. Развитие неинвазивной диагностики привело к появлению в нейрохирургической практике методов транскраниальной ультразвуковой доплерографии (ТКДГ). Суть этих методов заключается в том, что с помощью импульсных ультразвуковых сигналов исследователь имеет возможность регистрировать линейную скорость кровотока (ЛСК) в магистральных артериях мозга. Такие оценки, в свою очередь, обеспечивают исходную информацию для постановки пациенту адекватного диагноза. Они позволяют определить локализацию окклюзий, аневризм, травматических повреждений тканей мозга, а также систем его кровоснабжения.

По мере эволюции методов исследования нейрохирурги пришли к закономерному выводу: открытая динамическая система должна изучаться в динамике, т. е. в режиме реального времени. Условия проведения обследования должны быть физиологичны. В ходе диагностики состояния пациента необходимо проводить целый ряд тестов. Они имеют различный характер, например искусственное нарушение кровообращения на определенном участке его системы механическим путем (манжетные тесты);



химические тесты, осуществляемые повышением парциального давления определенного газа (чаще всего углекислого) в смеси, вдыхаемой пациентом, и т. п. На языке теории динамических систем эти воздействия обобщенно именуют внешними возмущениями. Исследователей интересуют, как правило, количественные характеристики реакции системы на такие возмущения. По наблюдаемым и регистрируемым количественным показателям реакции организма можно делать конкретные выводы о состоянии механизма системы регуляции, системы поддержания гомеостаза.

В лаборатории НИИ нейрохирургии им. проф. А.Л. Поленова за последние два десятилетия сформировалась целая научная школа, которая занимается исследованиями авторегуляции систем мозгового кровотока (АРМК). Ученые лаборатории, руководимой проф. В.Б. Семенютиным, изучают системы авторегуляции церебральной гемодинамики. Доминирующие особенности этих систем как динамических по своей природе с неизбежностью потребовали обратиться к методам исследования АРМК в режиме реального времени. Выбор подходящего теста для анализа состояния систем авторегуляции, равно как и момент его проведения, должен осуществляться непосредственно в ходе сеанса обследования пациента. Это обстоятельство легко понять, принимая во внимание, что все регистрируемые количественные характеристики являются нестационарными случайными процессами (СП) по определению. Любая конечная реализация траектории любого стационарного СП является нестационарным СП. Правильность применения подавляющего большинства методов анализа нестационарных СП обусловлена выбором подмножества реализации траектории СП (РТСП), на которой его можно рассматривать как квазистационарный (квазипериодический) СП.

Следовательно, только располагая актуальной оценкой состояния пациента, полученной в ходе текущего сеанса, возникает принципиальная возможность адекватно выбрать способ воздействия на его систему АРМК, равно как и моменты, длительность (степень) таких воздействий. В свою

очередь результат воздействия, регистрируемый в режиме реального времени, позволяет варьировать различные параметры возмущения, обеспечивая тем самым полноту этого исследования. Получаемые результаты не только доставляют оценки границ динамического диапазона конкретного показателя, но и условия, при которых наблюдается «срыв авторегуляции», т. е. переход нелинейной системы в качественно иное состояние.

В связи с вышеизложенными проблемами и возникла задача разработки программно-аппаратной системы для сбора и анализа результатов ТКДГ, ряда других показателей, регистрируемых в режиме реального времени.

Существующий инструментарий и методика исследований

Допплерографическое обследование осуществляется с помощью типовых приборов, выпускаемых несколькими компаниями, разработчиками медицинского оборудования. В НИИ нейрохирургии им. проф. А.Л. Поленова используется программно-аппаратный комплекс Multi Dop X (DWL, Germany). Перечислим основные функции этого комплекса:

предварительная аппаратная и/или программная фильтрация аналоговых сигналов, поступающих с ультразвуковых датчиков DWL (автору настоящей статьи недоступны подробности, касающиеся реализации алгоритмов фильтрации);

аналого-цифровое преобразование отфильтрованного сигнала и его регистрация;

идентификация на основе зарегистрированных траекторий СП мальформаций, аневризм и других органических патологий мозгового кровообращения (при наличии дополнительных программных модулей).

В клинической практике на аналоговые входы подаются как сигналы с ультразвуковых датчиков DWL, так и аналоговый сигнал с прибора, регистрирующего системное артериальное давление (САД). Программный комплекс DWL обеспечивает визуализацию на экране монитора поступивших сигналов после того, как они подверглись фильтра-

ции. По завершении сеанса возможна запись усеченной и отфильтрованной РТСП на внешнее запоминающее устройство (диск). Программная реализация хранения данных построена на основе простейшего архитектурного решения. В базе данных MS Access хранятся метаданные проведенных сеансов. Они представляют собой совокупность записей в нескольких взаимосвязанных таблицах (классическая реляционная модель). Сами же сигналы РТСП записываются (после уменьшения их объема) во внешние файлы — некое подобие BLOB-полей в традиционных технологиях хранения информации.

Возможность проведения анализа возникает только по завершении сеанса обследования. Записанные на внешнее запоминающее устройство данные РТСП экспортируются во внешний файл. Затем штатными средствами пакета “Statistica for Windows” осуществляется спектральный анализ: оценка кросс-спектра с помощью преобразования Фурье, фильтрация высокочастотных гармоник и сглаживание спектра в области, интересующей исследователей [1].

Такая методика существенно сужает круг задач, решаемых учеными. Однако преодолеть ограничения на объем хранимых данных и на форматы их хранения, например стандарт DICOM, еще представляется возможным (для этого требуется приобрести дополнительные программные модули у компании разработчика комплекса); коммерческий же продукт с закрытым исходным кодом не дает такой возможности. Поэтому практикующие врачи — специалисты по таким исследованиям столкнулись с безусловной необходимостью довольствоваться результатами фильтрации, которая обеспечивается программно-аппаратным комплексом DWL. Возможности же корректировать алгоритмы фильтрации по своему усмотрению не предоставляется. Наконец, сама процедура оценивания, которая реализуется уже *a posteriori*, не позволяет осуществить исследование *in situ* в полной мере.

По итогам изучения статей, опубликованных ведущими научными центрами, которые занимаются подобными исследо-

ваниями в своих клиниках, мы сделали следующее заключение. В тех клиниках, где активно проводятся работы по этой тематике, либо используют программно-аппаратные комплексы, допускающие адаптацию и доработку на уровне аппаратного или программного обеспечения, либо разрабатывают собственные инструментальные средства. Из коммерческих решений в статьях наиболее часто упоминаются PMD150 Spencer Technologies, Inc., WA, Ohmeda Monitoring Systems, Englewood CO. Из второй группы наибольший интерес представляет, по нашему мнению, программный комплекс ICM+ [2]. Работы по созданию этого программного обеспечения (ПО) начались (по утверждению авторов [2]) еще в конце 1980-х гг. Последнее десятилетие они продолжают в Кембриджском университете Великобритании, в одной из его клиник. Коммерческая версия ICM+ доступна с 2004 г. и постоянно дорабатывается авторами. Однако это ПО, как и любое другое коммерческое решение, является своеобразным черным ящиком для приобретающих его исследователей. Последние релизы допускают расширение в форме динамически подключаемых библиотек, но архитектуру ядра и детали ее реализации автору данной статьи не удалось найти в открытой печати.

В условиях, когда для продолжения исследований не было выбора как в отношении аппаратного обеспечения (АО), так и ПО, специалисты лаборатории НИИ нейрохирургии им. проф. А.Л. Поленова приняли решение модернизировать программно-аппаратный комплекс Multi Dop X и предложили автору разработать необходимое программное обеспечение.

Краткое описание архитектуры разработанного программного комплекса и методики исследований

Силами специалистов вышеуказанной лаборатории была осуществлена доработка аппаратной части комплекса. Они воспользовались аналоговыми выходами Multi Dop X, на которые дублируются исходные сигналы с ультразвуковых датчиков до их фильтрации. В системный блок персо-



нального компьютера инженеры поместили PCI-карту с DSP-процессором и тем самым реализовали независимую параллельную регистрацию аналоговых сигналов с ультразвуковых датчиков Multi Dop X. Аналого-цифровое преобразование DSP-процессором этой платы возможно в частотном диапазоне от 1 до 100 кГц. При таких условиях и возникла задача разработки программного комплекса, который бы обеспечивал следующие функциональные возможности:

регистрацию цифрового сигнала на выходе каждого из восьми каналов DSP-процессора с возможностью их препроцессорной обработки;

запись полученных оцифрованных сигналов в репозиторий (БД);

анализ хранимых в репозитории сигналов (всей доступной в данный момент траектории или определенной ее части) в режиме реального времени;

визуализацию результатов анализа регистрируемых сигналов в режиме реального времени.

Следует отметить, что описанные в литературе коммерческие программно-аппаратные комплексы, которые используются в подобных исследованиях, реализуют алгоритмы обработки сигналов, полученных с частотой дискретизации до 1 кГц. В некоторых публикациях изложены результаты, согласно которым исходные данные получены с частотой дискретизации в 10 кГц,

но там не приводится каких-либо сведений об особенностях программных решений.

Мы придерживаемся классической точки зрения, сформулированной в трудах советской математической школы (академики В.М. Глушков, А.А. Харкевич): чем больше новой информации предполагается получить в результате исследования, тем больший объем исходной информации требуется обеспечить для проведения этих исследований (зависимость имеет полиномиальный характер). В частности, в рамках данной работы мы проектировали программный комплекс таким образом, чтобы он позволил использовать аппаратное обеспечение на пределе его возможностей. Благодаря этому в ходе клинических испытаний комплекса мы смогли увеличить, по меньшей мере, на два порядка объемы исходной информации (по сравнению с заявленными в других работах).

На рис. 1 представлена обобщенная схема проведения сеанса — распределенная реализация всех вышеперечисленных функций.

Особенности архитектуры программного комплекса и методики исследований

Регистрация цифрового сигнала. Модуль, обеспечивающий регистрацию цифровых сигналов и их препроцессорную обработку (далее сервер), удовлетворяет выдвинутым требованиям и выполняет следующие функции:

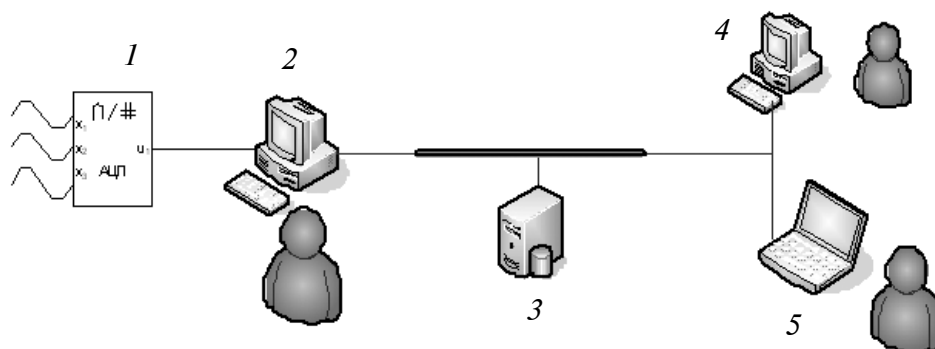


Рис. 1. Схема распределенной реализации сбора и анализа данных доплерографического обследования в режиме реального времени:

1 — аналого-цифровое преобразование сигнала с датчиков, 2 — регистрирующий компьютер, 3 — сервер базы данных, 4, 5 — рабочие станции клиентов 1, ..., N

обнаружение карты с DSP-процессором (далее АЦП) в одном из USB-слотов системы;

сбор и анализ метрик АЦП;

инициализацию АЦП, обеспечивающую проведение сеанса в требуемом режиме, а именно — частота дискретизации аналогового сигнала, размер кадра, усиление сигналов по каждому из каналов;

определение (в диалоге с оператором сервера) основных метрик — идентификатора пациента в базе данных, семантики регистрируемых сигналов;

регистрацию и сохранение данных в репозитории системы в течение заданного промежутка времени (длительность сеанса);

досрочное прекращение сеанса в случае необходимости.

Хранение данных в репозитории системы. Для хранения метаданных (информация о пациенте, сеансы его обследований и семантика данных, полученных в ходе сеансов), равно как и для хранения зарегистрированных сигналов, разработана база данных, эксплуатируемая под управлением СУБД MySQL 5.1. Доводами в пользу этого решения были доступность и портируемость. Доступность связана с тем, что реляционные системы управления базами данных семейства MySQL распространяются как свободное ПО, т. е. не требуется приобретения каких-либо лицензий на их использование. И, кроме того, они легко портируются с одной платформы на другую (с WINTEL на Linux или наоборот). Наконец, в предложенной архитектуре все алгоритмы обработки данных, затратные в отношении процессорного времени, вынесены на уровень сервера и клиента. Эксперименты показали, что выбранная нами система управления базой данных успешно справляется с нагрузкой запись-чтение в заданном диапазоне частот дискретизации входных аналоговых сигналов. Тестирование выполнялось в режимах от 125 новых записей в секунду по каждому каналу при частоте дискретизации АЦП 1 КГц до 12500 таких единиц при указанной частоте в 100 КГц. Периодичность операций чтения из базы данных варьировалась в диапазоне от

1 до 4 с, что в настоящее время полностью удовлетворяет функциональным требованиям. Основные процессы в организме человека протекают на частотах ниже 250 Гц, а частоты, представляющие интерес в данной задаче, — в окрестности 1 Гц (систола-диастола) и ниже (дыхательные экскурсии, *M*-волны, *B*-волны).

Репозиторий был нами организован как реляционная база данных. Таблицы с метаданными о пациентах и сеансах их обследований спроектированы в первой нормальной форме. Таблицы, в которых хранятся собственно данные, полученные с АЦП, денормализованы. Это было вынужденным решением, которое обеспечило (в числе прочих мер по оптимизации процесса записи в базу данных) требуемую скорость работы серверной части программного комплекса.

Анализ и визуализация исходных данных и оценок в режиме реального времени. Хранимые в репозитории системы данные с периодичностью, определяемой пользователем, извлекаются компонентом программного комплекса (далее графический клиент), который реализует требуемые функции в части обработки и представления данных. Периодичность опроса базы данных клиентом составляет, как правило, несколько секунд, что определяется характерными временами исследуемых процессов. Длительность пульсовой волны — порядка одной секунды. У механизмов мио- и нейрогенного регулирования длительность характерных времен на порядок больше.

Алгоритм извлечения данных реализован как инкрементальное накопление данных в адресном пространстве процесса клиента. Данные РТСП, получаемые по итогам запросов, сохраняются в соответствующих структурах данных адресного пространства процесса. При этом каждый последующий запрос извлекает только ту часть РТСП, которая была записана сервером в базу данных с момента предыдущего запроса к ней этого же клиента. Нетрудно понять, что такая масштабируемая архитектура клиента позволяет выполнять независимый анализ получаемых данных несколькими экземплярами программы-клиента. Производитель-



ность обработки ограничена только вычислительными возможностями компьютера, на котором выполняется код клиента. Тем самым мы исключаем из рассмотрения задачу построения дополнительных серверов приложений, которые в типовых решениях реализуют основную обработку данных.

В контексте текущей сессии пользователь оперирует, прежде всего, исходными наборами данных (РТСП, полученные из репозитория). Реализованные в коде графического клиента алгоритмы позволяют выполнять определенные преобразования (далее «операторы»), результатами которых являются производные наборы данных. Операторы применяются к наборам данных в режиме реального времени. Ограничения на аргументы оператора, т. е. ограничения, налагаемые на совокупность данных, которая подлежит обработке, зависят от типа оператора.

Наиболее общая типизация операторов, реализованных в коде клиента, может быть предложена на основе такого системообразующего признака, как число аргументов. В текущей версии существуют унарные и бинарные операторы. Ряд операторов имеет ограничения в отношении семантики аргумента. Например, унарные операторы *M-wave* или *B-wave* применимы только к производным наборам данных, которые представляют собой оценку спектра, полученную с помощью оператора FFT (алгоритм быстрого преобразования Фурье). Семантика набора данных в числе целого ряда других его метаданных хранится на уровне структур данных процесса графического клиента.

Более детальные сведения об операторах, реализованных в текущей версии программы клиента, будут изложены в следующих разделах статьи.

Графический интерфейс клиента, графическое представление как исходных, так и производных наборов данных построены на основе векторной графики платформы WINTEL (рис. 2 и 3). Данное решение было продиктовано тем обстоятельством, что все специалисты лаборатории НИИ нейрохирургии им. проф. А.Л. Полено-

ва используют на своих рабочих станциях операционную систему (ОС) Windows XP. Прекращение ее поддержки компанией производителем (корпорация Майкрософт официально прекратила поддержку ОС Windows XP с апреля 2014 г.) может повлечь за собой переход пользователей клиентского ПО на другие платформы (например, ОС Linux). Принимая во внимание и такой сценарий, мы при проектировании архитектуры клиента ориентировались на шаблон MVC [3], насколько это было возможно для проекта, чей исходный код был написан исключительно на языке Си.

Выбор векторной графики платформы WINTEL обусловлен необходимостью обеспечить приемлемую производительность программы клиента (прежде всего, это скорость обработки данных). Поскольку основная вычислительная нагрузка приходится на этапы обработки данных (применение конкретного оператора) и получения исходных данных (запросы на выборку), векторная графика позволяет свести к минимуму время на отрисовку.

Обработка данных и их визуализация реализованы в разных потоках. Коллизии, возникающие при их одновременном доступе к разделяемым ресурсам, разрешаются в пользу потока, выполняющего вычисления. Поток, выполняющий отрисовку, приостанавливается до завершения обновления оценок потоком обработки данных. Основной причиной лаконичности графического представления данных в разработанном клиентском программном обеспечении является требование повышения производительности вычислений.

Остается добавить, что исходный код как серверного, так и клиентского ПО разработан на языке Си (стандарт C99). Интерфейс с ОС реализован на основе WIN API, т. е. на уровне системных вызовов ОС Windows.

Тестирование показало, что клиентское ПО может успешно эксплуатироваться на рабочих станциях с процессорами Intel Core (их рабочая частота — не ниже 1,4 ГГц), снабженных оперативным запоминающим устройством на 2 Г и более.

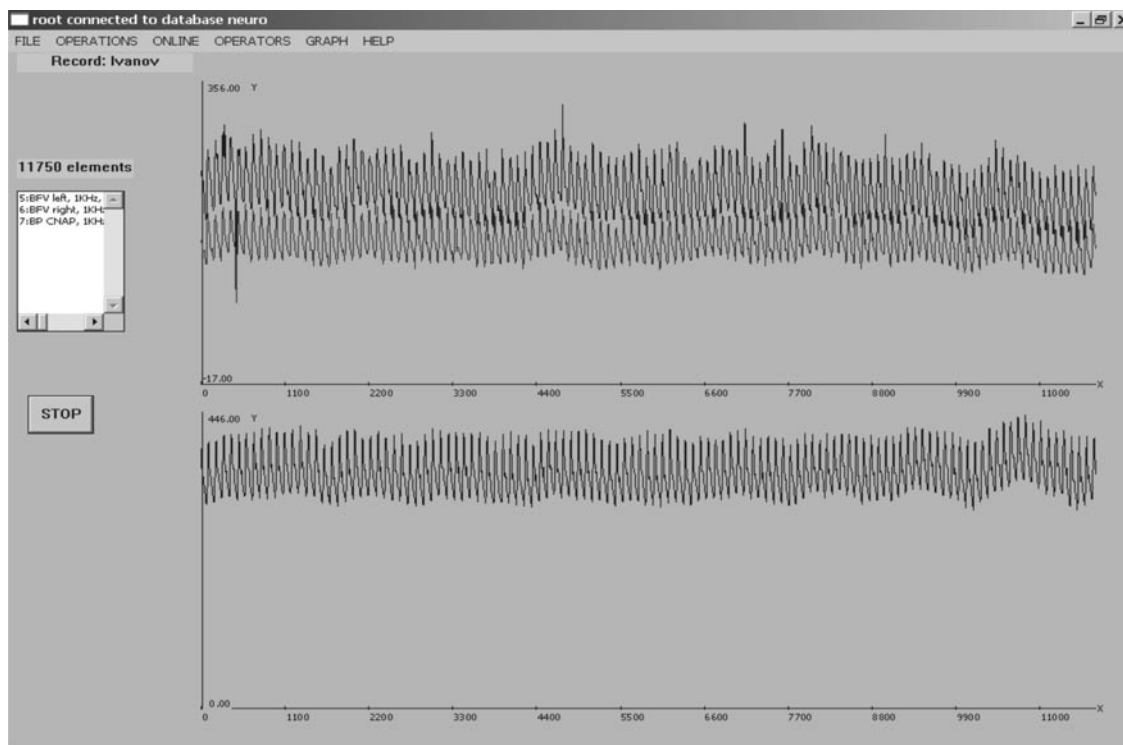


Рис. 2. Пример графического интерфейса клиента в режиме реального времени на основе векторной графики платформы WINTEL.

Сверху вниз: регистрируемые сигналы с левого и правого доплеровских датчиков, а также регистрируемое изменение системного артериального давления. Клиентское ПО позволяет отрисовать на одном графике до 10 кривых. По нашему опыту, большее количество затрудняет восприятие графической информации.

Оценки, необходимые для клиницистов

Методология анализа регистрируемых сигналов или РТСП построена на фундаменте традиционной спектральной теории СП. Работы, в которых используются другие подходы, в частности вейвлет-анализ, пока неоднозначно воспринимаются специалистами этой предметной области. Основная причина популярности классического преобразования Фурье — простота содержательной интерпретации оценок спектра, которые доставляет этот метод.

Исходят из предположения, что в пределах РТСП всегда существуют участки, где процесс можно рассматривать как квазипериодический. Его определение:

$$\text{Mes}_X(t + T_0 + \delta(t)) = \text{Mes}_X(t) + \varepsilon(t), \quad (1)$$

где $\text{Mes}_X(\dots)$ — случайная мера, носитель которой определяют на основе физиологических представлений о природе этого слу-

чайного процесса; в качестве T_0 принимают длину периода той компоненты спектра СП, которая вносит основной вклад в его спектральную плотность; $\delta(t) \sim O(T_0)$ — малое отклонение длительности конкретного периода от его оценки в среднем; $\varepsilon(t) \sim O(\text{Mes}_X(t))$ — малое отклонение оценки функции распределения ординаты процесса $X(t)$ от его оценки в среднем.

В частности, модель (1) используется для анализа регистрируемых показателей: линейной скорости кровотока (ЛСК) и системного артериального давления (САД) после предварительной фильтрации высокочастотных гармоник.

Подобные представления сформировались в тесной связи с исследованиями механизмов поддержания гомеостаза — динамического равновесия в живых организмах.

Оценки амплитуд гармоник $S_{\text{Re}}(\nu)$,



$S_{lm}(v)$, или спектральной плотности, периодограммы $I(v)$ по соответствующему участку РТСП получают с помощью дискретного аналога классического преобразования Фурье.

Для абстрактной неограниченной реализации траектории случайного процесса с непрерывным временем это преобразование может быть записано как

$$S(v) = \int_{-\infty}^{\infty} X(t)e^{ivt} dt.$$

Этот оператор применим к траекториям, удовлетворяющим условию Дирихле, т. е.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |X(t)| dt < \infty.$$

Для дискретной конечной случайной последовательности (именно в такой форме РТСП нам доступны для анализа) оператор записывают в следующем виде:

$$S(v) = \frac{1}{N+1} \sum_{t=0}^N X(t)e^{ivt};$$

$$I(v) = \frac{1}{N+1} \left| \sum_{t=0}^N X(t)e^{ivt} \right|^2, \quad (2)$$

где $(N+1)$ — длина реализации $X(t)$; v , Гц — частота гармоники.

Фактически мы анализируем трехмерный СП $X^{ind}(t)$, где

$$ind \in \{BFVl, BFVr, BP\},$$

а семантика верхних индексов следующая: $BFVl$, $BFVr$ — линейные скорости кровотока (ЛСК), регистрируемые левым (l) и правым (r) датчиками; BP — системное артериальное давление (САД), регистрируемое на периферии артериальной системы (*A. digitalis*). Чтобы не вводить читателя в заблуждение, сразу заметим, что прилагательное «линейные» — дань традиции, которая сложилась в литературе на русском языке, посвященной этой проблематике.

При этом $X^{ind}(t)$ — РТСП с дискретным временем $t \in Z_+$ ($Z_+ = 0, 1, 2, \dots$) и дискретным числом состояний. В то же время t — порядковый номер элемента РТСП, соответствующий моменту времени, который равен частному от деления величины t на частоту дискретизации АЦП по одному ка-

налу (т. е. делитель может изменяться от сеанса к сеансу в диапазоне 125 — 12500 точек в секунду).

Предполагаем, что в пределах каждой РТСП можно последовательно выделить участки квазистационарности этого СП:

$$p_j^{ind} : \bigcup_j p_j^{ind} = X^{ind}(t), p_j^{ind} = \{X^{ind}(t) : t \in [t(p_j^{ind}), t(p_j^{ind}) + T]\}, \quad (3)$$

где T — длина каждого из таких участков; $t(p_j^{ind})$ — смещение начала участка p_j^{ind} по отношению к началу $X^{ind}(t)$.

Другими словами, мы допускаем, что для участка p_j^{ind} длины T может быть построено каноническое спектральное представление и оценка этого спектра доставляет нам искомую информацию о структуре СП $X^{ind}(t)$ на участке p_j^{ind} .

Оценивание чаще всего осуществляется с помощью оператора дискретного преобразования Фурье непосредственно к значениям $X^{ind}(t)$, принадлежащим этому участку p_j^{ind} :

$$p_j^{ind} S^{ind}(v) = \frac{1}{T} \sum_{t \in [t(p_j^{ind}), t(p_j^{ind}) + T - 1]} X^{ind}(t)e^{ivt}; \quad (4)$$

$$I_{p_j^{ind}}^{ind}(v) = \frac{1}{T} \left| \sum_{t \in [t(p_j^{ind}), t(p_j^{ind}) + T - 1]} X^{ind}(t)e^{ivt} \right|^2.$$

Альтернативную оценку спектра можно построить на основе оценки ковариационной функции СП:

$$p_j^{ind} S^{ind}(v) = \frac{1}{T} \sum_{\tau \in [t(p_j^{ind}), t(p_j^{ind}) + T - 1]} K_{p_j^{ind}}(\tau)e^{iv\tau}. \quad (5)$$

Алгоритмы вычисления оценки (5) — более затратные в вычислительном отношении, чем оценки (4). Библиотека FFTW [4] с открытым исходным кодом, наиболее часто используемая в современных пакетах для вычислений (она же используется и в нашем программном комплексе), обеспечивает получение оценки спектра как $O(T \cdot \log_2(T))$. Оценка же ковариационной функции $K(\tau)$ (см. нижний график на рис. 3) дополнительно потребует затрат порядка $O(T^2)$.

Неустойчивость оценок $p_j^{ind} S^{ind}(v)$, получаемых по формулам (4) или (5) (их не-

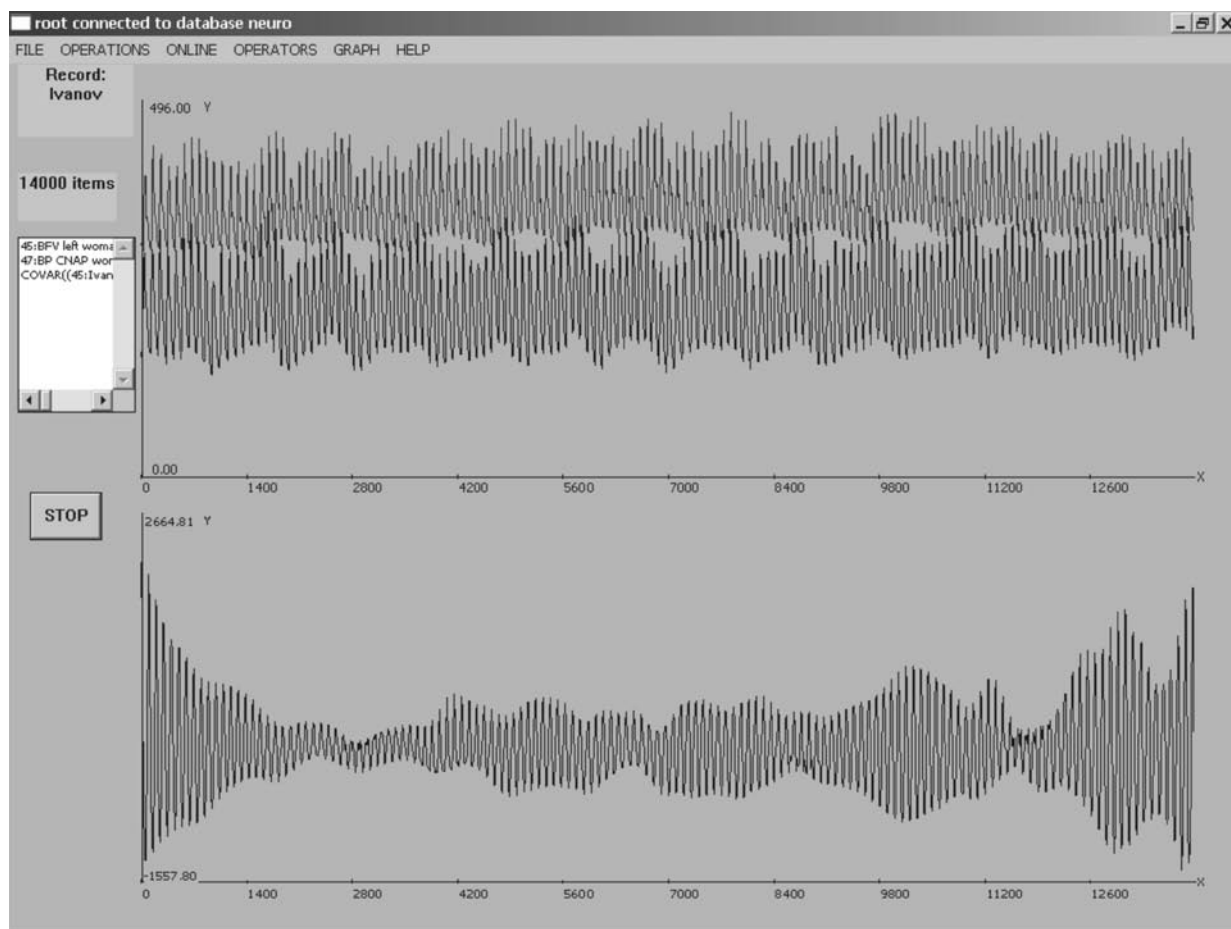


Рис. 3. Пример визуализации исходных (верхние графики) и производного (нижний) наборов данных в режиме реального времени на основе векторной графики платформы WIntel: два верхних графика – траектории зарегистрированных сигналов (см. рис. 2); внизу – оценка взаимной ковариационной функции ЛСК и САД

состоятельность), – основная причина, по которой прибегают к дополнительным операторам осреднения. Эта операция выполняется на системе конечных подмножеств анализируемого участка p_j^{ind} ; либо к оценкам, полученным с помощью формул (4) или (5), применяют интегральное преобразование – локальное сжимающее отображение в форме так называемого спектрального окна. Выбор интегрального ядра такого преобразования оценки спектра представляет собой самостоятельную задачу многокритериальной оптимизации и выходит за рамки данной работы.

Далее, говоря об осреднении оценки спектра $p_j^{ind} S^{ind}(v)$, или периодограммы $I_{p_j^{ind}}^{ind}(v)$, мы подразумеваем, что это преоб-

разование построено на основе непараметрического метода Уэлча [5].

Дисперсия оценок $p_j^{ind} S^{ind}(v)$, $I_{p_j^{ind}}^{ind}(v)$ понижается путем их осреднения по множеству L^j непересекающихся подмножеств $L_k^j \in L^j$ анализируемого участка p_j^{ind} . Мы не снабжаем их ссылкой (дополнительным индексом) на исходную РТСП, поскольку подмножества $L_k^j \in L^j$ представляют собой локальные вспомогательные построения и имеют смысл только в ходе обработки данных конкретного участка p_j^{ind} .

В задачах, где представляется возможность построить множества L^j разбиением участка p_j^{ind} на взаимно непересекающиеся подмножества равной мощности таким образом, что для



$$\forall L_k^j \in L \quad |L_k^j| = T / l$$

(здесь $|...|$ — мощность множества), выполняются следующие условия:

$$\forall k : 1 \leq k \leq l, L_k^j = \{X^{ind}(t) : t(p_j^{ind}) + [T / l] \cdot (k - 1) \leq t < t(p_j^{ind}) + [T / l] \cdot k\}, \quad (6)$$

где $[...]$ — операция взятия целой части от частного.

Для системы непересекающихся подмножеств $L_k^j \in L$ выполняются следующие условия:

$$\forall k_1, k_2 : 1 \leq k_1, k_2 \leq l, k_1 \neq k_2, \\ L_{k_1}^j \cap L_{k_2}^j = \emptyset, \bigcup_k L_k^j = p_j^{ind}. \quad (5)$$

Неизбежной платой за оценку $p_j^{ind} S^{ind}(v)$, $I_{p_j^{ind}}^{ind}(v)$ с меньшей дисперсией будет понижение ее разрешающей способности.

Во многих прикладных исследованиях структуры СП, для которого выбрать достаточно протяженный квазистационарный участок p_j^{ind} не представляется возможным (исследуют переходные процессы со сравнительно малым характерным временем), оценки осредняют по семейству пересекающихся подмножеств L^j :

$$|L^j| = (l - 1)m + 1;$$

$$\forall k : 1 \leq k \leq (l - 1)m + 1, L_k^j = \\ = \{X^{ind}(t) : t(p_j^{ind}) + [T / (lm)] \times \\ \times (k - 1) \leq t < t(p_j^{ind}) + [T / (lm)] \cdot k\}. \quad (8)$$

Для таких $L_k^j \in L$

$$\forall k_1, k_2 : 1 \leq k_1, k_2 \leq (l - 1)m + 1, \\ |k_1 - k_2| < m, L_{k_1}^j \cap L_{k_2}^j \neq \emptyset, \bigcup_k L_k^j = p_j^{ind}. \quad (9)$$

Мощность пересечения двух смежных подмножеств $L_{k_1}^j, L_{k_1+1}^j$ в соотношениях (9) обычно выбирают в размере 50 %, т. е. $m = 2$.

В данной работе мы приводим результаты, полученные и при больших значениях m , т. е. когда мощности пересечения двух смежных подмножеств составляют 75,0 и 87,5 %. Мотивация таких условий исследования связана с ограничением сверху на длительность всего сеанса обследования пациента, в ходе которого переходные про-

цессы в системе авторегуляции протекают сравнительно быстро, но проявляют себя преимущественно на очень низких частотах.

Следует заметить, что теория непараметрического оценивания спектров осреднением по семейству пересекающихся подмножеств традиционно развивается в направлении асимптотических оценок [6]. В прикладных исследованиях гарантированное асимптотическое поведение оценок служит лишь основанием полагать, что выбранная методика имеет смысл в контексте конкретного обследования. Однако уверенности в правильности этого выбора может прибавить только конкретный результат, конкретные оценки, интерпретируемые специалистами предметной области.

В нашей работе, кроме оценок спектра каждой из трех составляющих процесса $X^{ind}(t)$, были также построены оценки их кросс-спектров $p_j^{1,3} S^{1,3}(v)$, $p_j^{2,3} S^{2,3}(v)$:

$$p_j^{1,3} S^{1,3}(v) = \frac{1}{T} \sum_{\tau \in [t(p_j^{1,3}), t(p_j^{1,3}) + T - 1]} K_{X^{ind1}, X^{ind3}}(\tau) e^{iv\tau}; \quad (10) \\ p_j^{2,3} S^{2,3}(v) = \frac{1}{T} \sum_{\tau \in [t(p_j^{2,3}), t(p_j^{2,3}) + T - 1]} K_{X^{ind2}, X^{ind3}}(\tau) e^{iv\tau},$$

где семантика верхних индексов следующая:

1, ind1, 2, ind2 — скорости (ЛСК), регистрируемые левым и правым датчиками, соответственно; 3, ind3 — давление (САД), регистрируемое на периферии артериальной системы (*A. digitalis*).

Соответственно, $K_{X^{ind1}, X^{ind3}}(\tau)$ — взаимная ковариационная функция линейной скорости кровотока, регистрируемой левым датчиком, и системного артериального давления; $K_{X^{ind2}, X^{ind3}}(\tau)$ — такая же взаимная ковариационная функция ЛСК, но регистрируемой правым датчиком, и САД.

Операторы для обработки наборов данных в режиме реального времени, которые реализованы в текущей версии программного комплекса, представлены в таблице.

Результаты и их обсуждение

Разработанный программный комплекс был установлен в лаборатории НИИ ней-

Таблица

**Операторы для обработки данных в режиме реального времени,
реализованные в текущей версии программного комплекса**

Оператор	Алгоритм/Оценка	Особенность реализации / аргумента(ов)
<i>Унарные операторы</i>		
FFT	Дискретное преобразование Фурье	Библиотека с открытым кодом FFTw MIT
Spectrum Density	Оценка спектральной плотности	Результаты дискретного преобразования Фурье
M-wave	Оценка инфразвуковой компоненты, именуемой волнами Майера (диапазон 0,08 – 0,15 Гц)	Зарегистрированная часть РТСП
B-wave	Та же для B-волн (диапазон 0,008–0,050 Гц)	Та же
<i>Бинарные операторы</i>		
Correlation	Оценка коэффициента корреляции	Два участка РТСП либо зарегистрированные РТ двух СП
Covariance	Оценка ковариации	Та же

рохирургии им. проф. А.Л. Поленова, руководимой проф. В.Б. Семенютиным. В ходе тестирования этого программного комплекса на пациентах клиники и волонтерах были получены предварительные оценки как производительности системы, так и возможностей, предоставляемых исследователям с ее помощью.

В опубликованных к настоящему времени работах длина участков квазистационарности в регистрируемых РТСП изменяется от нескольких десятков до нескольких сотен секунд. Очевидным является условие кратности этой длины периоду гармоник, которая представляет первостепенный интерес в конкретном исследовании. Чтобы оценить амплитуды гармоник, которые атрибутируются как M-волна, указанная длина должна быть кратной 10 с. Для исследования B-волн эта длина должна быть существенно больше. Выбор участков p_j^{ind} длиной в $T = 25\,000$ точек (это соответствует 200 с, поскольку частота дискретизации АЦП задавалась равной 1 кГц и соответствовала 125 точкам/с по одному каналу) был сделан в результате обсуждения усло-

вий проведения сеанса с нейрохирургами. Столь протяженный участок был необходимым условием применимости нашей модификации алгоритма непараметрического усреднения (в противном случае полученные оценки могли быть несостоятельными). Кроме того, он позволял проверить гипотезу о квазистационарности РТСП. Нейрохирурги также считали, что участок в 200 с — достаточно протяженный для того, чтобы построить статистически состоятельные оценки, и достаточно короткий для того, чтобы проводить исследования нестационарных эффектов (переходные процессы, возникающие при проведении различного рода тестов).

Изложенные далее оценки и обсуждение результатов относятся к частотному диапазону 0,08 – 0,15 Гц. По мнению специалистов, именно в этом диапазоне наиболее отчетливо проявляют себя механизмы авторегуляции в форме M-волн. Оценки получали на каждой секунде сеанса обследования пациента. Участок длины T каждую секунду смещался на 125 точек вправо (согласно вышеуказанной частоте дискретиза-



ции АЦП по одному каналу). Тем самым он составлял последние 25 000 точек зарегистрированной РТСП для каждой секунды сеанса, начиная с 200-й секунды. Оценки амплитуд гармоник $S_{Re}(v), S_{Im}(v)$, а также периодограмму $I(v)$ получали для всего участка; кроме того, получали оценки путем осреднения по $l = |L^j|$ пересекающимся подмножествам (см. соотношения (8) и (9)) длины в 10 000 точек, или 80 с

$$(\forall k : 1 \leq k \leq l, |L_k^j| = 10000).$$

Мощность множества пересечения двух смежных подмножеств, согласно соотношениям

$$q : \forall k_1, k_2 : 1 \leq k_1, k_2 \leq (l-1)m+1, |k_1 - k_2| = 1, L_{k_1}^j \cap L_{k_2}^j = q, q \in \{8750, 7500, 5000\},$$

— это еще один параметр алгоритма оценивания. Его выбирали равным 8750, 7500 и 5000 точек (70, 60 и 40 с соответственно).

Таким образом, путем осреднения мы получали три оценки амплитуды гармоник или квадрата ее амплитуды для соответствующих трех вариантов мощности q множества пересечения двух смежных подмножеств. Этот подход позволял сравнивать качество эмпирических осредненных оценок (их первые и вторые моментные функции).

Предварительные исследования были проведены на здоровых волонтерах. Затем клинические испытания продолжались на пациентах клиники НИИ нейрохирургии, которым были поставлены диагнозы, связанные с нарушениями мозгового кровообращения. Сеансы проводили при следующих (одинаковых для всех) условиях: в одно и то же время суток (обычно около полудня), спустя два часа после приема пищи; обследуемые находились в супинационном положении (лежа на спине). Первые 400 с пациенты находились в состоянии полного покоя, поэтому измерения их не беспокоили, а в следующие 400 с на них выполняли гипоканническую пробу (гипервентиляция легких, при которой исследуют реакцию кровообращения пациента на пониженный уровень углекислоты в крови). Такая проба была выбрана вместо гиперканнической (последняя делается для проверки резервов

мозгового кровообращения), чтобы условия обследования были более физиологичны.

Эксперименты ставили целью ответить на следующие вопросы:

во-первых, всегда ли существуют «в норме» M -волны в спектре ЛСК, САД;

во-вторых, если M -волны обнаруживаются в этих спектрах «в норме», то в какой мере они себя проявляют;

в-третьих, как ведут себя M -гармоники при проведении теста на гипоканнию в ходе сеанса обследования здорового волонтера.

Разумеется, при этом нас интересовало, насколько способны наша методика и наш программный комплекс решить данные вопросы.

В связи с поставленной целью предполагалось получить оценки первой и второй моментных функций вещественной части амплитуд M -гармоник $S_{Re}(v)$ и, аналогично, периодограммы $I(v)$ в частотном диапазоне M -волн. Другими словами, в этой работе критерии построения решающего правила были сформулированы на основе оценок математического ожидания

$$E(S_{Re}^{ind}(v)), (E(S_{Re}^{ind}(v))^2 - (E(S_{Re}^{ind}(v)))^2)^{1/2} \quad (11)$$

(стандартные отклонения оценок) для гармоник, которая вносит наибольший вклад в спектральную плотность в диапазоне 0,08 — 0,15 Гц. Выход этой оценки математического ожидания в конкретный момент времени за границы доверительного интервала, определяемого оценками стандартных отклонений, которые были получены на предшествующем этому моменту участке РТСП, интерпретировался как момент появления M -волны.

Следует отметить, что это не единственно возможный критерий построения решающего правила и, соответственно, статистики. Данная проблема требует дополнительных исследований.

В результате эксперимента оказалось, что в нормальном состоянии M -волны хотя и обнаруживаются у здоровых людей, но само их появление, а также степень их проявления во многом зависят от психосоматического состояния конкретной личности в процессе сеанса. На рис. 4 и 5 представлены довольно типичные для здоровых лю-

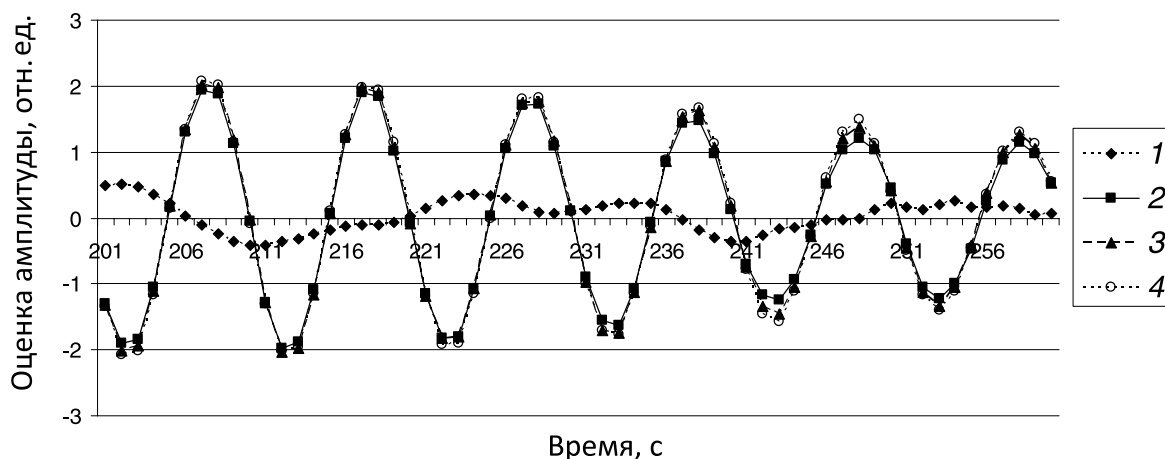


Рис. 4. Результаты обследования здоровых волонтеров – оценки в режиме реального времени вещественной части амплитуды гармоники M -волны $S_{\text{Re}}^{\text{ind}}(v)$ (см. формулу (4));
1 – оценка по всему участку p_j^{ind} (без применения оператора непараметрического усреднения);
(2 – 4) – усредненные оценки по множеству пересекающихся подмножеств при $l = |L_j| = 10\,000$ и различных значениях q : 5 000 (2), 7 500 (3), 8 750 (4)

дей оценки средней амплитуды M -волны $S_{\text{Re}}^{\text{ind}}(v)$ и соответственно стандартных отклонений – корня квадратного из разности второй моментной функции и квадрата первой моментной функции (см. формулы (11)).

Эти данные получены для гармоники, которая вносит наибольший вклад в спектральную плотность в диапазоне 0,08 – 0,15 Гц; результаты получены в режиме реального времени.

На рис. 6 даны оценки на основе периодограммы $I(v)$ в том же частотном диапазоне и при тех же условиях.

Таким образом, для здоровых людей оценки соизмеримы, и нельзя с полной уверенностью утверждать, что M -волна действительно присутствует в структуре этих СП.

Тест на гипотезу со здоровыми волонтерами показал, что и в условиях, ког-

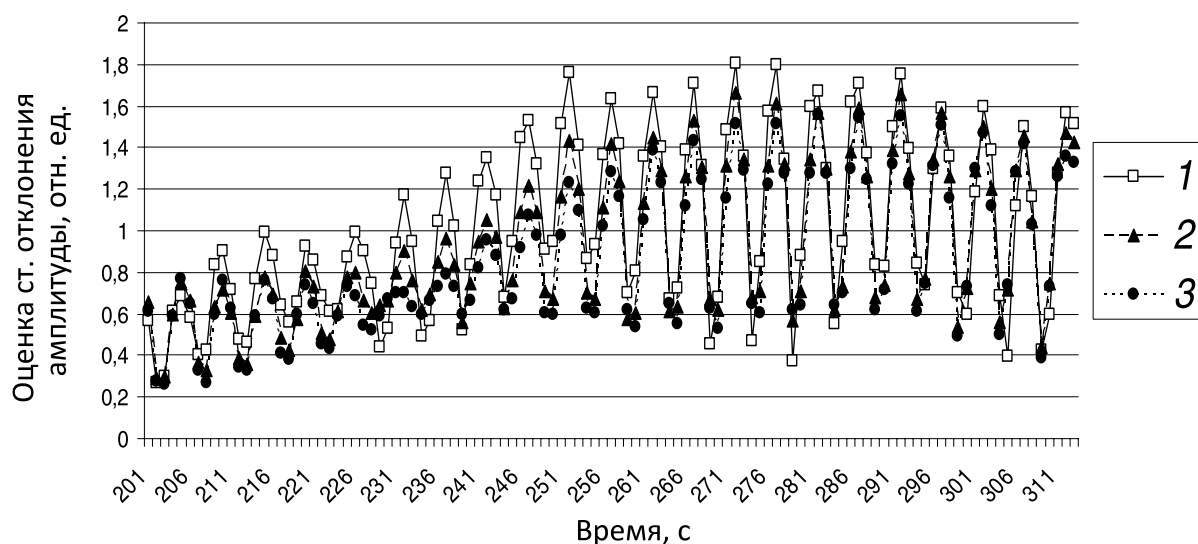


Рис. 5. Результаты обследования здоровых волонтеров – оценки в режиме реального времени стандартного отклонения амплитуды $S_{\text{Re}}^{\text{ind}}(v)$;
(1 – 3) – усредненные оценки по множеству пересекающихся подмножеств при $l = |L_j| = 10\,000$ и различных значениях q : 5 000 (1), 7 500 (2), 8 750 (3)

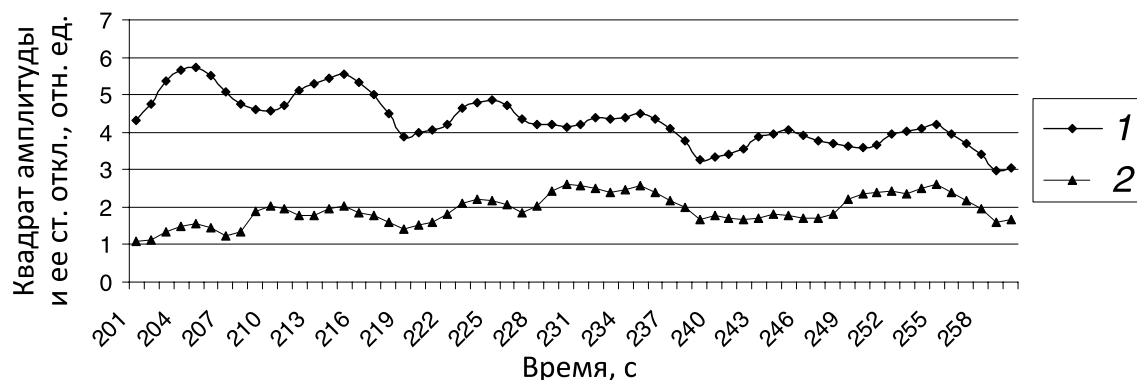


Рис. 6. Результаты обследования здоровых волонтеров – усредненные оценки квадрата амплитуды (1) и ее стандартного отклонения (2) для гармоника M -волны в режиме реального времени; $l = |L_j| = 10\,000$ и $q = 7\,500$

да M -волна с определенной долей вероятности может проявить себя как следствие включения дилататорных механизмов при снижении концентрации углекислого газа в крови, она регистрируется далеко не у каждого обследованного.

Полученные результаты позволяют сделать важный вывод: в ходе обследования с использованием нашего программного комплекса возникает принципиальная возможность исследовать индивидуальные реакции организма на длительность и степень воздействия (изменение парциального давления углекислого газа в крови) на систему кровообращения.

Дальнейшие исследования, как уже отмечалось, были проведены на пациентах клиники НИИ нейрохирургии им. проф. А.Л. Поленова. Оценки спектра в частотном диапазоне M -волн, полученные в ходе сеансов обследования пациентов (рис. 7 и 8), позволяют утверждать, что M -волны проявляют себя в ходе проведения различных тестов уже в первые 10 – 120 с после момента его начала (скорость реакции индивидуальна), хотя в состоянии покоя обнаруживаются далеко не всегда. Отметим, столь быстрая идентификация M -волны в этих случаях оказалась возможной благодаря тому обстоятельству, что сеансу, в

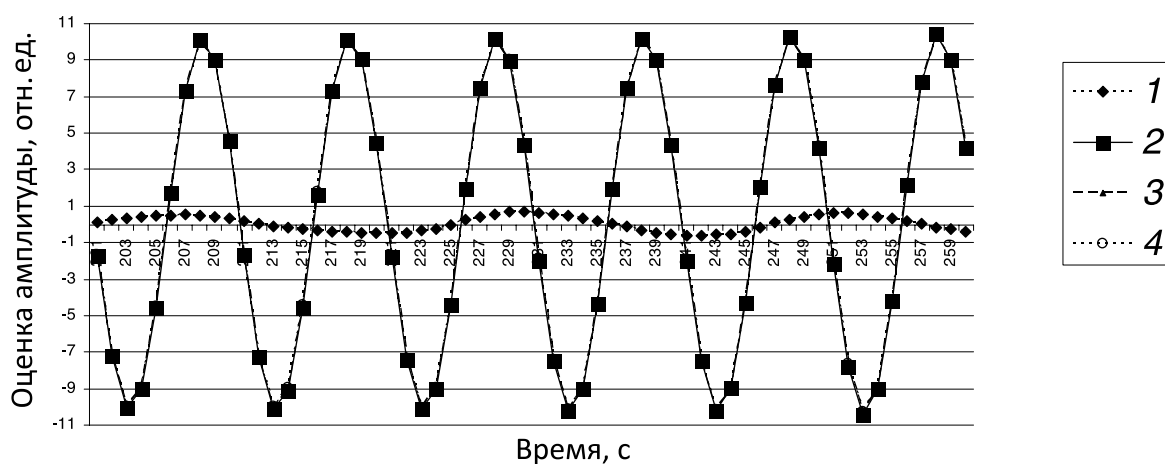


Рис. 7. Результаты обследования пациента с диагностируемой патологией – аналог данных, полученных для здорового человека (см. рис. 4).

Кривые 2, 3, 4 в данном случае практически совпали.

Сравнение с рис. 4 показывает возможность регистрации индивидуальной реакции организма на такие же воздействия на систему кровообращения

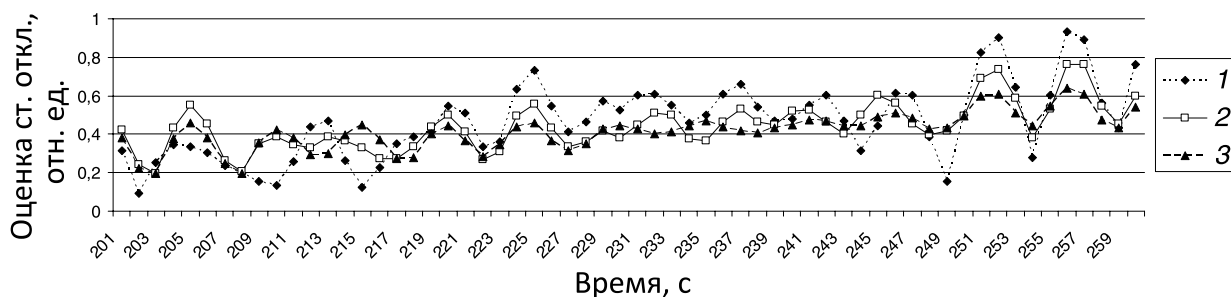


Рис. 8. Результаты обследования пациента с диагностируемой патологией — аналог данных, приведенных на рис. 5 (сравнение с рис. 5 также показывает возможность регистрации индивидуальной реакции организма на воздействия на систему кровообращения)

котором обследуемый подвергался тестированию, непосредственно предшествовал сеанс, где этот обследуемый в течение 400 с находился в состоянии полного покоя.

Оценки и их стандартные отклонения на рис. 7 и 8 приведены для гармоник, которая вносит наибольший вклад в спектральную плотность в диапазоне 0,08 — 0,15 Гц. Исходные данные и оценки получены в режиме реального времени. У обследуемого пациента контролировали дыхание (индуцировали гипокапнию).

Рис. 9 дает представление о видах одного и того же участка спектров, которые регистрировались через каждые 4 с в ходе двух сеансов обследования: когда пациент находился в состоянии покоя и когда у него была индуцирована гипокапния. Статистическая значимость различий в состоятельных оценках математических ожиданий амплитуд очевидна.

Асимптотическая нормальность оценок амплитуд гармоник в инфранизком частотном диапазоне

В ходе сеансов обследования мы дополнительно изучали оценки, которые получали осреднением по пересекающимся подмножествам (см. формулы (8) и (9)) окна видимости в 10 000 точек (80 с).

В частности, при $q = 8750$ мы регистрировали каждую секунду 200 выборок объемом в 13 элементов с оценками амплитуд первых 200 гармоник (диапазон инфранизких частот). При $q = 7500$ мы увеличили длину T участков p_j^{ind} (см. формулу (3)) до 27 500 точек (220 с) и регистрировали каж-

дую секунду то же число выборок объемом в 8 элементов с такими же оценками амплитуд (тот же диапазон). Каждая из указанных выборок в ходе сеанса служила для получения осредненной оценки $E(S_{Re}^{ind}(v))$. Мы дополнительно реализовали проверку статистической гипотезы (H_0) о нормальности отклонений элементов каждой выборки относительно их среднего $E(S_{Re}^{ind}(v))$.

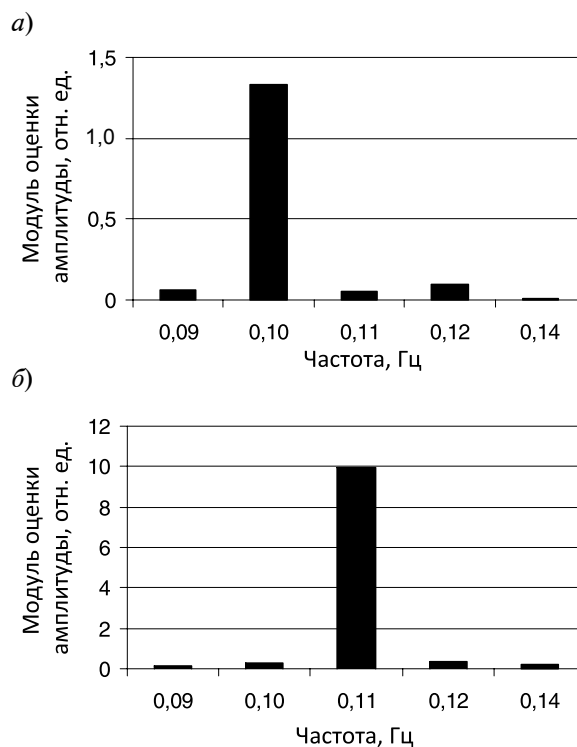


Рис. 9. Оценки вещественной части модуля амплитуды гармоник в диапазоне 0,08 — 0,15 Гц на 404-х секундах сеанса, когда пациент находился в состоянии покоя (а) и когда у него была индуцирована гипокапния (б)



Для проверки Н0 вычислялась статистика Шапиро – Уилка [7]. Выбор в данном случае был безальтернативным, поскольку такой критерий – наиболее мощный при столь малых объемах выборок. Нижняя граница объема выборки, при котором рекомендуется использовать эту статистику, равна восьми. Именно по этой причине мы и увеличили длину T участков p_j^{ind} до 27500 точек при $q = 7500$.

В результате проверки Н0 установлено, что в среднем по всем выборкам в инфранизком диапазоне (для 200 первых гармоник) нулевая гипотеза отвергается лишь в 25 % случаев при уровне значимости 0,05 и в 10 % при уровне значимости 0,01.

Заключение

Мы полагаем, что разработанный нами комплекс программ для изучения механизмов авторегуляции мозгового кровообращения позволяет кардинально расширить круг исследований. В отличие от коммерческого ПО, обеспечивавшего специалистов исходной информацией *a posteriori*, теперь возникает возможность осуществлять анализ количественных характеристик наблюдаемых процессов в режиме реального времени.

Мы полагаем, что наше ПО позволяет решать наиболее актуальные задачи из перечисленных международной группой ученых в области церебральной гемодинамики [8, 9].

В частности, это инструмент для проведения целого ряда научных исследований:

анализа РТСП на предмет построения адекватных этим процессам математических моделей и решающих правил (на основе та-

ких моделей), которые можно было бы использовать в клинической практике;

разработки алгоритмов для анализа РТСП, регистрируемых в клинических условиях, в частности обоснование критериев выбора оптимальных значений параметров в программных реализациях таких алгоритмов;

разработки методик, позволяющих изучать *in situ* системы регуляции мозгового кровообращения.

Благодарности

Автор статьи выражает благодарность сразу нескольким своим коллегам.

В первую очередь я благодарю доктора биологических наук, профессора-патолофизиолога В.Б. Семенютина за предоставленную возможность участвовать в инициативной научно-исследовательской работе, которая проводилась в течение полтора лет без какого-либо финансирования со стороны учреждений, организаций или физических лиц.

Автор также выражает свою глубокую признательность Д.С. Елисееву за неоценимую помощь в реализации интерфейса программного комплекса с СУБД, отвечающего всем функциональным требованиям, которые предъявляются в настоящее время к производительности системы в целом.

Я благодарю также Ю.В. Крылова, который внес свой вклад в реализацию графического интерфейса приложения-клиента.

Я благодарю также А.В. Кутузова за помощь по тестированию программного кода клиента, локализации и исправлению ошибок.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семенютин В.Б., Алиев В.А., Берснев В.П., Патцак А., Козлов А.В., Пак В.А. Оценка состояния мозгового кровообращения с помощью кросс-спектрального анализа спонтанных колебаний системной и церебральной гемодинамики // Нейрохирургия. 2008. № 1. С. 48–57.
2. Smielewski P., Lavinio A., Timofeev I., Radolovich D., Perkes I., Pickard J.D., Czosnyka M. ICM+, a flexible platform for investigation of cerebrospinal dynamics in clinical practice. *Acta Neurochirurgica Supplementum*. 2008. Vol. 102.

Рр. 145-151.

3. Шаблон проектирования Model-View-Controller. Режим доступа: <http://ru.wikipedia.org/wiki/Model-View-Controller>. Дата обращения: 2014-01-01.

4. FFTw Home Page. Режим доступа: <http://www.fftw.org>. Дата обращения: 2013-05-01.

5. Welch P.D. The use of FFT for the estimation of power spectra. *IEEE Trans. Electroacoust.* 1967. Vol. 15. No. 2. pp. 70-73.

6. Мирская Е.И. Применение метода Уэлча для построения состоятельных оценок спек-

тральных плотностей многомерных временных рядов. Автореферат дис. ... канд. физ.-мат. наук. Минск: БГУ, 1997. 17 с.

7. Shapiro S.S., Wilk M.B. An analysis of variance test for normality (complete samples). *Biometrika*. 1965, Vol. 52, No. 3-4, pp. 591-611.

8. The 3rd Cerebral Autoregulation network meeting. Available at <http://www.neurosonology2013.pt/abstracts-online.htm>.

9. Meel-van den Abeelen A.S.S., Simpson D.M., Wang L.J.Y., Slump C.H., Zhang R.,

Tarumi T., Rickards C.A., Payne S., Mitsis G.D., Kostoglou K., Marmarelis V., Shin D., Tzeng Yu., Ainslie Ph.N., Gommer E., Muller M., Dorado A.C., Smielewski P., Yelicich B., Puppo C., Liu X., Czosnyka M., Wang Ch., Novak V., Panerai R.B., Claassen J.A.H.R. Between-centre variability in transfer function analysis, a widely used method for linear quantification of the dynamic pressure-flow relation: The CARNet study. *Med. Eng. Phys.* 2014. Available at: <http://dx.doi.org/10.1016/j.medengphy.2014.02.002>

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ИВАНКОВ Алексей Александрович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

Ivankov A.A. THE SOFTWARE SYSTEM FOR REAL-TIME INVESTIGATION OF AUTOCONTROL MECHANISMS OF TRANSCRANIAL BLOOD CIRCULATION.

The paper presents architecture and details of software implementation of a client-server system developed to investigate the hemodynamics in the brain in real-time mode. That is our own implementation of distributed registering, recording, an analysis of blood flow velocity (BFV), arterial blood pressure (BP). Input signals (BFV, BP) are treated as quasiperiodic stochastic processes. The analysis is performed by spectral methods of stochastic processes theory. FFT algorithm is in use to get spectra estimates. Modified Welch estimator is applied to evaluate consistent estimates of harmonics amplitudes. GUI is implemented in client software to display input signals and their estimates. The results of the software clinical testing in which course we studied the *M*-wave phenomenon are given.

CLIENT-SERVER ARCHITECTURE, GUI, HEMODYNAMICS INVESTIGATION, *M*-WAVE, ADAPTATION OF NON-PARAMETRIC WELCH METHOD, CONSISTENT ESTIMATE OF SPECTRA.

REFERENCES

1. Semenyutin V.B., Aliev V.A., Bersnev V.P., Pattsak A., Kozlov A.V., Pak V.A. Otsenka sostoyaniya mozgovogo krovoobrashcheniya s pomoshch'yu kross-spektral'nogo analiza spontannykh kolebanij sistemnoj i tserebral'noj gemodinamiki. *The Russian Journal of Neurosurgery*, 2008, No. 1, pp. 48-57. (rus).

2. Smielewski P., Lavinio A., Timofeev I., Radolovich D., Perkes I., Pickard J.D., Czosnyka M. ICM+, a flexible platform for investigation of cerebrospinal dynamics in clinical practice. *Acta Neurochir. Suppl*, 2008, No. 102, pp. 145-151.

3. Model-view-controller. Available at: <http://ru.wikipedia.org/wiki/Model-View-Controller>.

4. FFTw Home Page. Available at: <http://www.fftw.org>.

5. Welch P.D. The use of FFT for the estimation of power spectra. *IEEE Trans. Electroacoust*, 1967, Vol. 15, No. 2, pp. 70-73.

6. Mirskaya E.I. *Primenenie metoda Uelcha dlya postroeniya sostoyatel'nykh otsenok spektral'nykh plotnostej mnogomernykh vremennykh ryadov.*

Avtoreferat dis. ... kand. fiz.-mat. nauk. Minsk, BGU, 1997. 17 p. (rus)

7. Shapiro S.S., Wilk M.B. An analysis of variance test for normality (complete samples). *Biometrika*, 1965, Vol. 52, No. 3-4, pp. 591-611.

8. The 3rd Cerebral Autoregulation network meeting. Available at: <http://www.neurosonology2013.pt/abstracts-online.htm>.

9. Meel-van den Abeelen A.S.S., Simpson D.M., Wang L.J.Y., Slump C.H., Zhang R., Tarumi T., Rickards C.A., Payne S., Mitsis G.D., Kostoglou K., Marmarelis V., Shin D., Tzeng Yu., Ainslie Ph.N., Gommer E., Muller M., Dorado A.C., Smielewski P., Yelicich B., Puppo C., Liu X., Czosnyka M., Wang Ch., Novak V., Panerai R.B., Claassen J.A.H.R. Between-centre variability in transfer function analysis, a widely used method for linear quantification of the dynamic pressure-flow relation: The CARNet study. *Med. Eng. Phys.*, 2014. Available at: <http://dx.doi.org/10.1016/j.medengphy.2014.02.002>.

THE AUTHOR

IVANKOV Alexei A.

St. Petersburg State Polytechnical University

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

УДК 57.043

*М.Я. Винниченко¹, А.Н. Софронов¹, Д.А. Фирсов¹,
С.С. Дремов², А.Л. Тер-Мартirosян²*

¹ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

² ЗАО «Полупроводниковые приборы»

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФОТОДИТАЗИНА ДЛЯ РАСШИРЕНИЯ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ

Проведено измерение спектров поглощения фотодитазина, используемого для фотодинамической терапии, с целью уточнения спектрального положения максимумов линий поглощения. Измерены спектры флуоресценции фотодитазина при возбуждении излучением с двумя различными длинами волн, соответствующими максимумам коэффициента поглощения. Сформулированы требования к спектрально-селективным оптическим элементам диагностических систем для фотодинамической терапии, позволяющие увеличить эффективность данного метода.

ФОТОДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕРАПИЯ, ФОТОДИТАЗИН, ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОР, ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ, ДИАГНОСТИКА ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ.

Введение

Ранняя диагностика и лечение злокачественных опухолей, заболеваний кожи, а также некоторых инфекционных заболеваний имеет первостепенное значение. Один из методов, интенсивно развивающихся в последнее время, который уже показал хорошие результаты, это фотодинамическая терапия. Указанный метод основан на способности некоторых светочувствительных препаратов (фотосенсибилизаторов) избирательно накапливаться в пораженных тканях и одновременно взаимодействовать с электромагнитным излучением видимого или ближнего инфракрасного диапазона. Фотосенсибилизатор чаще всего вводится в организм внутривенно, но может применяться аппликационно или перорально. Локальная активация светом фотосенсибилизатора, накопившегося в опухоли, из полосы его поглощения приводит (в присутствии кислорода тканей) к развитию фотохимической реакции, разрушающей опухолевые клетки; и за счет этого достигается лечебный эффект. Данный процесс сопровождается флуоресценцией как препарата, так и кислорода в более длинноволновой (по сравнению с активирующим излучением)

области спектра. Анализ данных флуоресценции позволяет более полно исследовать процесс лечения. Картина пространственного распределения флуоресценции несет информацию о размерах опухоли и концентрации препарата, а ее изменение во времени позволяет извлечь количественные сведения о необходимой дозе облучения. Данный эффект может использоваться не только при лечении, но и при диагностике онкологических заболеваний различных локализаций на ранних стадиях [1, 2].

Достижения последних лет в области полупроводниковой оптоэлектроники делают метод фотодинамической терапии доступным для широкого использования в медицинских учреждениях благодаря разработке недорогих компактных мощных источников лазерного излучения на основе полупроводниковых лазерных диодов [3].

Наиболее конкурентоспособными фотосенсибилизирующими препаратами по совокупности своих медико-биологических и оптико-физических свойств являются фотосенсибилизаторы на основе производных хлорина еб, в частности коммерчески доступный отечественный препарат фотодитазин.



Для контроля дозы облучения и его пространственного распределения необходима система визуализации картины пространственно-временного распределения флуоресценции фотосенсибилизатора. Такая система регистрации оптического излучения должна быть спектрально селективной, т. е. должна регистрировать свет во всей полосе флуоресценции и не реагировать на излучения, возбуждающие флуоресценцию. Элементы подобных систем уже активно разрабатываются (см., например, статью [4]), однако имеется ряд существенных принципиальных трудностей для разработки спектрально-селективной оптики такого типа. Дело в том, что для возбуждения фотохимической реакции с участием фотодитазина используют излучение с высокой степенью монохроматичности на длине волны около 660 нм, совпадающей с одной из линий оптического поглощения препарата. Заметим, что другие фотосенсибилизаторы возбуждаются длинами волн в районе 630 нм и такое излучение проникает в ткани на меньшую глубину. При возбуждении же излучением с длиной волны 660 нм спектральный состав флуоресценции фотодитазина оказывается весьма близким к спектру возбуждающего излучения: флуоресценция сдвинута в длинноволновую область относительно возбуждающего излучения всего на 10 – 20 нм. Использование решеточных или призмённых монохроматоров для спектральной селекции флуоресценции представляется неудобным из-за значительных размеров этих приборов. Решить эту проблему позволяет использование оптических фильтров. Однако малое спектральное расстояние между возбуждающим и испускаемым излучениями налагает крайне жесткие требования к качеству этих селективных оптических приспособлений для диагностических приборов, в частности к крутизне коротковолнового края пропускания таких фильтров. Даже имеющийся небольшой технологический разброс оптических параметров фильтров приводит к существенному ухудшению работы системы: либо к засвечиванию ее фоточувствительного элемента возбуждающим излучением, либо к существенному срезу части спек-

тра полезного излучения флуоресценции и снижению чувствительности системы.

Однако известно, что фотосенсибилизаторы на основе производных хлорина еб имеют ряд линий поглощения с длиной волны меньше 660 нм. Их использование для возбуждения фотохимической реакции потенциально может существенно снизить требования к качеству селективных оптических элементов систем диагностики для фотодинамической терапии. При этом для возбуждения могут использоваться коммерчески доступные полупроводниковые источники излучения, согласованные по спектру с линиями поглощения препаратов.

С другой стороны, сдвиг возбуждающего излучения в коротковолновую область приводит к уменьшению глубины проникновения излучения в ткани и органы человека. Так, излучение с длиной волны 660 нм успешно используется для фотодинамической терапии злокачественных новообразований различных локализаций, как наружных, так и эндогенных. Излучение с более короткой длиной волны в принципе может использоваться только для фотодинамической терапии поверхностных областей тканей, например в стоматологии.

На настоящий момент в известной нам научно-технической литературе отсутствуют данные о спектрах флуоресценции фотосенсибилизаторов на основе производных хлорина еб при возбуждении излучением, согласованным с линиями поглощения препарата в коротковолновой области спектра. Такие данные необходимы для разработки систем диагностики для фотодинамической терапии.

Таким образом, целью настоящей работы являлось изучение спектров оптического поглощения и спектрального состава излучения флуоресценции фотодитазина при возбуждении коротковолновым излучением.

Объекты и методика исследований

В качестве объекта исследований был выбран медицинский препарат фотодитазин, представляющий собой N-диметилглюкаминую соль хлорина еб.

Препарат разводился в 0,9 %-м растворе хлорида натрия. Концентрация препарата в указанном растворе подбиралась для оптимального использования динамического диапазона фотоприемника, регистрирующего излучение, и составляла 0,71 мкл/мл для измерения спектров оптического поглощения и 50 мкл/мл — для спектров флуоресценции. Необходимое количество препарата отбиралось с помощью инсулинового шприца объемом 0,5 мл (цена деления — 10 мкл).

Для измерения спектров пропускания раствор помещали в прямоугольную пластиковую прозрачную кювету объемом 4 мл с длиной внутренней полости вдоль направления распространения света, равной 1 см. Для измерения спектров флуоресценции раствор помещали в кварцевую пробирку.

Схема экспериментальной установки для измерения спектров оптического поглощения представлена на рис. 1. Ее основой служит дифракционный спектрометр 4 (Horiba FHR640) с дифракционной решеткой, имеющей 1200 штрихов/мм, с блеском на 500 нм; она обеспечивает спектральное разрешение не хуже 0,02 нм при ширине входной щели 10 мкм. Фоточувствительным элементом является ПЗС-камера 6 (Horiba Symphony II SII-ILS-256-OE), охлаждаемая жидким азотом, имеющая спектральный диапазон чувствительности 300 — 1000

нм. В качестве источника широкополосного излучения использовалась галогенная лампа 1; ее излучение диафрагмировалось, изображение светящегося отверстия диафрагмы 2 фокусировалось на входной щели спектрометра с помощью собирающей линзы 3.

Кювета 5 с исследуемым раствором устанавливалась непосредственно перед входной щелью спектрометра. Спектры измерялись в автоматическом режиме, спектрометр полностью управлялся персональным компьютером с помощью специального программного обеспечения. Спектр излучения галогенной лампы, прошедшего через кювету с раствором препарата, нормировался после измерения на такой же спектр, но зарегистрированный для кюветы с физиологическим раствором; это обеспечивало получение спектра оптического пропускания препарата.

Экспериментальная установка для измерения спектров флуоресценции схематично представлена на рис. 2.

Измерение спектров производилось на описанном выше спектрометре 4 Horiba FHR640 (см. также рис. 1). Пробирка с раствором препарата 2 размещалась на оптической оси спектрометра (см. рис. 2, а). Лазерное излучение для возбуждения флуоресценции направлялось снизу на пробирку с раствором, при этом формировалась

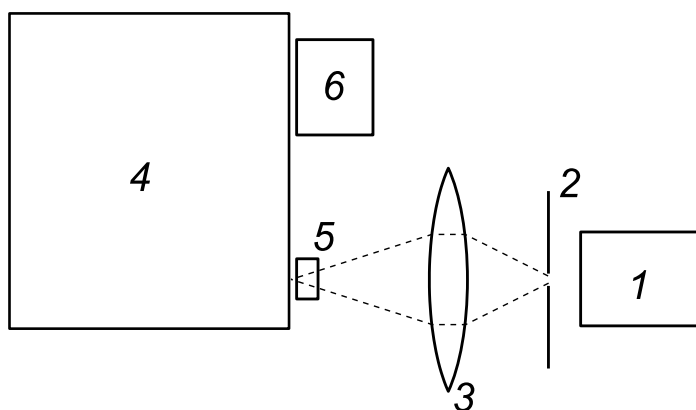


Рис. 1. Блок-схема экспериментальной установки для измерения спектров пропускания (вид сверху):
1 — галогенная лампа, 2 — диафрагма 1 мм, 3 — собирающая линза,
4 — спектрометр Horiba, 5 — кювета с исследуемым раствором,
6 — ПЗС-камера, охлаждаемая жидким азотом

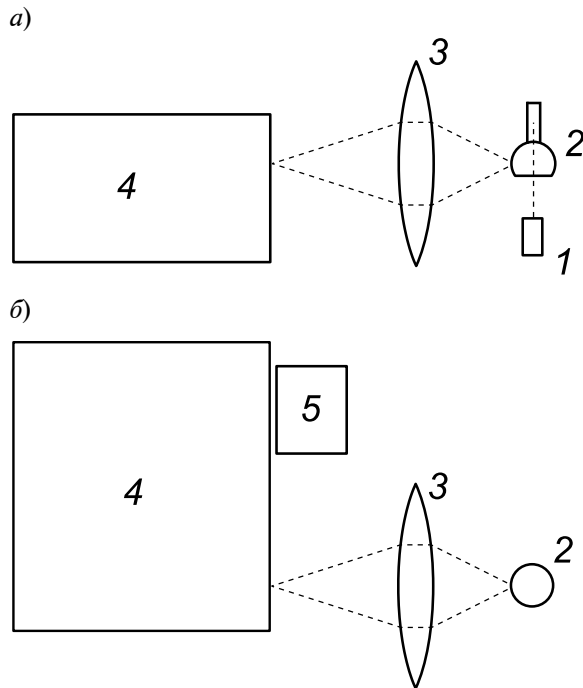


Рис. 2. Блок-схема экспериментальной установки для измерения спектров флуоресценции; виды сбоку (а) и сверху (б): 1 – возбуждающий излучение лазер, 2 – пробирка с исследуемым раствором, 3 – собирающая линза, 4 – спектрометр Nigiba, 5 – ПЗС-камера, охлаждаемая жидким азотом

вертикальная светящаяся полоса внутри пробирки. Изображение светящейся полосы флуоресценции фокусировалось на входной щели спектрометра с помощью собирающей линзы 3.

Для возбуждения флуоресценции использовалось два типа источников излучения 1. Первый – лазерный аппарат Латус-Т [5], длина волны его излучения – 659,6 нм, установленная выходная оптическая мощность – 140 мВт, диаметр пятна на нижней поверхности пробирки – 2 мм, интенсивность возбуждающего излучения – 4,4 Вт/см². Второй – лазерный диод, длина волны его излучения – 406 нм; он питался стабилизированным источником тока 1,3 А, выходная оптическая мощность – 160 мВт, диаметр пятна на нижней поверхности пробирки – 5 мм, интенсивность возбуждающего излучения – 0,8 Вт/см². При этом перед входной щелью спектрометра уста-

навливался фильтр из оптического стекла ЖС12, отсекающий излучение лазера. Для красного света (лазер с длиной волны излучения 659,6 нм) фильтры не использовались. Спектры флуоресценции измерялись в автоматическом режиме с использованием персонального компьютера.

С помощью установки, схема которой приведена на рис. 1, были измерены спектры оптического пропускания исследуемого раствора фотодитазина $I_{\text{фТ}}(\lambda)$ и физиологического раствора $I_{\text{фЗ}}(\lambda)$. Согласно закону Бугера, интенсивность светового пучка, прошедшего через раствор, определяется следующим выражением:

$$I_{\text{фТ}} = I_0 \exp(-\alpha L), \quad (1)$$

где I_0 – интенсивность падающего пучка; L – толщина слоя раствора, пропускающего свет (оптический путь); α – коэффициент поглощения.

Чтобы избавиться от эффектов, не связанных с фотодитазином, в качестве нормировочного спектра I_0 удобно использовать интенсивность $I_{\text{фЗ}}$ и взять логарифм от отношения $I_{\text{фТ}} / I_{\text{фЗ}}$:

$$\ln \left(\frac{I_{\text{фТ}}}{I_{\text{фЗ}}} \right) = \ln(\exp(\alpha L)) = \alpha L. \quad (2)$$

Результаты и их обсуждение

Экспериментально полученный спектр оптического пропускания ($I_{\text{фТ}} / I_{\text{фЗ}}$) фотодитазина представлен на рис. 3. Спектр коэффициента поглощения $\alpha(\lambda)$, рассчитанный по формуле (2), представлен на рис. 4.

Из представленных данных видно, что наблюдаются полосы поглощения фотодитазина с максимумами на длинах волн 653 и 403 нм, а также слабые спектральные особенности в области длин волн 500 и 600 нм. По этим спектрам можно рассчитать коэффициенты удельного поглощения (на единицу концентрации): для света с длиной волны 653 нм он равен 0,62 см⁻¹(мл/л)⁻¹, а с длиной волны 403 нм – 3,34 см⁻¹(мл/л)⁻¹. Таким образом, наблюдается разница значений более чем в пять раз, что говорит о большей эффективности возбуждения флуоресценции излучением с

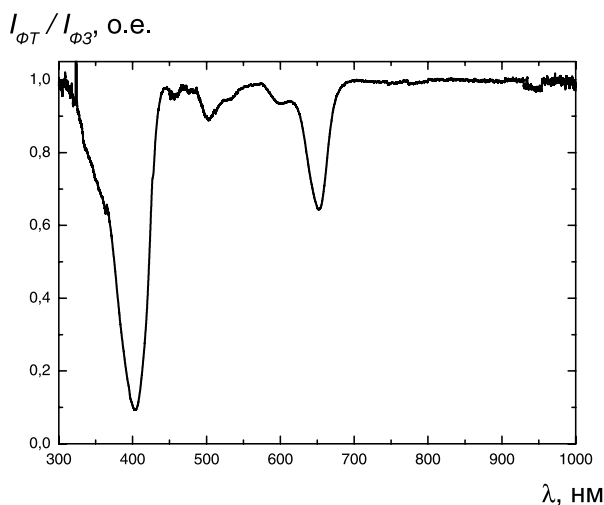


Рис. 3. Спектр оптического пропускания раствора фотодитазина при комнатной температуре; его концентрация – 0,71 мл/л; длина оптического пути в растворе – 1 см

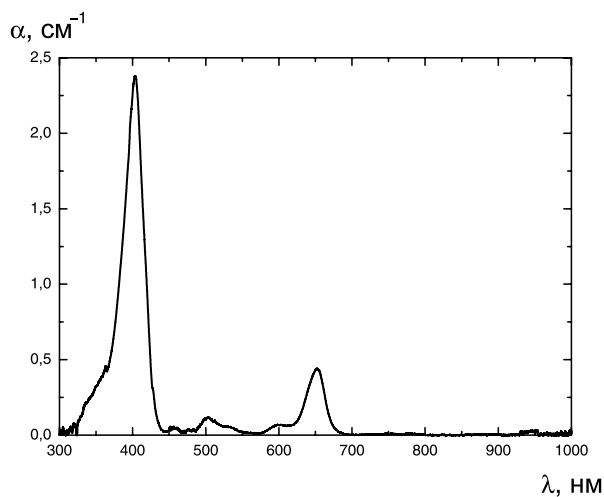


Рис. 4. Спектр оптического поглощения раствора фотодитазина при комнатной температуре; его концентрация – 0,71 мл/л

длиной волны 403 нм. Это может привести к снижению мощности излучения, необходимой для проведения фотодинамической терапии.

Полученное спектральное положение длинноволновой линии поглощения хорошо согласуется с известными литературными данными. Так, по данным работы [6], спектральный максимум поглощения фотодитазина составляет 655 нм для водного

раствора и 662 нм в биологических средах (зависит от растворителя).

С помощью установки, представленной на рис. 2, были измерены спектры флуоресценции при возбуждении излучением с длинами волн 406,0 и 659,6 нм (рис. 5). Видно, что полученные спектры в целом подобны друг другу, однако при возбуждении флуоресценции фиолетовым светом (406,0 нм) появляется дополнительная по-

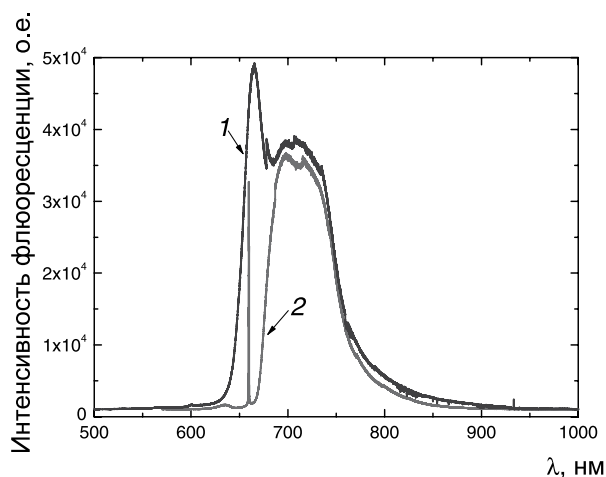


Рис. 5. Спектры флуоресценции раствора фотодитазина при возбуждении излучением с длинами волн 406,0 нм (1) и 659,6 нм (2).

Кривая 2 содержит также линию от рассеянного возбуждающего излучения

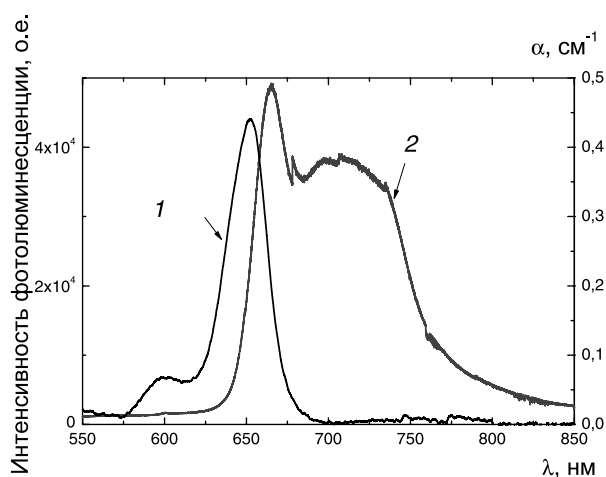


Рис. 6. Спектры коэффициента поглощения (1, правая ось) и флуоресценции при возбуждении излучением с длиной волны 406,0 нм (2, левая ось) раствора фотодитазина при комнатной температуре



лоса излучения с коротковолновой стороны. Возможно, она связана с испусканием света по тому же микроскопическому механизму, с которым связано поглощение света в области длин волн 660 нм. Доводом в пользу этого предположения служит сравнение двух спектров, приведенных на рис. 6. Здесь виден стоксовский сдвиг коротковолновой полосы излучения относительно полосы оптического поглощения 1. Однако анализ микроскопических механизмов формирования спектра флуоресценции препарата выходит за рамки данной статьи.

Практическая значимость полученных результатов

Проведенные эксперименты позволили определить спектральный диапазон чувствительности фоторегистрирующих элементов систем, предназначенных для диагностики злокачественных опухолей методами фотодинамической терапии, а также выработать ряд рекомендаций.

При возбуждении флуоресценции излучением с длиной волны 660 нм необходимо ограничивать засветку возбуждающим излучением фоточувствительного элемента системы диагностики с целью повышения общего контраста итогового флуоресцентного изображения. Спектр флуоресценции по уровню 0,5 от высоты максимума имеет ширину от 677 до 751 нм, а по уровню 0,1 – от 669 до 808 нм. Таким образом, пропускание используемого оптического фильтра должно спадать от единицы до нуля в узкой области длин волн (от 669 до 660 нм), причем крутизна коротковолнового края пропускания должна составлять не менее 1000 нм^{-1} для эффективного подавления лазерного излучения.

На спектрально-селективную оптику при возбуждении флуоресценции излучением с длиной волны 406 нм налагаются гораздо менее жесткие требования. Коротковолновый край спада пропускания оптического фильтра может располагаться в довольно широкой области: от 450 до 600 нм,

причем без существенных ограничений на крутизну спада. Отношение пропускания фильтра на длине волны флуоресценции к пропусканию на длине волны возбуждающего излучения должно быть при этом не менее 100. Общий диапазон чувствительности системы должен лежать в пределах от 520 ± 80 до 900 ± 80 нм.

Заключение

В работе проведено экспериментальное исследование оптических свойств фотодитазина – коммерчески доступного отечественного препарата. Все измерения выполнены при комнатной температуре.

В частности, получен спектр испускания флуоресценции препарата при ее возбуждении коротковолновым излучением. Проведено измерение спектров оптического поглощения фотодитазина, чтобы уточнить положение максимумов линий поглощения. Измерены спектры флуоресценции объекта при возбуждении лазерным излучением на двух различных длинах волн, соответствующих максимуму коэффициента поглощения.

На основе полученных экспериментальных результатов сформулированы требования к спектрально-селективным оптическим элементам диагностических систем, используемых для фотодинамической терапии. Показано, что в случаях, когда нет необходимости вводить излучение в ткани человека на большую глубину, для возбуждения флуоресценции фотосенсибилизаторов на основе хлорина е6 предпочтительнее использовать излучение с длиной волны 406 нм. Данная рекомендация диктуется как возможностью получать более высокие значения коэффициента поглощения, так и простотой спектральной селекции.

Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства Российской Федерации (Минобрнауки России) в рамках реализации комплексного проекта по созданию высокотехнологичного производства (договор № 02.G25.31.0064).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Loschenov V.B., Steiner R. Working out the early diagnostics and controls for the cancer treatment method with the use of photosensitizer of modeling action. *Proceedings of SPIE*. 1994. Vol. 2325. P. 144.
2. Loschenov V.B., Konov V.I., Prokhorov A.M. Photodynamic therapy and fluorescence diagnostics. *Laser Physics*. 2000. Vol. 10. Iss. 5, pp. 1188–1207.
3. Воробьев Л.Е., Софронов А.Н., Фирсов Д.А., Демидов Д.М., Леус Р.В., Свердлов М.А., Тер-Мартirosян А.Л. Лазерные диоды для фотодинамической терапии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2011. № 2 (122). С. 80–84.
4. Анисеева М.С., Софронов А.Н., Дремов С.С., Тер-Мартirosян А.Л. Цифровая система визуализации флуоресценции для фотодинамической терапии // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика. Телекоммуникации. Управление. 2012. № 6 (162). С. 159–164.
5. Лазерный медицинский аппарат для ФДТ серии Латус-Т [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.atcus.ru/application.php?ID=2>.
6. Белый Ю.А., Терещенко А.В., Володин П.Л., Семенов А.Д., Каплан М.А., Пономарев Г.В., Баум Р.Ф. Первые экспериментальные результаты фотодинамической терапии в офтальмологии с использованием отечественного препарата «Фотодитазин» // Вестник ОГУ. Новые технологии микрохирургии глаза. 2004. С. 182–184.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВИННИЧЕНКО Максим Яковлевич — кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
mvin@spbstu.ru

СОФРОНОВ Антон Николаевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sofronov@rphf.spbstu.ru

ФИРСОВ Дмитрий Анатольевич — доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
lvor@rphf.spbstu.ru

ДРЕМОВ Сергей Сергеевич — инженер ЗАО «Полупроводниковые приборы».

194156, Россия, г. Санкт-Петербург, пр. Энгельса, 27, к. 5.
sales@atcsd.ru

ТЕР-МАРТИРОСЯН Александр Леонович — кандидат технических наук, генеральный директор ЗАО «Полупроводниковые приборы».

194156, Россия, г. Санкт-Петербург, пр. Энгельса, 27, к. 5.
sales@atcsd.ru

Vinnichenko M.Ya., Sofronov A.N., Firsov D.A., Dremov S.S., Ter-Martirosyan A.L.
INVESTIGATION OF PHOTODITAZIN OPTICAL PROPERTIES FOR EXPANDING
POSSIBILITIES OF PHOTODYNAMIC THERAPY.

Photodynamic therapy is a promising method for diagnostics and treatment of cancers of varying localization. Photodynamic diagnostic systems are based on fluorescence detection of photosensitizers. One of the much used photosensitizers is photoditazin, but it is characterized by too small fluorescence-absorption spectral separation. This property involves considerable difficulties in spectral selection of fluorescent emission



and exciting laser radiation when working out diagnostic systems.

Optical properties of photoditazin have been studied in this work. The absorption spectra were recorded to refine the spectral positions of line maxima. The efficient fluorescence in the spectral range between 670 and 800 nm was found to be obtainable under radiant excitation with not only conventional wavelength (660 nm) but with 405 nm wavelength as well. If the latter is the case, the spectral selection of exciting radiation and fluorescent emission becomes much simpler. The studies conducted allowed us to determine requirements for spectral optical elements of photodynamic diagnostic systems. The fluorescence excitation with laser radiation at 405 nm wavelength was shown to be available for diagnostic systems with limited depth of light penetration into tissue.

PHOTODYNAMIC THERAPY, PHOTODITAZIN, PHOTSENSITIZER, FLUORESCENCE, PHOTODYNAMIC DIAGNOSTICS.

REFERENCES

1. Loschenov V.B., Steiner R. Working out the early diagnostics and controls for the cancer treatment method with the use of photosensitizer of modeling action. *Proceedings of SPIE*, 1994, Vol. 2325, p. 144.
2. Loschenov V.B., Konov V.I., Prokhorov A.M. Photodynamic therapy and fluorescence diagnostics. *Laser Physics*, 2000, Vol. 10, Iss. 5, pp. 1188-1207.
3. Vorob'ev L.E., Sofronov A.N., Firsov D.A., Demidov D.M., Leus R.V., Sverdlov M.A., Ter-Martirosyan A.L. Lazernye diody dlya fotodinamicheskoy terapii. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2011, No. 2 (122), pp. 80-84. (rus)
4. Anikeeva M.S., Sofronov A.N., Dremov S.S., Ter-Martirosyan A.L. Tsifrovaya sistema vizualizatsii flyuorestsentsii dlya fotodinamicheskoy terapii. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Computer Science. Telecommunication and Control Systems*, 2012, No. 6 (162), pp. 159-164. (rus)
5. Lazernyj meditsinskij apparat dlya FDT serii Latus-T. Available at: <http://www.atcus.ru/application.php?ID=2>.
6. Belyj Yu.A., Tereshchenko A.V., Volodin P.L., Semenov A.D., Kaplan M.A., Ponomarev G.V., Baum R.F. Pervye eksperimental'nye rezul'taty fotodinamicheskoy terapii v oftal'mologii s ispol'zovaniem otechestvennogo preparata «Fotoditazin». *Vestnik OGU. Novye tekhnologii mikrokhirurgii glaza*, 2004, pp. 182-184. (rus)

THE AUTHORS

VINNICHENKO Maxim Ya.

St. Petersburg State Polytechnical University
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
mvin@spbstu.ru

SOFRONOV Anton N.

St. Petersburg State Polytechnical University
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
sofronov@rphf.spbstu.ru

FIRSOV Dmitry A.

St. Petersburg State Polytechnical University
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
lvor@rphf.spbstu.ru

DREMOV Sergei S.

ATC – Semiconductor Devices
27/5 Engels Ave., St. Petersburg, 194156, Russia
sales@atcsd.ru

TER-MARTIROSYAN Alexander L.

ATC – Semiconductor Devices
27/5 Engels Ave., St. Petersburg, 194156, Russia
sales@atcsd.ru

АДДИТИВНОЕ И МУЛЬТИПЛИКАТИВНОЕ УДВОЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ В АВТОНОМНЫХ УРАВНЕНИЯХ

Для нетривиального погружения характеристики исходной задачи Коши в поле экстремалей используются процедуры различного удвоения переменных: аддитивного и мультипликативного, внешнего и внутреннего.

ДИНАМИЧЕСКАЯ СИСТЕМА, ПОТОК, ПОЛЕ ЭКСТРЕМАЛЕЙ, РАССЛОЕНИЕ, БАЗИС РАССЛОЕНИЯ, ДИФЕОМОРФИЗМ, ГАМИЛЬТониан, УРАВНЕНИЯ ЛАГРАНЖА.

Введение

Процедура канонического погружения известна для системы вида

$$\frac{dx}{dt} = \vec{\mathfrak{F}}(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{x}(0) - \mathbf{x}_0 = 0, \quad (1)$$

где

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}) = \mathfrak{F}, \quad \mathfrak{X} \subset \mathfrak{R}^{m=\dim(\mathfrak{X})}, \quad \mathbf{x} \in \mathfrak{X},$$

$$\mathfrak{F} : \mathfrak{T} \times \mathfrak{X} \rightarrow \mathfrak{F}_x,$$

или в скалярном виде:

$$\frac{dx_s}{dt} = \mathfrak{F}_s(t, x_1, \dots, x_m), \quad x_s(0) - x_{s0} = 0,$$

$$s = 1(1) \dim(\mathbf{x}).$$

Для указанной процедуры известна следующая теорема (см., например, работу [1]).

Теорема. Погружение характеристики системы (1) в поле возможно тогда и только тогда, если выполняются следующие условия:

1. импульсы $y_{sr} := \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial x_r}$ самосопряжены, т. е.

$$\frac{\partial y_{sr}}{\partial x_t} = \frac{\partial y_{st}}{\partial x_r}$$

(отображение $\mathfrak{F}$ — это дважды непрерывно дифференцируемый в X диффеоморфизм);

2. уравнения (1) согласованы; это означает, что они выполняются в каждой точке графика $T \times X$, включая концы.

Например, для системы порядка m выполняются $2m$ условий самосопряженности и m условий согласованности. Поэтому естественно интерпретировать условия теоремы как ограничения на систему порядка $4m$ на m неизвестных. Действительно, если

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = \Lambda \left(t, \mathbf{x}, \frac{d\mathbf{x}}{dt} \right),$$

где

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}) = \mathfrak{F}, \quad x \in \mathfrak{X}, \quad \frac{dx}{dt} \in \mathfrak{F}_x,$$

$$\Lambda : \mathfrak{T} \times \mathfrak{X} \times \mathfrak{F}_x \rightarrow \mathcal{C}^{(2)}(\mathfrak{F}),$$

то вдоль слоя T_x выполняется уравнение

$$\frac{\partial \mathfrak{F}_s}{\partial t} + \vec{\mathfrak{F}} \nabla \mathfrak{F}_s = \Lambda_s, \quad s = 1(1)m, \quad \vec{\mathfrak{F}} = \text{str}(\vec{\mathfrak{F}}) \quad (2)$$

и можно интерпретировать эти равенства (2) как уравнения Якоби на действие F_s с координатами x_s , импульсами y_{sr} .

Тогда условия самосопряженности имеют вид

$$\frac{\partial^2 \mathfrak{F}_s}{\partial x_r \partial x_t} = \frac{\partial^2 \mathfrak{F}_s}{\partial x_t \partial x_r},$$

а условия согласованности —

$$\frac{\partial}{\partial x_r} \left(\frac{\partial \mathfrak{F}_s}{\partial t} + \vec{\mathfrak{F}} \nabla \mathfrak{F}_s - \Lambda_s \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathfrak{F}_s}{\partial x_r} \right) +$$



$$+\frac{\partial}{\partial \vec{x}_r}\left(\vec{\mathfrak{F}}\nabla\vec{\mathfrak{F}}-\Lambda_s\right)=0,$$

где

$$\vec{\mathfrak{F}}\nabla\vec{\mathfrak{F}}-\Lambda_s:=\mathfrak{E}_s(t,\vec{x},\vec{y})$$

— гамильтониан, или «энергия» системы (1),

$$\mathfrak{E}_s:\mathfrak{T}\times\mathfrak{X}\times\mathfrak{Y}\rightarrow\mathfrak{R}^1.$$

Кроме того, вдоль характеристики решаемой задачи выполняются $2m$ уравнений Лагранжа второго порядка:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial\Lambda_s}{\partial\dot{x}_r}=\frac{\partial\Lambda_s}{\partial x_r},$$

т. е. система имеет порядок $4m$.

Очевидно, что в условиях, когда система (1) удовлетворяет условиям ослабленной теоремы существования и единственности решения (с достаточно гладким отображением в правой части) условия самосопряженности выполняются тождественно, а в скалярном случае ($m=1$) отсутствуют. Условия согласованности нетривиальны и совпадают с каноническим уравнением на импульс.

В задачах с физическим содержанием равенства (2) рассматриваются как уравнения движения, а условия (1) — как предельные условия на координаты и импульсы.

Постановка задачи

Рассматривается задача Коши для уравнения или системы уравнений (1). Тем самым задается поток (отображение базы X на слой или тривиальное касательное расслоение) и T_x — касательное пространство. При этом ставится задача — выяснить возможность погрузить это расслоение в пучок (поле) экстремалей. Для решения задачи необходимо установить, совпадает ли характеристика исходной задачи Коши с экстремалью и, если совпадает, то для какого именно пучка.

Традиционное решение задачи

Пусть уравнений (2) не существует, а они выполняются просто как тождества на производные от $\mathfrak{F}_i$ вдоль поля:

$$\frac{d\mathfrak{F}_i}{dt}:=\Lambda_i.$$

Тогда, очевидно, что энергия системы $E_s=0$.

Погружение, в котором условия (2) выполняются тождественно, естественно назвать тривиальным. Покажем, что тривиальное погружение приводит к невырожденному лагранжиану.

Пример тривиального погружения. Положим $m=1$. Пусть рассматривается уравнение

$$\frac{dx}{dt}=f(x), \mathfrak{D}(x)=\mathfrak{F}.$$

Вдоль характеристики этого уравнения справедливо выражение

$$\mathfrak{J}(\mathfrak{F})=\int_{\mathfrak{F}}\left(\left(\frac{dx}{dt}\right)^2+f^2(x)\right)dt\rightarrow\inf\geq 0.$$

Первый интеграл уравнения Лагранжа имеет вид

$$v=\sqrt{f^2(x)+C}.$$

Пусть $C=0$. Тогда одна из ветвей этого интеграла совпадает с исходным уравнением. Далее, пусть $v(x_0)=v_0$. Если $v_0\neq\pm f(x_0)$, $C\neq 0$, то очевидно, что задача на минимум $Z(T)$ равносильна задаче на поиск минимума среднеквадратичного отклонения

$$\int_{\mathfrak{F}}\left(\frac{dx}{dt}-f(x)\right)^2dt:=\|x-f\|^2.$$

Следовательно, тривиальное погружение характеристики задачи (1), когда $m=1$, приводит к пучку экстремалей, обеспечивающих минимум среднеквадратичного отклонения. Далее условие согласованности уже выполняется:

$$y=\dot{x}, \mathfrak{E}=\frac{y^2-\mathfrak{F}^2(x)}{2}, \frac{\partial y}{\partial t}=-\frac{\partial \mathfrak{E}}{\partial x}=\mathfrak{F}\mathfrak{F}'.$$

Действие $\mathfrak{J}$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial \mathfrak{J}}{\partial t}+\frac{1}{2}\left(\frac{\partial \mathfrak{J}}{\partial x}\right)^2-\frac{1}{2}\mathfrak{F}^2(x)=0,$$

откуда получаем его полный интеграл:

$$\mathfrak{J}=-\frac{at}{2}+\int_{x_0}^x\sqrt{\mathfrak{F}^2(z)+adz}.$$

Огибающая (каустика) решений, очевидно, совпадает с решением уравнения Лагранжа.

Обобщение случая тривиального погружения. Рассмотрим простейший случай, когда $m = 2$ (поток на плоскости):

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= f_1(x_1, x_2); \\ \frac{dx_2}{dt} &= f_2(x_1, x_2). \end{aligned} \quad (1a)$$

Вдоль характеристик этой системы следует записать:

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = f_1 \frac{\partial f_i}{\partial x_1} + f_2 \frac{\partial f_i}{\partial x_2} = \mathbf{f} \nabla f_i, \quad i = 1, 2,$$

или (в другой записи)

$$\begin{aligned} v_1 \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial v_1}{\partial x_2} &= f_1 \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + f_2 \frac{\partial f_1}{\partial x_2}; \\ v_1 \frac{\partial v_2}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial v_2}{\partial x_2} &= f_1 \frac{\partial f_2}{\partial x_1} + f_2 \frac{\partial f_2}{\partial x_2}. \end{aligned} \quad (1b)$$

В векторной нотации представленная система имеет вид

$$\mathbf{v} \nabla v_i = \mathbf{f} \nabla f_i, \quad i = 1, 2.$$

Пусть

$$v_i = \frac{dx_i}{dt}, \quad i = 1, 2.$$

Тогда равенства (1b) принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} v_1 \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial v_1}{\partial x_2} &= v_1 \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial f_1}{\partial x_2}; \\ v_1 \frac{\partial v_2}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial v_2}{\partial x_2} &= v_1 \frac{\partial f_2}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial f_2}{\partial x_2}, \end{aligned}$$

откуда сразу же можно получить, что

$$\forall i = 1, 2 : v_i = f_i + C_i.$$

Можно видеть, что тривиальное погружение содержит характеристику исходного уравнения, когда $\mathbf{C} = (C_1, C_2) = 0$.

Но если $\mathbf{C} = 0$, то тождественно выполняются равенства

$$v_s(x_1, x_2) = f_s(x_1, x_2), \quad s = 1, 2,$$

которые совпадают с исходной системой (1). Кроме того, при этих же предположениях необходимо выполнение двух условий, равносильных условиям согласованности:

$$v_1 \frac{\partial v_1}{\partial x_2} = f_1 \frac{\partial f_1}{\partial x_2}, \quad v_2 \frac{\partial v_2}{\partial x_1} = f_2 \frac{\partial f_2}{\partial x_1},$$

что приводит к равенству

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{v^2}{2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{v^2}{2} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{f^2}{2} \right) + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{f^2}{2} \right) + f_2 \frac{\partial f_1}{\partial x_2} + f_1 \frac{\partial f_2}{\partial x_1}, \end{aligned} \quad (1b)$$

где $v := \sqrt{v_1^2 + v_2^2}$, $f := \sqrt{f_1^2 + f_2^2}$ — евклидовы нормы.

Если же

$$f_2 \frac{\partial f_1}{\partial x_2} + f_1 \frac{\partial f_2}{\partial x_1} = 0,$$

то из равенства (1b) получается, что

$$v^2 = f^2 + C, \quad v = \pm \sqrt{f^2 + C}.$$

Пусть $v(0) \mp f(0) = 0$, тогда $C = 0$.

Далее, пусть теперь задана система четвертого порядка:

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} := \Lambda_i(\mathbf{x}, \mathbf{v}), \quad i = 1, 2, \quad (3)$$

причем система (1a) рассматривается как совокупность согласованных предельных условий для системы (3).

Функция Гамильтона определяется в данном случае как

$$\mathcal{E}_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = f_r \frac{\partial f_i}{\partial x_s} - \Lambda_i, \quad i = 1, 2$$

где

$$z_i := \frac{\partial f_i}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, \quad \mathbf{z} = (z_1, z_2).$$

В случае тривиального погружения $\Lambda_1 = 0$. При этом справедливы равенства:

$$y_i = \frac{\partial \Lambda_1}{\partial \dot{x}_i}, \quad z_i = \frac{\partial \Lambda_2}{\partial \dot{x}_i},$$

или в векторной нотации —

$$\mathbf{y} = \nabla_v \Lambda_1, \quad \mathbf{z} = \nabla_v \Lambda_2.$$

Условия согласованности дают следующие равенства:

$$\frac{\partial y_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right) = - \frac{\partial \mathcal{E}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \Lambda_1}{\partial x_i},$$

и аналогично по второму набору импульсов —

$$\frac{\partial z_i}{\partial t} = \frac{\partial \Lambda_2}{\partial x_i}.$$

Таким образом, выполняется система из четырех уравнений Лагранжа второго рода на компоненты импульсов:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \Lambda_s}{\partial \dot{x}_i} \right) = \frac{\partial \Lambda_s}{\partial x_i}, \quad i, s = 1, 2.$$

Это система восьмого порядка, и предельные условия на координаты x_i связаны четырьмя предельными условиями (1а) и еще четырьмя условиями вида

$$\begin{aligned} \frac{df_i}{dt} &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + f_s \frac{\partial}{\partial x_s} \right) f_i = \Lambda_i; \\ \frac{\partial f_i}{\partial x_s} &= \frac{\partial \Lambda_i}{\partial \dot{x}_s}, \quad i, s = 1, 2. \end{aligned}$$

Далее, пусть

$$\begin{aligned} \mathcal{F} &\subset \mathcal{R}^1, \mathcal{X} \subset \mathcal{R}^1, \mathcal{F}: \mathcal{X} \rightarrow \\ &\rightarrow \mathcal{F}, \mathcal{D}(x) = \mathcal{F}, x \in \mathcal{C}^{(1)}(\mathcal{F}). \end{aligned}$$

Тем самым задан поток на прямой (тривиальное расслоение) с базой $X \subset \mathcal{R}^1$ и слоем $\mathcal{R}^1$:

$$\frac{dx}{dt} = \mathcal{F}(x), \quad x(0) - x_0 = 0. \quad (4)$$

Система, ассоциированная с потоком (4), которую получают внутренним аддитивным удвоением, представлена в статье [1].

В следующих разделах приводятся два варианта мультипликативного удвоения переменных, связанных с группами сдвигов и вращений, которые позволяют, оставаясь в условиях тривиального погружения, погрузить поток (4) в поле экстремалей некоторого знакоопределенного функционала путем искусственного «навязывания» условия согласованности. Гамильтонианы некоторых физических задач с применением групповых методов построены в работах [2–5].

Внешнее мультипликативное удвоение переменных

Пусть $y \in Y \subset \mathcal{R}^m$. Рассмотрим поток (тривиальное расслоение) $X \times Y \rightarrow \mathcal{R}^m$, $m = 1$:

$$\frac{dx}{dt} = yf(x);$$

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{y^2 - 1}{2} \frac{df(x)}{dx}; \quad (5)$$

$$x(0) - x_0 = y(0) - y_0 = 0, \quad y_0 \neq 1.$$

Тогда справедливы следующие утверждения:

1. Система (5) обеспечивает необходимые условия минимума ($f > 0$) и максимума ($f < 0$) распределению

$$\mathcal{Y}(T, x) = \frac{1}{2} \int_T \frac{1}{f(x)} \left(\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + f^2(x) \right) dt.$$

Плотность распределения $\mathcal{Y}(T, x)$ имеет вид

$$\Lambda \left(x, \frac{dx}{dt} \right) = \frac{1}{2f(x)} \left(\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + f^2(x) \right)$$

и равносильна плотности распределения для среднеквадратичного отклонения с весом $1/f(x)$:

$$\Lambda^* \left(x, \frac{dx}{dt} \right) = \frac{1}{2f(x)} \left(\frac{dx}{dt} \pm f(x) \right)^2.$$

Другими словами, минимизация распределения $\mathcal{Y}(T, x)$ равносильна минимизации среднего квадратичного отклонения

$$\|\dot{x} - f\|_{L_2(T)}$$

с весом $1/f(x)$;

2. Вдоль экстремалей $\mathcal{Y}(x)$ линейный элемент выражается как

$$u = \pm \sqrt{f(x)(f(x) + \alpha)}, \quad u := \frac{dx}{dt},$$

где α – постоянная интегрирования.

Например, пусть $u(x_0) = 0$. Тогда $\alpha = -f(x_0)$. Если $u = \pm f(x_0)$, то $\alpha = 0$;

3. Полный интеграл системы (5) имеет вид

$$\mathcal{Y}(t, x) = -\frac{at}{2} \pm \int_{x_0}^x \sqrt{\frac{f(z)}{f(z) + a}} dz,$$

где a – постоянная величина.

Можно видеть, что особое решение (каустика) совпадает с решением уравнения Лагранжа.

Наглядный пример. Рассмотрим задачу Коши:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{x}, \quad D(x) = T = (0, \tau), \quad x(0) - 1 = 0.$$

Она имеет следующее решение:

$$x(t) = \sqrt{1 - 2t}, \quad t = \frac{1 - x^2}{2}.$$

Очевидно, что $x = 0, \tau = 1/2$.

Удвоенная система имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{y}{x}, \quad \frac{dy}{dt} = \frac{y^2 - 1}{2x}, \quad x(0) - 1 = y(0) = 0$$

и имеет следующее решение:

$$t = 2\sqrt{1 - x} - \frac{2}{3}\sqrt{(1 - x)^3}.$$

Положим $t = \tau = 1/2$. Тогда $x(\tau) > 0$. Вдоль характеристики удвоенной системы выполняется условие

$$S(\tau, x) = \frac{1}{2} \int_0^\tau \left(x \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{x} \right) dt \rightarrow \inf \geq 0.$$

Приведенный пример связан с известной задачей Дюпюи [6] о форме депрессионной кривой (x – глубина, t – координата, $x(\tau) > 0$ – высота ступеньки «высачивания»). Таким образом, существует экстремаль с нулевой касательной в «сечении» $t = 0$, пересекающей «сечение» $t = \tau$ выше оси абсцисс.

Внутреннее мультипликативное удвоение переменных

Указанное удвоение связано с системой, ассоциированной с системой (1):

$$\frac{dx}{dt} = f(yx);$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{f(x)}{x} + \frac{1}{x^2} \int_x^{yx} f(z) dz - \frac{yf(x)}{x};$$

которая порождена гамильтонианом

$$E(x, y) = \frac{1}{x} \int_x^{yx} f(z) dz.$$

Первый интеграл ассоциированной системы имеет вид

$$\frac{1}{x} \int_x^{xy} f(z) dz = \frac{1}{x_0} \int_{x_0}^{x_0 y_0} f(z) dz = \alpha = \text{const.} \quad (6)$$

Пусть $\varphi = f^{-1}$, а $T_x \rightarrow X$. Плотность распределения функционала (действия) $\mathcal{J}$, а именно $\Lambda : (X \times T_x) \rightarrow \mathbb{R}^1$, следует выражению

$$\Lambda \left(x, \frac{dx}{dt} \right) = \frac{\dot{x}\varphi(\dot{x})}{x} - \frac{1}{x} \int_x^{\varphi(\dot{x})} f(z) dz.$$

Тогда можно записать, что

$$y := \frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{x}} = \frac{\varphi \dot{x}}{x}, \quad y_1 := \frac{\partial \Lambda}{\partial x} = -\frac{\dot{x}\varphi(\dot{x})}{x^2} + \frac{1}{x^2} \int_x^{\varphi(\dot{x})} f(z) dz + \frac{f(x)}{x}.$$

В этом случае уравнение Лагранжа принимает вид

$$u \frac{du}{dx} \varphi'(u) = f(x) + \frac{1}{x} \int_x^{\varphi(u)} f(z) dz,$$

где

$$u := \frac{dx}{dt}, \quad u = u(x), \quad u(x_0) - u_0 = 0.$$

Следовательно, с учетом вида первого интеграла (6), частное решение уравнения Лагранжа выражается как

$$u\varphi(u) - u_0\varphi(u_0) - \int_{u_0}^u \varphi(v) dv = \int_{x_0}^x f(z) dz + \alpha(x - x_0).$$

Например, пусть $y_0 = 1$. Тогда выполняются равенства

$$\alpha = 0, \quad u_0 = f(x_0), \quad u = f(x), \quad \varphi(f(z)) = z,$$

и решение уравнения Лагранжа превращается в тождество:

$$xf(x) - x_0 f(x_0) = \int_{x_0}^x f(z) dz + \int_{x_0}^x z df(z).$$

Сопоставление мультипликативного и аддитивного удвоения

Внешнее аддитивное удвоение. Данное удвоение порождает гамильтониан вида

$$E_a^{\text{ex}}(x, y) = yf(x) + \frac{y^2}{2}$$

и ассоциированную систему уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + y; \\ \frac{dy}{dt} = -yf'(x).$$

Условие минимума гамильтониана имеет вид



$$\mathcal{J}_a^{\text{ex}}(T, x) = \int_T \left(\frac{dx}{dt} - f(x) \right)^2 dt \rightarrow \inf \geq 0$$

и не зависит от знака функции $f(x)$. Роль нейтрального элемента группы сдвигов играет переменная $y = 0$, а обратный элемент — это $-y$. Итак, внешнее аддитивное удвоение реализует тривиальное погружение характеристики в пучок экстремалей.

Легко доказать, что экстремаль совпадает с огибающей полного интеграла уравнения на действие:

$$\frac{\partial \mathcal{J}_a^{\text{ex}}}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathcal{J}_a^{\text{ex}}}{\partial x} \right)^2 + f(x) \frac{\partial \mathcal{J}_a^{\text{ex}}}{\partial x} = 0.$$

Внешнее мультипликативное удвоение. Указанное удвоение порождает гамильтониан вида

$$E_m^{\text{ex}}(x, y) = \frac{y^2 - 1}{2} f(x)$$

и соответствующую ассоциированную систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= yf(x); \\ \frac{dy}{dt} &= -\frac{y^2 - 1}{2} f(x). \end{aligned}$$

Условие экстремума гамильтониана имеет вид

$$\mathcal{J}_m^{\text{ex}}(T, x) = \int_T \frac{(\dot{x} - f(x))^2}{f(x)} dt \rightarrow \text{sgn } f \cdot \inf \geq 0.$$

Роль нейтрального элемента полугруппы играет величина $y = 1$. При этом обратный элемент y^{-1} не определен. Например, пусть $y \in X$, $X \subset \mathbb{R}^1$ — компакт. Тогда малые по норме элементы y не имеют обратных элементов. Множитель y^{-1} сингулярно возмущает систему (1).

Так же, как и при внешнем аддитивном удвоении, решение вариационной задачи совпадает с каустикой полного интеграла уравнения Якоби на действие, т. е.

$$\frac{\partial \mathcal{J}_m^{\text{ex}}}{\partial t} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \mathcal{J}_m^{\text{ex}}}{\partial x} \right)^2 + \frac{f(x)}{2} = 0.$$

Внутреннее аддитивное удвоение. Данное удвоение (оно описано в работе [1]) порождает гамильтониан вида

$$E_a^{\text{in}}(x, y) = \int_x^{x+y} f(z) dz,$$

полугруппу сдвигов с нейтральным элементом $y = 0$ и со следующей ассоциированной системой уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(x + y); \\ \frac{dy}{dt} &= f(x) - f(x + y). \end{aligned}$$

Плотность распределения функционала выражается как

$$\frac{d\mathcal{J}_a^{\text{in}}}{dt} = \dot{x}(\varphi(\dot{x}) - x) - \int_x^{\varphi(\dot{x})} f(z) dz.$$

Вдоль экстремалей выполняется условие

$$S_a^{\text{in}}(T, x) \rightarrow \inf \geq 0.$$

Предельная задача для уравнения Лагранжа имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} u \frac{du}{dx} \varphi'(u) &= f(x), \quad u := \frac{dx}{dt} = u(x), \\ u(x_0) - u_0 &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

и имеет решение, которое выражается как

$$(u\varphi(u))_{u_0}^u = \int_{u_0}^u \varphi(v) dv + \int_{x_0}^x f(z) dz.$$

Пусть $y = 0$, тогда $u_0 = f(x_0)$ и равенство (7) превращается в формулу Ньютона. Обратным элементом служит величина $-y$.

Внутреннее мультипликативное удвоение. Данное удвоение порождает гамильтониан вида

$$E(x, y) = \frac{1}{x} \int_x^{yx} f(z) dz$$

и каноническую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(yx); \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{f(x)}{x} + \frac{1}{x^2} \int_x^{yx} f(z) dz - \frac{yf(x)}{x}. \end{aligned}$$

Вдоль экстремалей выполняются следующие условия:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{J}_a^{\text{in}}}{dt} &= \Lambda \left(x, \frac{dx}{dt} \right) = \frac{\dot{x}\varphi(\dot{x})}{x} - \frac{1}{x} \int_x^{\varphi(\dot{x})} f(z) dz, \\ \mathcal{J}_a^{\text{in}}(T, x) &\rightarrow \inf \geq 0. \end{aligned}$$

Если же $y = 1$, $u = f(x)$, $\Lambda = dx/dt$, то уравнение Лагранжа превращается в тривиальное тождество.

Заключение

Для нетривиального погружения характеристики исходной задачи Коши в поле экстремалей в данной работе впервые используются разные процедуры удвоения переменных: аддитивного и мультиплика-

тивного, внешнего и внутреннего. Мультипликативное удвоение — это вариант определения интегрирующего множителя и представления полугруппы (моноида) аффинных преобразований базы $\mathcal{X} \subset \mathcal{E}_m$ с нейтральным элементом $y = 1$. Аддитивное удвоение есть расширение метода вариации постоянных на конечные сдвиги и представления группы сдвигов (трансляций) с нейтральным элементом $y = 0$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Павленко Ю.Г., Зеленский С.И. Интегрирование негамильтоновых систем методом удвоения переменных // Вестник МГУ. Сер. «Физика. Астрономия». 1987. Т. 28. № 1. С. 1–25.
2. Tarasov V. Irreducible monodromy matrices for the R -matrix of the XXZ -model and lattice local quantum Hamiltonians. *Theoretical and Mathematical Physics*. 1985. Vol. 63, pp. 440–444.
3. Tarasov V., Varchenko A. Selberg-type integrals associated with S -fraktur sign L -fraktur sign 3. *Letters in Mathematical Physics*. 2003, Vol. 65, No. 3, pp. 173–185.
4. Mukhin E., Tarasov V., Varchenko A. Bispectral and (GL_n, GL_m) dualities, discrete versus differential. *Advances in Mathematics*. 2008, Vol. 218, No. 1, pp. 121–124.
5. Арнольд В.И. Математические методы классической механики. М.: Едиториал УРСС, 2003. 416 с.
6. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. М.: Наука, 1978, 676 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ПЕТРИЧЕНКО Михаил Романович — доктор технических наук, заведующий кафедрой гидравлики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
fonpetrich@mail.ru

Petrichenko M.R. ADDITIVE AND MULTIPLICATIVE DOUBLING VARIABLES IN AUTONOMOUS EQUATIONS.

The paper analyzes the Cauchy problem for a dynamic equation or for a dynamic system (1) of equations. In doing so, we take a flow and a tangential space $\mathcal{F}_x$, the flow being the dynamic system or mapping $\mathcal{X}$ basis of segregation of $\mathcal{E}_m$ subset on the $\mathcal{F}_x$ layer or a trivial tangential segregation. The segregation is given by diffeomorphism from $\mathcal{X}$ on $\mathcal{E}_1$, of $\mathcal{C}^r(\mathcal{F})$ class, $r \geq 1$.

The aim of this work is to elucidate the possibility of embedding this segregation into the field of extremals.

A necessary and a sufficient condition for a trivial embedding is formulated as the intensification of Liouville's condition in order to keep the phase volume or a condition of existence of invariant measure. The application of this condition allows to construct the dynamic system energy. The distribution which is a dual of Hamiltonian gives the Lagrangian density. In this manner a variational problem is obtained, in which the initial system plays the role of an intermediate integral and of coordination conditions for LaGrange's system of equations.

Procedures of different types of doubling variables (additive and multiplicative, external and internal) have been used in non-trivial embedding of the initial Cauchy problem characteristic into the field of extremals. Multiplicative doubling is analogous to the application of the integrating factor, and the additive one is identical to the addition of equations in variations to the initial system.

DYNAMIC SYSTEM, FLOW, FIELD OF EXTREMALS, SEGREGATION, BASIS OF SEGREGATION, DIFFEOMORPHISM, HAMILTONIAN, LAGRANGE EQUATIONS.

REFERENCES

1. **Pavlenko Yu.G., Zelenskiy S.I.** Integrirovaniye negamil'tonovykh sistem metodom udvoeniya peremennykh. *Vestnik MGU, seriya Fizika, Astronomiya*, 1987, Vol. 28, No. 1, pp. 1-25. (rus)
2. **Tarasov V.** Irreducible monodromy matrices for the R -matrix of the XYZ -model and lattice local quantum Hamiltonians. *Theoretical and Mathematical Physics*, 1985, Vol. 63, pp. 440-444.
3. **Tarasov V., Varchenko A.** Selberg-type integrals associated with S -fraktur sign L -fraktur sign 3. *Letters in Mathematical Physics*, 2003, Vol. 65, No. 3, pp. 173-185.
4. **Mukhin E., Tarasov V., Varchenko A.** Bispectral and (GLn, GLm) dualities, discrete versus differential. *Advances in Mathematics*, 2008, Vol. 218, No. 1, pp. 121-124.
5. **Arnol'd V.I.** *Matematicheskie metody klassicheskoy mekhaniki*. Moscow, Editorial URSS, 2003, 416 p. (rus)
6. **Polubarinova-Cochina P.Ya.** *Teoriya dvizheniya gruntovykh vod*, Moscow, 1978, 676 p. (rus)

THE AUTHOR

PETRITCHENKO Mikhail R.

St. Petersburg State Polytechnical University

29, Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

fonpetrich@mail.ru

ГРУППОВАЯ ЗАДАЧА МИНИМИЗАЦИИ

Данная статья продолжает исследование групповой задачи минимизации (ранее было показано, как она возникает). Рассматриваются следующие вопросы: постановка задачи; ее численное решение; рекуррентные соотношения; вычисление коэффициентов неравенства, задающего грань многовершинника группового уравнения. Формулируется и доказывается теорема об оценке числа шагов.

КОНЕЧНАЯ АБЕЛЕВА ГРУППА, ЦИКЛИЧЕСКАЯ ГРУППА, ПРЯМАЯ СУММА, МИНИМИЗАЦИЯ, ГРУППОВОЕ УРАВНЕНИЕ, ГРУППОВАЯ ЗАДАЧА МИНИМИЗАЦИИ, РЕКУРРЕНТНОЕ СООТНОШЕНИЕ, ОЦЕНКА ЧИСЛА ШАГОВ, МНОГОВЕРШИННИК, ГРАНЬ МНОГОВЕРШИННИКА.

Введение

Групповая задача минимизации содержится в классе дискретных задач оптимизации с одним основным ограничением. Для нас представляет интерес один из вариантов указанной задачи, когда таким ограничением является групповое уравнение.

Настоящая работа посвящена постановке групповой задачи минимизации в сформулированном варианте и численному методу ее решения.

Доказательства утверждений линейной алгебры, теории групп и теории оптимизации, используемых далее в тексте статьи, можно найти в работах [1 – 5], а также в других литературных источниках.

Постановка задачи

Рассмотрим групповую задачу минимизации

$$\min \left\{ \sum_{j=1}^n c_j t_j \mid \sum_{j=1}^n g_{i_j} t_j = h, t_j \in Z_+^1, \right. \\ \left. j = 1, 2, \dots, n \right\}, \quad (1)$$

где $c_j \geq 0$, $g_{i_j} \in G_d$, $i_j \in \{1, 2, \dots, d-1\}$, $h \in G_d$; t_j — неотрицательная целочисленная переменная ($j = 1, 2, \dots, n$). Все элементы g_{i_j} , $j = 1, 2, \dots, n$, принадлежащие к группе G_d и выступающие в качестве коэффициентов в групповом уравнении (1), предполагаются различными. Через G_d обозначена конечная абелева группа порядка d . В рамках данной

статьи это будет либо просто циклическая группа, либо прямая сумма нескольких циклических групп.

Допустимое множество задачи (1) является либо пустым, либо дискретным неограниченным n -мерным (полномерным), состоящим из целочисленных точек.

Выпуклую оболочку всех допустимых целочисленных решений задачи (1) будем называть многовершинником группового уравнения (групповой задачи минимизации). Многовершинник задачи (1) также является неограниченным n -мерным множеством, но уже многогранником, который можно задать конечной системой линейных неравенств. Все вершины многовершинника группового уравнения (1) являются целочисленными, поэтому его часто называют целочисленным многогранником.

Далее будет показано, как вычислить коэффициенты неравенства, задающего $(n-1)$ -мерную грань многовершинника группового уравнения (1), и как найти n точек, определяющих соответствующую гиперплоскость.

Отметим следующий факт [4]. Если неравенство

$$\sum_{j=1}^n \pi_j t_j \geq \pi_0 \quad (\pi t \geq \pi_0)$$

задает $(n-1)$ -мерную грань многовершинника группового уравнения (1), то выполняются следующие соотношения:

а) $(\pi, \pi_0) \geq 0$; б) $\pi_0 = 0$ влечет $t_j \geq 0$,
 $j = 1, 2, \dots, n$.

Рекуррентные соотношения

Обозначим через $P(G_d, N, h)$ выпуклую оболочку всех неотрицательных целочисленных решений $(t_1, t_2, \dots, t_n)$ группового уравнения

$$\sum_{j=1}^n g_{i_j} t_j = h, \quad (2)$$

где $N = \{g_{i_1}, g_{i_2}, \dots, g_{i_n}\}$ — заданное множество, состоящее из n различных ненулевых элементов конечной абелевой группы G_d , $g_{i_j} \in G_d$, $h \in G_d$ ($n = |N|$).

В прямом методе справедливы, например, неравенства вида

$$1 \leq n \leq \min\{d-1, l\}$$

(l — число небазисных столбцов). Множество $P(G_d, N, h)$ будем также называть многовершинником группового уравнения (2).

Требуется вычислить коэффициенты неравенства

$$\sum_{j=1}^n \pi_j t_j \geq \pi_0, \quad \pi_0 \neq 0, \quad (3)$$

которое задает $(n-1)$ -мерную грань n -мерного многовершинника $P(G_d, N, h)$, проходящую через его вершину $(t'_1, 0, \dots, 0)$, причем $t'_1 \neq 0$.

Сначала определим функции $\psi_s(g)$, $g \in G_d$, $s = 1, 2, \dots, n$, а затем покажем, как вычисляются значения этих функций с помощью рекуррентного соотношения.

Пусть заданы действительные неотрицательные числа π_j , $j = 1, 2, \dots, n$. Определяем функции

$$\psi_s(g) = \begin{cases} \min \left\{ \sum_{j=1}^s \pi_j t_j \mid (t_1, t_2, \dots, t_s) \in T_s \right\}, \\ \text{если } T_s \neq \emptyset; \\ +\infty, \text{ если } T_s = \emptyset, \end{cases} \quad (4)$$

где

$$T_s = \{(t_1, t_2, \dots, t_s) \mid \sum_{j=1}^s g_{i_j} t_j = g, \\ t_j \in \mathbb{Z}_+, j = 1, 2, \dots, s\}$$

$(g \in G_d; s = 1, 2, \dots, n)$.

Другими словами, значение $\psi_s(g)$ есть оптимальное для линейной целевой функции, когда в представлении элемента g могут участвовать только s первых элементов из набора $g_{i_1}, g_{i_2}, \dots, g_{i_n}$.

В оптимальном решении $(t_1^*, t_2^*, \dots, t_s^*)$ либо $t_s^* = 0$ (элемент g_{i_s} не используется), либо $t_s^* \geq 1$ (элемент g_{i_s} используется, по крайней мере, один раз). Поэтому имеет место рекуррентное соотношение

$$\psi_s(g) = \min\{\psi_{s-1}(g), \psi_s(g - g_{i_s}) + \pi_s\}, \quad (5)$$

$$g \in G_d, s = 1, 2, \dots, n.$$

Чтобы проследить за значениями переменных t_j , принявших участие в вычислении значения функции $\psi_s(g)$, вводится функция $i_s(g)$, называемая индексной. Она указывает индекс последней переменной, ставшей равной единице, и определяется следующим образом:

$$i_s(g) = \begin{cases} i_{s-1}(g), & \text{если } \psi_{s-1}(g) < \\ < \psi_s(g - g_{i_s}) + \pi_s; \\ s, & \text{если иначе.} \end{cases} \quad (6)$$

Полагаем $\psi_0(g_0) = 0$, $\psi_0(g) = +\infty$, $i_0(g) = 0$ ($g \in G_d \setminus \{g_0\}$). Легко показать, что $\psi_s(g_0) = 0$ для всех $s = 1, 2, \dots, n$.

Тогда рекуррентные соотношения (5) и (6) позволяют вычислить значения функций $\psi_s(g)$ и $i_s(g)$ для всех $g \in G_d$ и для всех $s = 1, 2, \dots, n$, используя $\psi_s(g_0) = 0$, только тогда, когда каждый элемент g_{i_s} порождает всю группу G_d . В этом случае порядок d_s элемента g_{i_s} равен порядку d группы G_d ($d = |G_d|$), а значения функций $\psi_s(g)$ и $i_s(g)$ последовательно вычисляются для аргументов $g_{i_s}, 2g_{i_s}, \dots, (d-1)g_{i_s}$.

Здесь и в дальнейшем для чисел и элементов группы используются одни и те же символы «плюс» и «минус», что не должно вызывать затруднений. Напомним, что через g_0 обозначен нулевой элемент конечной абелевой группы G_d порядка d (нуль группы).

Теорема об оценке числа шагов

Теперь рассмотрим случай, когда элемент g_{i_s} имеет порядок d_s , отличный от порядка d группы G_d . Из теории групп из-

вестно, что порядок элемента является делителем порядка группы [1]. В этом случае $d_s g_{i_s} = g_0$ и все элементы группы G_d нельзя получить как кратные элемента g_{i_s} . Будем рассматривать смежные классы группы G_d по подгруппе, порожденной элементом g_{i_s} [1].

Пусть g' – элемент группы, не являющийся кратным элементом g_{i_s} . Тогда значение $\psi_s(g')$ – это неизвестное. Предварительно полагаем

$$\psi'_s(g') = \psi_{s-1}(g'). \quad (7)$$

Затем для всех элементов смежного класса, определяемого элементом g' , последовательно вычисляем значения $\psi'_s(g' + r g_{i_s})$, рассматривая их как предварительные значения функции ψ_s :

$$\begin{aligned} \psi'_s(g' + r g_{i_s}) &= \min\{\psi_{s-1}(g' + r g_{i_s}); \\ \psi'_s(g' + r g_{i_s} - g_{i_s}) + \pi_s\}, r &= 1, 2, \dots, d_s. \end{aligned} \quad (8)$$

После d_s шагов получаем $d_s g_{i_s} = g_0$ и значение $\psi'_s(g' + d_s g_{i_s})$. Если $\psi'_s(g' + d_s g_{i_s}) \neq \psi_{s-1}(g')$, то полагаем

$$\psi''_s(g') = \psi'_s(g' + d_s g_{i_s}) \quad (9)$$

и последовательно вычисляем значения

$$\begin{aligned} \psi''_s(g' + r g_{i_s}) &= \min\{\psi_{s-1}(g' + r g_{i_s}); \\ \psi''_s(g' + r g_{i_s} - g_{i_s}) + \pi_s\}, r &= 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (10)$$

Как только вычисленное значение $\psi''_s(g' + r g_{i_s})$ станет равным значению $\psi'_s(g' + r g_{i_s})$, процесс прекращается.

Чтобы получить значения функции $\psi_s(g)$ для всех $g \in G_d$, процедура, описанная в двух последних абзацах, повторяется для $(d/d_s - 1)$ начальных элементов, задающих различные смежные классы.

Теорема об оценке числа шагов. *Вычисления остановятся через q шагов, $d_s \leq q \leq 2d_s$, и вычисленные значения функций ψ'_s и ψ''_s дадут истинные значения $\psi_s(g' + r g_{i_s})$, $r = 1, 2, \dots, d_s$.*

Доказательство. Из равенства $\psi'_s(g') = \psi_{s-1}(g')$ следует, что $\psi'_s(g') \geq \psi_s(g')$ (минимум из двух величин всегда меньше или равен каждой из этих величин), а также

$$\psi'_s(g' + r g_{i_s}) \geq \psi_s(g' + r g_{i_s}), r = 1, 2, \dots, d_s \quad (11)$$

(следует расписать левую и правую части последнего неравенства). При этом возможны два случая.

Случай 1. Для некоторого значения r' , $1 \leq r' \leq d_s$, имеет место равенство

$$\psi_s(g' + r' g_{i_s}) = \psi_{s-1}(g' + r' g_{i_s}).$$

Тогда

$$\psi'_s(g' + q g_{i_s}) = \psi_s(g' + q g_{i_s}), r' \leq q \leq d_s,$$

и

$$\psi''_s(g' + q g_{i_s}) = \psi_s(g' + q g_{i_s}),$$

$$q = 1, 2, \dots, r' - 1.$$

Для указанного значения r' имеем

$$\begin{aligned} \psi'_s(g' + r' g_{i_s}) &\leq \psi_{s-1}(g' + r' g_{i_s}) = \\ &= \psi_s(g' + r' g_{i_s}), \end{aligned}$$

а также

$$\psi'_s(g' + q g_{i_s}) \leq \psi_s(g' + q g_{i_s}), r' \leq q \leq d_s. \quad (12)$$

Сопоставляя неравенства (12) и (11), получаем, что для последующих q вычисленные значения $\psi'_s(g' + q g_{i_s})$ совпадают со значениями $\psi_s(g' + q g_{i_s})$.

Ход рассуждений для функции $\psi''_s(g' + q g_{i_s})$ аналогичен ($q = 1, 2, \dots, r' - 1$).

Случай 2. Для всех $r = 1, 2, \dots, d_s$ выполняются неравенства

$$\psi_s(g' + r g_{i_s}) \neq \psi_{s-1}(g' + r g_{i_s}).$$

Тогда

$$\psi_s(g' + r g_{i_s}) = \psi_s(g' + r g_{i_s} - g_{i_s}) + \pi_s;$$

также для всех r и

$$\begin{aligned} \psi_s(g') &= \psi_s(g' + d_s g_{i_s}) = \\ &= \psi_s(g' + (d_s - 1) g_{i_s}) + \pi_s = \dots = \psi_s(g') + d_s \pi_s. \end{aligned}$$

Полученное равенство $\psi_s(g') = \psi_s(g') + d_s \pi_s$ приводит к противоречию, если $\pi_s \neq 0$.

Пусть $\pi_s = 0$, а $g = g' + r g_{i_s}$ – произвольный элемент из смежного класса, определяемого элементом g' . Из определения функции $\psi_s(g)$ следует, что

$$\begin{aligned} \psi_s(g) &= \psi_s(g' + r g_{i_s}) = \\ &= \min_{t_s=0}^{d_s-1} \psi_{s-1}(g' + (r - t_s) g_{i_s}) = \\ &= \psi_{s-1}(g' + r' g_{i_s}) \end{aligned}$$

для некоторых r и r' ($1 \leq r \leq d_s$, $1 \leq r' \leq d_s$). Заметим, что когда t_s пробегает значения 0,



1, 2, ..., $d_s - 1$, аргумент $g' + (r - t_s)g_{i_s}$ дает все элементы рассматриваемого смежного класса. Поскольку r выбиралось произвольно, получаем в частности, что

$$\psi_s(g' + r'g_{i_s}) = \psi_{s-1}(g' + r'g_{i_s}).$$

Следовательно, и для $\pi_s = 0$ имеет место случай 1.

Теорема доказана.

Покажем, как вычислить коэффициенты неравенства, задающего $(n - 1)$ -мерную грань n -мерного многовершинника $P(G_d, N, h)$. Будем искать это неравенство в нормированном виде:

$$\sum_{j=1}^n \pi_j t_j \geq 1 \quad (13)$$

(в неравенстве (3) всегда $\pi_0 > 0$, поэтому нормируем его путем деления на π_0).

Сначала все коэффициенты π_j , $j = 1, 2, \dots, n$ неизвестны. Предположим, что уже вычислены коэффициенты π_j и функции $\psi_j(g)$ для $j = 1, 2, \dots, s-1$; $s-1 < n$. Тогда

$$\pi_s = \begin{cases} \max_{r=1}^{d_s} (1 - \psi_{s-1}(h - rg_{i_s})) / r, \\ \text{если } \psi_{s-1}(h - rg_{i_s}) < 1; \\ 0, \text{ если не существует} \\ \text{значения } r_s, \text{ на котором} \\ \text{достигается максимум,} \end{cases} \quad (14)$$

где d_s — порядок элемента g_{i_s} ($d_s \leq d$; $s = 1, 2, \dots, n$).

Теперь уже можно вычислить и значения функции $\psi_s(g)$, $g \in G_d$.

Представленные вычисления дают именно такие коэффициенты линейного неравенства, при которых соответствующее неравенству уравнение задает грань многовершинника группового уравнения;

эта грань проходит через фиксированную точку. Чтобы в этом убедиться, рассмотрим n целочисленных точек, лежащих в гиперплоскости $\pi t = 1$, и докажем, что эти точки линейно независимы.

В качестве первой следует взять целочисленную точку $(t'_1, 0, \dots, 0)$, $t'_1 > 0$ (напомним, что эта точка задается). Если $\pi_s = 0$, то в качестве точки с индексом s возьмем точку $v_{s-1} + d_s e_s$, где d_s — порядок элемента g_{i_s} , e_s — s -й единичный вектор ($s \geq 2$). Если же $\pi_s \neq 0$, то в качестве s -й берем точку, координаты которой определяются следующим образом:

s -я координата равна положительному целому числу r_s , найденному при вычислении π_s в равенствах (14);

координаты с номерами $s-1, s-2, \dots, 2, 1$ находятся с помощью индексной функции $i_s(g)$ из равенств (6);

остальные координаты равны нулю.

Записав координаты точек в строку и расположив строки в порядке их построения, получим целочисленную нижнюю треугольную матрицу, на главной диагонали которой находятся положительные целые числа. Определитель такой матрицы, очевидно, не равен нулю, что и доказывает линейную независимость точек.

Заключение

Представленные в статье рекуррентные соотношения и теорема об оценке числа шагов служат теоретической основой для конструирования алгоритма заполнения стандартной таблицы. Этот алгоритм предназначен для решения практических и теоретических задач с помощью реализующей его программы на компьютере.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Курош А.Г. Курс высшей алгебры. М.: Наука, 1975. 432 с.
2. Хохлюк В.И. Параллельные алгоритмы целочисленной оптимизации: Монография. М.: Радио и связь, 1987. 224 с.
3. Хохлюк В.И. Методы дискретной оптимизации: Учеб. пособие. Новосибирск: Изд-во

- Новосиб. гос. ун-та, 2013. Ч. 1. 154 с.

4. Ху Т. Целочисленное программирование и потоки в сетях: Пер. с англ. М.: Мир, 1974. 519 с.

5. Gomory R.E. Some polyhedra related to combinatorial problems. *Journal of Linear Algebra and its Applications*. 1969. Vol. 2, pp. 451-558.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ХОХЛЮК Виталий Иванович — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН.
630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Коптюга, 4
vit@academ.org

Khokhlyuk V.I. THE GROUP PROBLEM OF MINIMIZATION.

The present article continues an investigation of the group problem of minimization. The appearance of this problem was shown previously. The algorithm for reduction of an integer basic matrix to a normal form was used in the process. The speedup of calculations in this algorithm is gained due to the Euclidian algorithm.

The following questions are considered in this article: (i) the statement of the group problem of minimization for a finite Abelian group; (ii) the numerical solution of this problem; (iii) the representation of the group elements is given for a cyclic group and for a direct sum of cyclic groups; (iiii) recurrence relations for the value function and the index function; (iiiii) calculation of the coefficients of the inequation, giving the facet of the polytope of the group equation; (iiiii) a statement and a proof of the theorem on the steps number estimation.

The recurrence relations and the theorem mentioned are the theoretical basis for the validation of the computational schemes.

FINITE ABELIAN GROUP, CYCLIC GROUP, DIRECT SUM, MINIMIZATION, GROUP EQUATION, GROUP MINIMIZATION PROBLEM, RECURRENCE RELATION, ESTIMATION OF STEPS NUMBER, POLYTOPE, POLYTOPE FACET.

REFERENCES

1. **Kurosh A.G.** *The course of the higher algebra.* 154 p. (rus)
Moscow, Nauka, 1975. 432 p. (rus)
2. **Khokhlyuk V.I.** *Parallel algorithms of integer optimization.* Moscow, Radio i svyaz, 1987. 224 p. (rus)
3. **Khokhlyuk V.I.** *Discrete optimization methods.* Novosibirsk, Novosibirsk State University, 2013.
4. **Hu T.** *Integer Programming and Network Flows.* Moscow, Mir, 1974. 519 p. (rus)
5. **Gomory R.E.** Some polyhedra related to combinatorial problems. *Journal of Linear Algebra and its Applications*, 1969, Vol. 2, pp. 451-558.

THE AUTHOR

KHOKHLYUK Vitaly I.
Sobolev Institute of Mathematics
4 Acad. Koptug Ave., Novosibirsk, 630090, Russia
vit@academ.org

АЛГОРИТМ ЗАПОЛНЕНИЯ СТАНДАРТНОЙ ТАБЛИЦЫ

В статье описана вычислительная схема для численного решения практических и теоретических задач. Такая схема реализует алгоритм заполнения стандартной таблицы (сверху вниз и слева направо). К вычислительным особенностям этой схемы относятся экономная память, возможность оценить число выполняемых операций, распараллеливание вычислений. Приведены расчетные формулы, используемые в схеме, а работа алгоритма заполнения стандартной таблицы иллюстрируется тремя числовыми примерами.

АЛГОРИТМ, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СХЕМА, ПАМЯТЬ КОМПЬЮТЕРА, ЧИСЛО ВЫПОЛНЯЕМЫХ ОПЕРАЦИЙ, РАСЧЕТНАЯ ФОРМУЛА, АЛГОРИТМ ЗАПОЛНЕНИЯ СТАНДАРТНОЙ ТАБЛИЦЫ, ВЕРШИНА МНОГОВЕРШИННИКА, ГРАНЬ МНОГОВЕРШИННИКА.

Введение

В работе [4] нами были представлены рекуррентные соотношения и теорема об оценке числа шагов алгоритма. Они служат теоретической основой для создания алгоритма заполнения стандартной таблицы. Указанный алгоритм предназначен для решения на компьютере практических и теоретических задач с помощью реализующей его программы.

Данная статья ставит своей целью предложить удобную вычислительную схему для реализации алгоритма; схема обладает несомненными преимуществами перед традиционно используемыми аналогами.

Сначала будет указан общий вид стандартной таблицы, а затем на трех конкретных числовых примерах иллюстрируется алгоритм ее заполнения. Все величины, входящие в стандартную таблицу, были уже вычислены в работе [4]. Однако для удобства мы снова приведем расчетные формулы. В позиции стандартной таблицы, где стоят вопросительные знаки, следует включать значения вычисленных величин.

В дальнейшем мы придерживаемся уже использованных прежде обозначений: n соответствует числу слагаемых в левой части группового уравнения; g_{i_j} и g_{i_s} отражают представление элемента конечной группы его номером, то есть неотрицательным целым числом [3].

Расчетные формулы, используемые в схеме вычислений

Согласно предлагаемой схеме вычислений, сначала находим порядок d_s элемента g_{i_s} , рассматривая при этом кратные kg_{i_s} вплоть до получения нуля g_0 группы G_d , где d — порядок группы G_d ($k = 1, 2, \dots, d_s$; $d_s \leq d$; $s = 1, 2, \dots, n$).

Коэффициенты π_s нормированного линейного неравенства

$$\sum_{j=1}^n \pi_j t_j \geq 1,$$

задающего $(n - 1)$ -мерную грань n -мерного многовершинника группового уравнения вида

$$\sum_{j=1}^n g_{i_j} t_j = h,$$

вычисляются как

$$\pi_s = \begin{cases} \max_{r=1}^{d_s} (1 - \psi_{s-1}(h - rg_{i_s})) / r, \\ \text{если } \psi_{s-1}(h - rg_{i_s}) < 1; \\ 0, \text{ если не существует} \\ \text{значения } r_s, \text{ на котором} \\ \text{достигается максимум,} \end{cases} \quad (1)$$

где d_s — порядок элемента g_{i_s} ($d_s \leq d$; $s = 1, 2, \dots, n$).

Значения функций $\psi_s(g)$ и $i_s(g)$ вычисляются по формулам

$$\psi_s(g) = \min\{\psi_{s-1}(g), \psi_s(g - g_{i_s}) + \pi_s\} \quad (2)$$

и

$$i_s(g) = \begin{cases} i_{s-1}(g), & \text{если } \psi_{s-1}(g) < \\ < \psi_s(g - g_{i_s}) + \pi_s, \\ s, & \text{если иначе} \end{cases} \quad (3)$$

($g = 1g_{i_s}, 2g_{i_s}, \dots, d_s g_{i_s}; d_s \leq d; s = 1, 2, \dots, n$).

Значения функций $\psi'_s(g)$, $i'_s(g)$ и $\psi''_s(g)$, $i''_s(g)$ вычисляются следующим образом.

Сначала полагаем

$$\psi'_s(g') = \psi_{s-1}(g'), i'_s(g') = i_{s-1}(g') \quad (4)$$

(g' не является кратным элементу $g_{i_s}; d_s < d$).

Затем вычисляем

$$\begin{aligned} \psi'_s(g' + rg_{i_s}) &= \min\{\psi_{s-1}(g' + rg_{i_s}), \\ &\psi'_s(g' + rg_{i_s} - g_{i_s}) + \pi_s\}, \end{aligned}$$

а также

$$\begin{aligned} i'_s(g' + rg_{i_s}) &= \\ &= \begin{cases} i_{s-1}(g' + rg_{i_s}), \\ \text{если } \psi_{s-1}(g' + rg_{i_s}) < \\ < \psi'_s(g' + rg_{i_s} - g_{i_s}) + \pi_s; \\ s, & \text{если иначе} \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

($r = 1, 2, \dots, d_s; d_s < d; s = 1, 2, \dots, n$).

Если $\psi'_s(g' + d_s g_{i_s}) \neq \psi_{s-1}(g')$, то полагаем

$$\begin{aligned} \psi''_s(g') &= \psi'_s(g' + d_s g_{i_s}), \\ i''_s(g') &= i'_s(g' + d_s g_{i_s}) \end{aligned} \quad (6)$$

и вычисляем

$$\begin{aligned} \psi''_s(g' + rg_{i_s}) &= \min\{\psi_{s-1}(g' + rg_{i_s}), \\ &\psi''_s(g' + rg_{i_s} - g_{i_s}) + \pi_s\} \end{aligned}$$

а также

$$\begin{aligned} i''_s(g' + rg_{i_s}) &= \\ &= \begin{cases} i_{s-1}(g' + rg_{i_s}), \\ \text{если } \psi_{s-1}(g' + rg_{i_s}) < \\ < \psi''_s(g' + rg_{i_s} - g_{i_s}) + \pi_s; \\ s, & \text{если иначе} \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

($r = 1, 2, \dots, d_s < d; s = 1, 2, \dots, n$).

Вычислительные особенности алгоритма заполнения стандартной таблицы

Память. Для вычисления пары столбцов $\psi_s(g)$ и $i_s(g)$, которые находятся между первой и второй горизонтальными линия-

ми, рекомендуется хранить в памяти не всю таблицу, а только предыдущую пару столбцов. Это дает существенную экономию памяти.

Операции. Предлагаемый алгоритм позволяет легко подсчитать число операций, необходимых для его выполнения.

Параллельные вычисления. Для $d_s < d$ в алгоритме заполнения стандартной таблицы имеется возможность естественно распараллелить вычисления.

Стандартная таблица

Приводим вид стандартной таблицы (табл. 1), при заполнении которой вычисляются:

1) коэффициенты линейного нормированного неравенства

$$\sum_{j=1}^n \pi_j t_j \geq 1,$$

задающего $(n - 1)$ -мерную грань n -мерного многовершинника группового уравнения

$$\sum_{j=1}^n g_{ij} t_j = h, t \in Z_+^n, g_{ij} \in G_d, h \in G_d;$$

2) значения функций $\psi_s(g)$ и $i_s(g)$ ($s = 1, 2, \dots, n$);

3) компоненты n целочисленных точек, задающих нормированную линейную гиперплоскость

$$\sum_{j=1}^n \pi_j t_j = 1;$$

4) вспомогательные величины.

Напомним, что обозначения g_{ij} и g_{i_s} отражают представление элемента конечной группы его номером.

Алгоритм заполнения стандартной таблицы вписывает в нее полученные значения сверху вниз и слева направо.

Первый числовой пример

Вычислим коэффициенты неравенства, задающего грань многовершинника группового уравнения

$$\begin{aligned} g_1 t_1 + g_2 t_2 + g_3 t_3 + g_4 t_4 &= g_4 \\ t &\in Z_+^4, g_{ij} \in G_5, g_4 \in G_5. \end{aligned}$$

Результаты вычислений представлены в табл. 2.

Таблица 1

Вид стандартной таблицы

g_{i_s}			g_{i_l}		g_{i_2}		...	g_{i_n}	
d_s			?		?		...	?	
r_s			?		?		...	?	
π_s			?		?		...	?	
g	ψ_0	i_0	ψ_1	i_1	ψ_2	i_2	...	ψ_n	i_n
g_0	0		0		0		...	0	
g_1	$+\infty$	0	?	?	?	?	...	?	?
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
g_{d-1}	$+\infty$	0	?	?	?	?	...	?	?
π_s			?		?		...	?	
v_1			?		0		...	0	
v_2			?		?		...	0	
$\vdots$			$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$	
v_n			?		?		...	?	

Таблица 2

Коэффициенты неравенства, задающего грань многовершинника группового уравнения (пример первый)

g_{i_s}			g_1		g_2		g_3		g_4	
d_s			5		5		5		5	
r_s			4		1		1		1	
π_s			1/4		2/4		3/4		4/4	
g	ψ_0	i_0	ψ_1	i_1	ψ_2	i_2	ψ_3	i_3	ψ_4	i_4
g_0	0		0		0		0		0	
g_1	$+\infty$	0	1/4	1	1/4	1	1/4	1	1/4	1
g_2	$+\infty$	0	2/4	1	2/4	2	2/4	2	2/4	2
g_3	$+\infty$	0	3/4	1	3/4	2	3/4	3	3/4	3
g_4	$+\infty$	0	4/4	1	4/4	2	4/4	3	4/4	4
π_s			1/4		2/4		3/4		4/4	
v_1			4		0		0		0	
v_2			0		2		0		0	
v_3			1		0		1		0	
v_4			0		0		0		1	

Таблица 3

Кратные элементы коэффициентов группового уравнения (пример первый)

$1g_1 = g_1$	$1g_2 = g_2$	$1g_3 = g_3$	$5g_3 = g_0$	$1g_4 = g_4$
$2g_1 = g_2$	$2g_2 = g_4$	$2g_3 = g_1$	$4g_3 = g_2$	$2g_4 = g_3$
$3g_1 = g_3$	$3g_2 = g_1$	$3g_3 = g_4$	$3g_3 = g_4$	$3g_4 = g_2$
$4g_1 = g_4$	$4g_2 = g_3$	$4g_3 = g_2$	$2g_3 = g_1$	$4g_4 = g_1$
$5g_1 = g_0$	$5g_2 = g_0$	$5g_3 = g_0$	$1g_3 = g_3$	$5g_4 = g_0$

При заполнении стандартной таблицы (см. табл. 2) удобно воспользоваться табличкой кратных элементов g_1, g_2, g_3, g_4 (табл. 3).

Нетрудно убедиться в том, что значения величины r_2 , равные 1 и 2, дают одну и ту же вершину v_2 .

Второй числовой пример

Покажем, как найти неравенство, которое задает грань многовершинника $P(G_6, N, h)$, проходящую через его вершину $(3, 0, 0,$

$0, 0)$, где G_6 – циклическая группа шестого порядка, $N = \{g_1, g_2, g_3, g_4, g_5\}$ и $h = g_3$ [3, 5]. Групповое уравнение имеет вид

$$g_1 t_1 + g_2 t_2 + g_3 t_3 + g_4 t_4 + g_5 t_5 = g_3$$

$$t \in Z_+^5, g_{i_j} \in G_6, g_3 \in G_6.$$

Результаты вычислений коэффициентов этого неравенства представлены в табл. 4, где результаты вычисления функций $\psi_s(g)$ и $i_s(g)$, $s = 2, 3, 4$, записаны в один столбец. Эти индексные функции дают возможность найти точки, лежащие

Таблица 4

Коэффициенты неравенства, задающего грань многовершинника группового уравнения (пример второй)

g_{i_s}			g_1		g_2		g_3		g_4		g_5	
d_s			6		3		2		3		6	
r_s			3		1		1		2		1	
π_s			1/3		2/3		3/3		1/3		2/3	
g	ψ_0	i_0	ψ_1	i_1	ψ_2	i_2	ψ_3	i_3	ψ_4	i_4	ψ_5	i_5
g_0	0		0		0		0		0		0	
g_1	$+\infty$	0	1/3	1	1/3	1	1/3	1	1/3	1	1/3	1
g_2	$+\infty$	0	2/3	1	2/3	2	2/3	2	2/3	4	2/3	4
g_3	$+\infty$	0	3/3	1	3/3	2	3/3	3	3/3	4	3/3	5
g_4	$+\infty$	0	4/3	1	4/3	2	4/3	3	1/3	4	1/3	4
g_5	$+\infty$	0	5/3	1	5/3	2	5/3	3	2/3	4	2/3	5
π_s			1/3		2/3		3/3		1/3		2/3	
v_1			3		0		0		0		0	
v_2			1		1		0		0		0	
v_3			0		0		1		0		0	
v_4			1		0		0		2		0	
v_5			0		0		0		1		1	

на гиперплоскости $\pi t = 1$.

Используя равенства (1), вычисляем коэффициенты π_s и r_s :

$$\pi_1 = \max_{r=1}^6 \{ (1 - \psi_0(g_3 - rg_1)) / r \mid \psi_0(g_3 - rg_1) < 1 \} = (1 - \psi_0(g_3 - 3g_1)) / 3 = 1/3, \quad r_1 = 3;$$

$$\pi_2 = \max_{r=1}^3 \{ (1 - \psi_1(g_3 - rg_2)) / r \mid \psi_1(g_3 - rg_2) < 1 \} = (1 - \psi_1(g_3 - 1g_2)) / 1 = 2/3, \quad r_2 = 1;$$

$$\pi_3 = \max_{r=1}^2 \{ (1 - \psi_2(g_3 - rg_3)) / r \mid \psi_2(g_3 - rg_3) < 1 \} = (1 - \psi_2(g_3 - 1g_3)) / 1 = 3/3, \quad r_3 = 1;$$

$$\pi_4 = \max_{r=1}^3 \{ (1 - \psi_3(g_3 - rg_4)) / r \mid \psi_3(g_3 - rg_4) < 1 \} = (1 - \psi_3(g_3 - 2g_4)) / 2 = 1/3, \quad r_4 = 3;$$

$$\pi_5 = \max_{r=1}^6 \{ (1 - \psi_4(g_3 - rg_5)) / r \mid \psi_4(g_3 - rg_5) < 1 \} = (1 - \psi_4(g_3 - 1g_5)) / 1 = 2/3, \quad r_5 = 1.$$

Заметим, что коэффициент $\pi_1 = 1/3$ можно вычислить без использования табл. 4, то есть из условия $\pi_1 \cdot 3 = 1$. Именно такой случай имеет место в прямом методе.

Таким образом, неравенство

$$\frac{1}{3}t_1 + \frac{2}{3}t_2 + \frac{3}{3}t_3 + \frac{1}{3}t_4 + \frac{2}{3}t_5 \geq 1$$

задает грань многовершинника $P(G_6, N, h)$, проходящую через точку $(3, 0, 0, 0, 0)$.

Функции ψ_1 и i_1 , ψ_5 и i_5 вычисляются по формулам (2) и (3).

В табл. 5 показаны результаты вычисления коэффициентов функций ψ_2 и i_2 , ψ_3 и i_3 , ψ_4 и i_4 .

Известно, что в качестве начального элемента может быть взят любой элемент смежного класса. Рассмотрим, например, смежный класс $\{g_1, g_3, g_5\}$. Из данных табл. 5 видно, что переход к другому начальному элементу не меняет значений функции для элементов этого класса, но меняет порядок вычисления значений.

Вычисление вершин. Такую процедуру называют также обратным ходом. Вершина есть по сути оптимальное решение групповой задачи минимизации со специально построенной линейной целевой функцией. Для получения нужного результата рассматриваем нулевой вектор $(0, 0, 0, 0, 0)$, заменяем 0 в позиции 1 на $r_1 = 3$, и тогда получаем вершину $v_1 = (3, 0, 0, 0, 0)$ (заданную).

Далее, рассматриваем нулевой вектор $(0, 0, 0, 0, 0)$, заменяем 0 в позиции 2 на $r_2 = 1$. Вычисляем $h_1 = h - g_2 \cdot 1 = g_1$, в табл. 4 находим индекс $i_2(g_1) = 1$, увеличиваем 0 в позиции 1 в векторе $(0, 1, 0, 0, 0)$ на единицу, получаем $h_2 = h - g_2 \cdot 1 - g_1 \cdot 1 = g_0$ и вершину $v_2 = (1, 1, 0, 0, 0)$; на этом заканчиваем вычисление вершины.

Снова рассматриваем нулевой вектор $(0, 0, 0, 0, 0)$, заменяем 0 в позиции 3 на $r_3 = 1$. Вычисляем $h_1 = h - g_3 \cdot 1 = g_0$, получаем вершину $v_3 = (0, 0, 1, 0, 0)$; на этом опять заканчиваем вычисление вершины.

Еще раз рассматриваем нулевой вектор $(0, 0, 0, 0, 0)$, заменяем 0 в позиции 4 на

Таблица 5

Результаты вычисления значений функций $\psi_s(g)$ и $i_s(g)$, $s = 2, 3, 4$ (пример второй)

g	ψ'_2	i'_2	ψ'_2	i'_2	ψ'_3	i'_3	ψ'_3	i'_3	ψ'_3	i'_3	ψ'_4	i'_4	ψ'_4	i'_4
g_0	0				0						0			
g_1			1/3	1			1/3	1					1/3	1
g_2	2/3	2							2/3	2	2/3	4		
g_3			3/3	2	3/3	3							3/3	4
g_4	4/3	2					4/3	3			1/3	4		
g_5			5/3	2					5/3	3			2/3	4

$r_4 = 2$. Вычисляем $h_1 = h - g_4 2 = g_1$, в табл. 4 находим индекс $i_4(g_1) = 1$, увеличиваем 0 в позиции 1 в векторе $(0, 0, 0, 2, 0)$ на единицу, получаем $h_2 = h - g_4 2 - g_1 1 = g_0$ и вершину $v_4 = (1, 0, 0, 2, 0)$; на этом заканчиваем вычисление вершины.

Опять рассматриваем нулевой вектор $(0, 0, 0, 0, 0)$, заменяем 0 в позиции 5 на $r_5 = 1$. Вычисляем $h_1 = h - g_5 1 = g_4$, в табл. 4 находим индекс $i_5(g_4) = 4$, увеличиваем 0 в позиции 4 в векторе $(0, 0, 0, 0, 1)$ на единицу, получаем $h_2 = h - g_5 1 - g_4 1 = g_0$ и вершину $v_5 = (0, 0, 0, 1, 1)$; на этом заканчиваем вычисление вершины.

Проверка правильности результата. Приводим соотношения для проверки.

$$g_1 3 = g_3, g_1 1 + g_2 1 = g_3, g_3 1 = g_3,$$

$$g_1 1 + g_4 2 = g_3, g_4 1 + g_5 1 = g_3;$$

$$\frac{1}{3} 3 = 1, \frac{1}{3} 1 + \frac{2}{3} 1 = 1, \frac{3}{3} = 1,$$

$$\frac{1}{3} 1 + \frac{1}{3} 2 = 1, \frac{1}{3} 1 + \frac{2}{3} 1 = 1.$$

Таким образом, мы показали, как с помощью табл. 4 получить пять точек, опре-

деляющих гиперплоскость $\pi t = 1$. Эти точки являются вершинами многовершинника $P(G_6, N, h)$. Они уже приведены в табл. 4 под второй горизонтальной чертой. При этом их координаты записаны в строку.

Третий числовой пример

Приведем пример вычисления коэффициентов неравенства, задающего грань многовершинника группового уравнения вида

$$g_1 t_1 + g_2 t_2 + g_3 t_3 = g_3$$

$$t \in Z_+^3, g_{i_j} \in G_4, g_3 \in G_4. \quad (8)$$

Результаты вычислений представлены в табл. 6.

Приведем пример вычисления коэффициентов неравенства, задающего грань многовершинника группового уравнения вида

$$g_3 t_3 + g_2 t_2 + g_1 t_1 = g_3$$

$$t \in Z_+^3, g_{i_j} \in G_4, g_3 \in G_4. \quad (9)$$

Результаты вычислений представлены в табл. 7.

Очевидно, что уравнения (8) и (9) эк-

Таблица 6

Коэффициенты неравенства, задающего грань многовершинника группового уравнения (8) (пример третий)

g_{i_s}			g_1		g_2		g_3	
d_s			4		2		4	
r_s			3		1		1	
π_s			1/3		2/3		1	
g	ψ_0	i_0	ψ_1	i_1	ψ_2	i_2	ψ_3	i_3
g_0	0		0		0		0	
g_1	$+\infty$	0	1/3	1	1/3	1	1/3	1
g_2	$+\infty$	0	2/3	1	2/3	2	2/3	2
g_3	$+\infty$	0	3/3	1	3/3	2	3/3	3
π_s			1/3		2/3		1	
v_1			3		0		0	
v_2			1		1		0	
v_3			0		0		1	

Таблица 7

**Вычисленные коэффициенты неравенства,
задающего грань многовершинника группового уравнения (9) (пример третий)**

g_{i_s}			g_1		g_2		g_3	
d_s			4		2		4	
r_s			1				1	
π_s			1		0		1	
g	ψ_0	i_0	ψ_1	i_1	ψ_2	i_2	ψ_3	i_3
g_0	0		0		0		0	
g_1	$+\infty$	0	3	1	1	2	1	3
g_2	$+\infty$	0	2	1	0	2	0	2
g_3	$+\infty$	0	1	1	1	2	1	3
π_s			1		0		1	
v'_1			1		0		0	
v'_2			1		2		0	
v'_3			0		1		1	

вивалентны. Многовершинник P имеет три вершины и пять граней: две построенные и три координатные плоскости.

Все целочисленные точки v_1, v_2, v_3 в табл. 6, определяющие соответствующую плоскость, являются вершинами многовершинника P , а точка v'_2 из табл. 7 вершиной не является.

Обозначим через v_1, v_2, v_3 вершины многовершинника P , а через f_1, f_2, f_3 ($t_1 = 0$), f_4 ($t_2 = 0$), f_5 ($t_3 = 0$) – его грани. Тогда получим вершинно-граневую матрицу инциденции:

	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5
v_1	1	0	0	1	1
v_2	1	1	0	0	1
v_3	1	1	1	1	0

Заключение

Итак, данная статья представляет удобную вычислительную схему для численного решения практических и теоретических задач, обладающую рядом несомненных преимуществ перед традиционно используемыми. К преимуществам этой схемы следует отнести экономную память, возможность оценить число выполняемых операций и распараллеливание вычислений. Работа алгоритма заполнения стандартной таблицы иллюстрируется тремя числовыми примерами, которые доводят решение поставленной задачи вплоть до стадии создания программы на компьютере. Заключительным шагом может быть написание конкретной программы и проведение соответствующего вычислительного эксперимента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Курош А.Г. Курс высшей алгебры. М.: Наука, 1975. 432 с.
2. Хохлюк В.И. Параллельные алгоритмы целочисленной оптимизации: монография. М.: Радио и связь, 1987. 224 с.
3. Хохлюк В.И. Методы дискретной оптимизации: учеб. пособие. Новосибирск: Изд-во Новосибирского государственного университета, 2013. Ч. 1. 154 с.
4. Хохлюк В.И. Групповая задача минимизации // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2014. № 3(201). С. 126–130.
5. Ху Т. Целочисленное программирование и

потоки в сетях. Пер. с англ. М.: Мир, 1974. 519 с.
6. Gomory R.E. Some polyhedra related to

combinatorial problems. *Journal of Linear Algebra and its Applications*. 1969. Vol. 2, pp. 451-558.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

ХОХЛЮК Виталий Иванович — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН.
630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Коптюга, 4
vit@academ.org

Khokhlyuk V.I. THE ALGORITHM FOR COMPLETING THE STANDARD TABLE.

The present article describes the computational scheme for numerical solving practical and theoretical problems. This scheme realizes the algorithm for completing the standard table (from top to bottom and from left to right).

Among the computation features of this scheme are computer memory saving, the possibility to estimate the number of executed operations, parallelization of computations. The calculating formulae used in the scheme are given and the work of the algorithm for completing the standard table is illustrated with three numerical examples.

The first example describes the simplest case when every coefficient of the group equation induces the whole finite group.

The second example describes the general case. There could be some group elements among the coefficients of the group equation, which order is smaller than the finite group one.

The third example shows that not all the points defining the hyperplane are the vertices of the polytope of the group equation. Note that in the applications the coefficients of the inequation, which defines the face of the polytope, are calculated with the filling of the standard table (this inequation is called the cut or the valid inequation in discrete optimization).

ALGORITHM, COMPUTATIONAL SCHEME, COMPUTER MEMORY, NUMBER OF EXECUTED OPERATIONS, CALCULATING FORMULA, ALGORITHM FOR COMPLETING STANDARD TABLE, VERTEX OF POLYTOPE, FACET OF POLYTOPE.

REFERENCES

1. Kurosh A.G. *The course of the higher algebra*. Moscow, Nauka, 1975. 432 p. (rus)
2. Khokhlyuk V.I. *Parallel algorithms of integer optimization*. Moscow, Radio i svyaz, 1987. 224 p. (rus)
3. Khokhlyuk V.I. *Discrete optimization methods*. Novosibirsk, Novosibirsk State University, 2013. 154 p. (rus)
4. Khokhlyuk V.I. The group minimization

problem. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and mathematics*, 2014, No. 3(201), pp. 126-130. (rus)

5. Hu T. *Integer Programming and Network Flows*. Moscow, Mir, 1974. 519 p. (rus)

6. Gomory R.E. Some polyhedra related to combinatorial problems. *Journal of Linear Algebra and its Applications*, 1969, Vol. 2, pp. 451-558.

THE AUTHOR

KHOKHLYUK Vitaly I.
Sobolev Institute of Mathematics
4 Acad. Koptuyug Ave., Novosibirsk, 630090, Russia
vit@academ.org

УДК 539.1.01

А.В. Пашковский¹, В.И. Пашковский²

¹Северо-Кавказский федеральный университет, Россия

²Компьютерная лаборатория сверхсложных прикладных задач (BNAMapI), Израиль

ФАНОВЫЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НУКЛОНОВ И ЭЛЕКТРОНОВ

В статье строятся модели, описывающие потенциал распределенных электрических зарядов с помощью вырождающихся уравнений с частными производными. Доказано, что потенциал облака электрона в атоме водорода в основном состоянии и сам атом водорода могут быть описаны такими уравнениями. Представленное описание освобождает от необходимости использовать понятие точечного заряда; ответственность за свойства среды возлагается на коэффициенты уравнений (обращаются в бесконечность), а также на выбор решения из определенного класса функций.

ФАН, ФАНОВАЯ МОДЕЛЬ, НУКЛОН, ЭЛЕКТРОН, АТОМ ВОДОРОДА, ТОЧЕЧНЫЙ ЗАРЯД, РАСПРЕДЕЛЕННЫЙ ЗАРЯД, ПОТЕНЦИАЛ, ВЫРОЖДАЮЩЕЕСЯ УРАВНЕНИЕ С ЧАСТНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ, КОЛЛОИДНЫЙ РАСТВОР, СУПРАХИМИЯ.

Введение

Современные задачи нанотехнологии, биомедицины, прогнозирования свойств новых материалов требуют расчета локальных электромагнитных полей в особых неоднородных средах, содержащих, в частности, наночастицы, квантовые точки, кластеры молекул. Во многих случаях применение квантовой механики для расчета локальных полей в таких средах оказывается невозможным ввиду огромного объема вычислений. В связи с этим задача построения новых физико-математических моделей подобных сред и физических явлений в таких объектах весьма актуальна.

Необходимо отметить, что в настоящей статье не рассматриваются какие-либо новации квантовой механики. Предметом исследования является лишь электростатическое поле с точки зрения разрабатываемой фановой теории.

В работе [1] нами был рассмотрен пример использования вырождающихся уравнений с частными производными для опи-

сания электрического поля протона. При этом было показано, что одно и то же явление можно адекватно описать различными моделями. В частности, потенциал поля внутри протона можно сопоставить с потенциалом поля некоторого «фана» (название произведено от слова «фантом» (phantom)); подробности описаны в работе [1]).

Естественно, для развития теории фанов было бы желательно найти и другие примеры частиц и их совокупностей, электростатические поля которых описываются с помощью фановой теории. Однако чтобы быть ближе к известным распределениям электростатических полей реальных частиц, нами были рассмотрены распределения электростатических полей как облака электрона атома водорода, так и самого атома водорода, находящегося в основном состоянии. Это позволило проиллюстрировать использование теории фанов для описания электростатических полей рассмотренных частиц, включающих и одноименные, и противоположные по знаку заряды.

Понятие «фана» было введено в работе [2], а затем использовано в работах [3 – 5] как объекта, потенциал u которого удовлетворяет уравнению

$$\operatorname{div}(\varepsilon \operatorname{grad} u) = q_1 q_2 (1 - \beta) \delta(0) \quad (1)$$

при условии, что в окрестности нуля функция u и коэффициент ε ведут себя следующим образом:

$$\varepsilon|_{r \rightarrow 0} \sim q_1 r^{-\beta}; \quad (2)$$

$$u|_{r \rightarrow 0} \sim \frac{q_2}{4\pi} r^{\beta-1} + c, \quad (3)$$

где q_1, q_2, β, c – постоянные; δ – дельта-функция; константа $\beta = \beta_p = 3$ для протона.

Такое определение рассматривало единственный фан, у которого фановая проницаемость ε имела особенность только в одной точке. Затем это определение было расширено на систему точечных зарядов на основе использования уравнения

$$\operatorname{div} \left(\left(\sum_i \frac{\pm 1}{r_i^{\beta_i}} + \varepsilon_1 \right) \operatorname{grad} u \right) = \mp 4\pi \sum_i (\beta_i - 1) \delta(r_i), \quad (4)$$

где r_i обращаются в нуль в точках расположения заряда; ε_1 – некоторая гладкая функция; поведение потенциала фана u в каждой точке r_i согласовывается с особенностями ε , в соответствии с формулами (2) и (3).

Цель данной статьи – показать, что при распределении зарядов на поверхностях фановая проницаемость может иметь особенности и на этих поверхностях.

Основные определения

Под «фаном» будем понимать объект, который описывает электрические или гравитационные поля. Его свойства должны определяться уравнениями типа Максвелла или Шредингера с коэффициентами, принимающими произвольные значения, в том числе нулевые или обращающиеся в бесконечность в некоторых точках или поверхностях в пространстве.

Вполне вероятно, что в процессе развития фановой теории и ее применения в различных областях это определение будет претерпевать видоизменения.

Коэффициент ε , используемый в задачах, решения которых описывают электрические поля, будем называть «электрической фановой проницаемостью». Поскольку выражающиеся уравнения могут аналогично описывать и гравитационные поля, позволяя плотности пространства иметь особенности, коэффициент ε в соответствующих задачах мы будем рассматривать как «гравитационную фановую проницаемость».

Разумеется, не следует формально воспринимать вышеприведенные понятия как изменение классических представлений о диэлектрической и магнитной проницаемости, о плотности материи или воспринимать их как новые требования к прежним фундаментальным основам теории электромагнитного поля. «Фановые проницаемости» ε – это коэффициенты в уравнениях типа (1), позволяющие строить новые модели сред и объектов, которым во многих задачах можно придать определенный физический смысл.

Например, в центрально-симметричных случаях, в области, где отсутствуют особенности коэффициента ε , уравнение (1) становится однородным и имеет вид

$$\frac{1}{r^2} (\varepsilon r^2 u_r)_r = 0. \quad (5)$$

Отсюда следует, что

$$\varepsilon = \frac{c}{r^2 u_r}, \quad (6)$$

где c – постоянная.

Преимущества и недостатки фановых моделей

Формула (6) позволяет определять ε экспериментально, для чего необходимо измерять силу, действующую на пробный заряд, так как сила связана с градиентом потенциала, который в этом случае выражается через u_r .

Использование в фановых моделях выражающихся уравнений типа (5) позволяет отказаться в некоторых задачах от решения уравнения Пуассона. Для этого необходимо допустить, что коэффициенты вырожденных уравнений, представляющие такие параметры среды, как электрическая и/или



магнитная фановая проницаемость, а также фановая плотность материи могут обращаться в нуль или бесконечность.

Однако в фановых моделях отсутствует свойство суперпозиции. Это означает, что если два заряда созданы с помощью фановых проницаемостей ε_1 и ε_2 , то при этом вовсе не подразумевается, что сумма их потенциалов будет обеспечиваться сложением величин ε_1 и ε_2 .

Действительно, пусть потенциал u_1 в стационарном центрально-симметричном случае удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{r^2} (\varepsilon_1 r^2 u_{1r})_r = 0, \quad (7)$$

где ε_1 имеет особенность в точке $r = 0$.

Пусть аналогично потенциал u_2 удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{r^2} (\varepsilon_2 r^2 u_{2r})_r = 0, \quad (8)$$

где ε_2 также имеет особенность в точке $r = 0$.

Найдем фановую проницаемость ε_3 , при которой создается суммарный потенциал u_3 , равный

$$u_3 = u_1 + u_2.$$

Для этого необходимо, чтобы выполнялось равенство

$$\frac{1}{r^2} (\varepsilon_3 r^2 u_{3r})_r = \delta(0), \quad (9)$$

или

$$\frac{1}{r^2} (\varepsilon_3 r^2 (u_{1r} + u_{2r}))_r = \delta(0).$$

Из уравнений (7) и (8) следует, что

$$u_{1r} = \frac{c_1}{\varepsilon_1 r^2}; \quad u_{2r} = \frac{c_2}{\varepsilon_2 r^2}.$$

В силу равенства (9) получим следующее соотношение:

$$\frac{1}{r^2} \left(\varepsilon_3 \left(\frac{c_1}{\varepsilon_1} + \frac{c_2}{\varepsilon_2} \right) \right)_r = \delta(0).$$

Тогда выражение для величины ε_3 принимает такой окончательный вид:

$$\varepsilon_3 = \int r^2 \delta(0) dr \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{c_1 \varepsilon_2 + c_2 \varepsilon_1}.$$

Здесь интересно отметить, что величина

ε_3 вне точки $r = 0$ может быть представлена в виде

$$\varepsilon_3 = \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{c_1 \varepsilon_2 + c_2 \varepsilon_1}.$$

Полученное выражение, несомненно, напоминает формулу

$$\varepsilon^* = \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{y_1 \varepsilon_1 + y_2 \varepsilon_2},$$

которую обычно используют для вычисления эффективной диэлектрической проницаемости последовательно соединенных диэлектриков с диэлектрическими проницаемостями ε_1 , ε_2 и долями объемного содержания (объемные концентрации) первого и второго компонента y_1 , y_2 в плоском конденсаторе.

Следует отметить, что все аналитические результаты в этой работе получены для центрально-симметричного случая. При расчетах электростатических полей в расчетных областях более сложной формы необходимо применять численные методы. Так, в работе [1] был приведен пример, показывающий, что задача численного расчета полей в наносредах неустойчива и что для подобных сред необходимо применять только блочные численно-аналитические методы (BNAM) [5]. Указанные методы основаны на значительном использовании аналитических приемов, обладают повышенной точностью и позволяют численно решать краевые задачи в средах, где потенциал резко меняется как по величине, так и по форме.

Следует отметить, что фаны обладают значительной гибкостью за счет возможности выбора различных порядков обращения в бесконечность коэффициентов как в точках, так и на поверхностях, а также возможностью почти произвольного выбора значений функции ε в местах, где нет особенностей. Это позволяет моделировать такие сложные среды, как биологические, как растворы, как материалы с наночастицами. Особую пользу эти модели могут принести в супраимии, где известно пространственное расположение зарядов и необходимо найти их силовое взаимодействие с учетом перекрытия электронных оболочек.

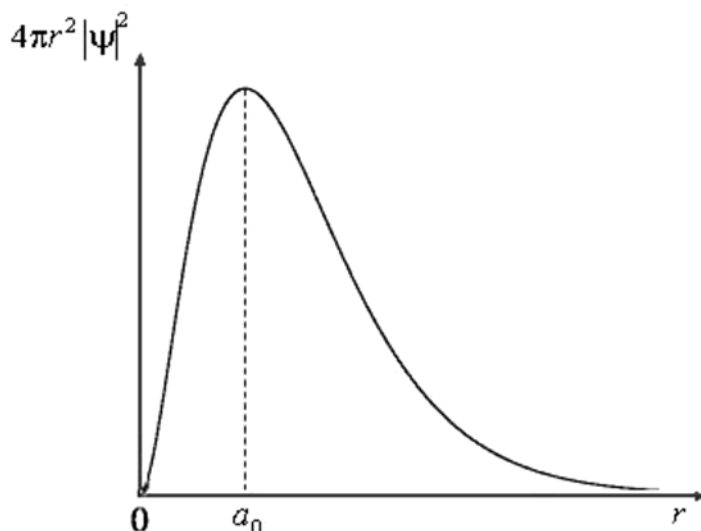


Рис. 1. График функции плотности электронного облака в атоме водорода;
 a_0 — радиус первой боровской орбиты

Фановая модель облака электронов

Для построения фана, соответствующего облаку электрона в атоме водорода в основном состоянии, рассмотрим плотность распределения электронов в атоме водорода, которая представляется функцией $D = 4\pi r^2 |\Psi|^2$ (рис. 1), а также потенциал u в облаке, который удовлетворяет уравнению

$$\Delta u = -\frac{4\pi \cdot q_e}{\epsilon_0} r^2 e^{-r/b}, \quad (10)$$

где q_e — заряд электрона.

Найдем значение ϵ_e , при котором потенциал u удовлетворяет уравнению

$$\text{div}(\epsilon_e \text{grad } u) = q_1 q_2 (1 - \beta) \delta(0).$$

В силу центральной симметрии уравнение (10) можно записать в виде

$$\frac{1}{r^2} (r^2 u_r)_r = -\frac{4\pi \cdot q_e}{\epsilon_0} r^2 e^{-r/b},$$

откуда следует, что

$$u = -\frac{4\pi b^2 q_e}{\epsilon_0 r} (r^3 + 6br^2 + 18b^2 r + 24b^3) e^{-r/b} + \frac{c_1}{r} + c_2,$$

где c_1, c_2 — постоянные.

Выберем значения c_1 и c_2 такими, чтобы потенциал в начале координат был конеч-

ным. Для этого воспользуемся разложением

$$e^{-r/b} = 1 - \frac{r}{b} + \frac{r^2}{2b^2} - \frac{r^3}{6b^3} + \dots$$

Тогда для потенциала u получим следующее представление:

$$u = \frac{\pi q_e}{\epsilon_0} \left(-96 \cdot b^5 \frac{1}{r} + 24b^4 + 4br^3 + 2r^4 + \dots \right) + \frac{c_1}{r} + c_2.$$

Если положить, что постоянные c_1 и c_2 следуют выражениям

$$c_1 = \frac{96\pi b^5 q_e}{\epsilon_0};$$

$$c_2 = -\frac{24\pi b^4 q_e}{\epsilon_0} + c_3,$$

где c_3 — произвольная константа, то получим для потенциала u представление (11) и его значение в начале координат (12):

$$u = -\frac{4\pi b^2 q_e}{\epsilon_0 r} (r^3 + 6br^2 + 18b^2 r + 24b^3) e^{-r/b} + \frac{96\pi a_1 b^5 q_e}{\epsilon_0} \frac{1}{r} - \frac{24\pi a_1 b^4 q_e}{\epsilon_0} + c_3, \quad (11)$$

$$u = \frac{\pi q_e}{\epsilon_0} (4br^3 + 2r^4 + \dots) + c_3. \quad (12)$$

Отметим, что в силу выражения (12) по-

тенциал u_r в начале координат имеет нуль второго порядка. Вне начала координат уравнение (1) однородно и из него следует, что

$$\varepsilon_e = \frac{c_4}{r^2 u_r} \quad (13)$$

и, следовательно, ε_e будет иметь особенность четвертого порядка.

Таким образом, для потенциала u и ε_e выполнены условия (2), (3) при $\beta = 4$, а сам потенциал удовлетворяет уравнению (1). При этом ε_e определяется по формуле (13), а u_r — по следующей формуле:

$$u_r = -\frac{4\pi b q_e}{\varepsilon_0 r} e^{-r/b} \left(r^3 + 4br^2 + 12b^2 r + 24b^3 + \left(24b^4 - \frac{96\pi a_1 b^5}{\varepsilon_0} \frac{1}{r} \right) \right).$$

Можно заключить, что облако электронов в атоме водорода, в основном своем состоянии, также является фаном и для его описания может быть использована фановая математическая модель.

Фановая модель системы зарядов различных знаков в точках и на поверхностях

В моделях, использующих фаны, нет понятия точечного заряда, а наличие заряда обуславливается присутствием особенностей определенного порядка у функции ε в

вырождающемся уравнении. Способ находить величину ε при наличии особенностей в точках, мы уже показали на предыдущих примерах.

Рассмотрим теперь методику нахождения величины ε для случая, когда ее особенности находятся как в точке, так и на поверхности. Для этого рассмотрим потенциал, удовлетворяющий уравнению

$$\Delta u = -\frac{4\pi q_e}{\varepsilon_0} r^2 (r_1 - r) e^{-r/b}. \quad (14)$$

В правой части этого уравнения стоит функция, изменяющая знак при переходе через значение $r = r_1$, то есть заряд имеет положительное значение при $r < r_1$ и отрицательное при $r > r_1$. Такое распределение имеет место, например в нейтроне (рис. 2) или в атоме водорода.

Найдем ε_n такое, чтобы оно имело особенности различного знака в начале координат и на сфере при $r = r_1$. При этом особенности у ε_n должны быть такого типа, чтобы оператор

$$\text{div}(\varepsilon_n \text{ grad } \bullet),$$

вычисленный от потенциала u , выбрасывал δ -функции, сосредоточенные в начале координат и на сфере $r = r_1$.

В силу центральной симметрии можно записать:

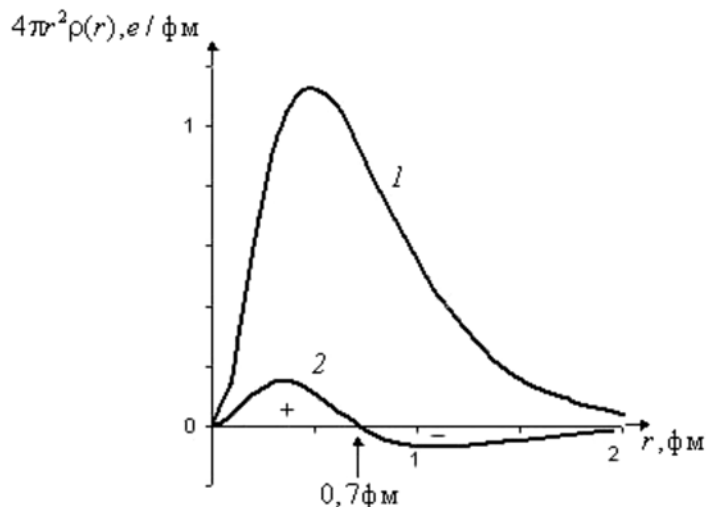


Рис. 2. Радиальные распределения плотности зарядов в протоне (1) и нейтроне (2); $\rho(r)$ — функция плотности заряда

$$(r^2 u_r)_r = -\frac{4\pi q_e}{\varepsilon_0} r^4 (r_1 - r) e^{-r/b},$$

откуда следует, что

$$u_r = -\frac{4\pi q_e}{\varepsilon_0} \left(r^{-2} \int r^4 (r_1 - r) e^{-r/b} dr - \frac{c_2}{r^2} \right).$$

Для исследования поведения u_r в начале координат, заменим под интегралом функцию $e^{-r/b}$ ее разложением в ряд Маклорена:

$$\begin{aligned} \int r^4 (r_1 - r) e^{-r/b} dr = & -\frac{1}{6b^2} r^8 + \left(\frac{r_1}{6b^2} - \frac{1}{3b} \right) r^7 + \\ & + \left(\frac{r_1}{6b} - \frac{11}{6} \right) r^6 + (-4b + r_1) r^5 + \\ & + (-5b^2 + r_1 b) r^4 + 120b^6 - 24r_1 b^5 + \dots \end{aligned}$$

Тогда справедливо выражение

$$\begin{aligned} u_r = & -\frac{4\pi q_e}{\varepsilon_0} \left(-\frac{r^6}{6b^2} + \left(\frac{r_1}{6b^2} - \frac{1}{3b} \right) r^5 + \right. \\ & + \left(\frac{r_1}{6b} - \frac{11}{6} \right) r^4 + (-4b + r_1) r^3 + \\ & \left. + (-5b^2 + r_1 b) r^2 + \frac{120b^6 - 24r_1 b^5}{r^2} - \frac{c_2}{r^2} \right). \end{aligned}$$

Если положить

$$c_2 = 120b^6 - 24r_1 b^5,$$

то имеем:

$$\begin{aligned} u_r = & -\frac{4\pi q_e}{\varepsilon_0} r^2 \left(-\frac{r^4}{6b^2} + \left(\frac{r_1}{6b^2} - \frac{1}{3b} \right) r^3 + \right. \\ & + \left(\frac{r_1}{6b} - \frac{11}{6} \right) r^2 + (-4b + r_1) r + (-5b^2 + r_1 b) \Big); \\ u = & -\frac{4\pi q_e}{\varepsilon_0} \left(-\frac{r^7}{42b^2} + \left(\frac{r_1}{36b^2} - \frac{1}{18b} \right) r^6 + \right. \\ & + \left(\frac{r_1}{30b} - \frac{11}{30} \right) 4r^5 + 3 \cdot \left(-b + \frac{r_1}{4} \right) r^4 + \\ & \left. + \frac{-5b^2 + r_1 b}{3} r^3 \right) + c. \end{aligned}$$

Таким образом, потенциал u_r имеет нуль второго порядка в начале координат, а для потенциала u будет характерно поведение вида (3) при $\beta = 4$.

Действительно, в точке начала координат имеем:

$$\begin{aligned} u \Big|_{r \rightarrow 0} & \sim -\frac{4\pi(-5b^2 + r_1 b)q_e}{3\varepsilon_0} r^3 + c; \\ u_r \Big|_{r \rightarrow 0} & \sim -\frac{4\pi(-5b^2 + r_1 b)q_e}{\varepsilon_0} r^2. \end{aligned} \quad (15)$$

Теперь рассмотрим уравнение

$$\operatorname{div}(\varepsilon_n \operatorname{grad} u) = 0 \quad (16)$$

вне начала координат и вне точки $r = r_1$. Найдем также функцию ε_n , при которой функция u удовлетворяет уравнению (16).

В силу центральной симметрии из уравнения (16) следует, что

$$\varepsilon_n = \frac{c_4}{r^2 u_r}$$

и, следовательно, в силу выражения (15) функция ε_n будет иметь особенность четвертого порядка в начале координат. Действительно,

$$\varepsilon_n \Big|_{r \rightarrow 0} = -\frac{c_4 \varepsilon_0}{4\pi(-5b^2 + r_1 b)} \cdot \frac{1}{r^4}.$$

Таким образом, величины ε и u будут удовлетворять условиям (2), (3) при $\beta = 4$, и, следовательно, будут давать вклад в правую часть уравнения, равный

$$4\pi \cdot c_4 \delta(0).$$

Рассмотрим теперь вклад в правую часть уравнения, определяемый поведением функции u при $r = r_1$. Поскольку уравнение (16) однородно, выберем ε_n следующим образом:

$$\varepsilon_n = \begin{cases} \frac{c_4}{r^2 u_r}, & r < r_1, \\ -\frac{c_4}{r^2 u_r}, & r > r_1. \end{cases} \quad (17)$$

Это естественно, так как ε_n отражает свойства пространства, обеспечивающие величину заряда, а условия склейки определяются на основе физической постановки задачи.

Воспользуемся определением оператора Лапласа в терминах пространств Соболева и обобщенных функций. Тогда, если ϕ — финитная функция на промежутке $[0, \infty]$, то имеем:



$$\begin{aligned}
 I_1 = \int \nabla(\varepsilon_n \nabla \phi) u dv &= 4\pi \int_0^{r_1 - \varepsilon_2} (r^2 \varepsilon_n \phi \cdot r)_r u dr + \\
 + 4\pi \int_{r_1 + \varepsilon_2}^{\infty} (r^2 \varepsilon_n \phi \cdot r)_r u dr &= 4\pi \int_0^{r_1 - \varepsilon_2} (r^2 \varepsilon_n \phi_r u)_r dr - \\
 - 4\pi \int_0^{r_1 - \varepsilon_2} (r^2 \varepsilon_n u_r \phi)_r dr &+ 4\pi \int_0^{r_1 - \varepsilon_2} (r^2 \varepsilon_n u_r)_r dr + \\
 + 4\pi \int_{r_1 + \varepsilon_2}^{\infty} (r^2 \varepsilon_n \phi_r u)_r dr &- 4\pi \int_{r_1 + \varepsilon_2}^{\infty} (r^2 \varepsilon_n u_r \phi)_r dr + \\
 + 4\pi \int_{r_1 + \varepsilon_2}^{\infty} (r^2 \varepsilon_n u_r)_r dr.
 \end{aligned}$$

Ввиду того, что функция u удовлетворяет уравнению (16), третий и шестой интегралы представления I_1 будут равны нулю. В этом случае

$$\begin{aligned}
 I_1 = 4\pi \int_0^{r_1 - \varepsilon_2} (r^2 \varepsilon_n \phi_r u)_r dr &- 4\pi \int_0^{r_1 - \varepsilon_2} (r^2 \varepsilon_n u_r \phi)_r dr + \\
 + 4\pi \int_{r_1 + \varepsilon_2}^{\infty} (r^2 \varepsilon_n \phi_r u)_r dr &- 4\pi \int_{r_1 + \varepsilon_2}^{\infty} (r^2 \varepsilon_n u_r \phi)_r dr.
 \end{aligned}$$

В силу финитности функции ϕ выражение принимает вид

$$I_1 = 4\pi(r^2 \varepsilon_n \phi_r u - r^2 \varepsilon_n u_r \phi) \Big|_{r_1 + \varepsilon_2}^{r_1 - \varepsilon_2}.$$

С учетом (17) можем записать I_1 как

$$\begin{aligned}
 I_1 = 4\pi(c_4 \phi_r \frac{u}{u_r} - c_4 \phi) \Big|_{r=r_1 - \varepsilon_2} &+ \\
 + 4\pi(c_4 \phi_r \frac{u}{u_r} - c_4 \phi) \Big|_{r=r_1 + \varepsilon_2}.
 \end{aligned}$$

Налагаем условие, согласно которому

$$u \Big|_{r=r_1} = 0.$$

Поскольку нуль в точке r_1 у функции u будет более высокого порядка, чем у функции u_r , справедливо равенство

$$\frac{u}{u_r} \Big|_{r=r_1} = 0.$$

Следовательно, переходя к пределу при $\varepsilon_2 \rightarrow 0$, получим:

$$I_1 = -8\pi \cdot c_4 \phi(r_1).$$

Таким образом, интеграл I_1 выбросил значение ϕ в точке r_1 , а это значит, что оператор будет выражаться как

$$\nabla(\varepsilon_n \nabla u) \Big|_{r=r_1} = 8\pi \cdot c_4 \delta(r_1).$$

Учитывая приведенные выше выкладки, получим следующее равенство:

$$\text{div}(\varepsilon_n \text{grad} u) = 4\pi c_4^+ \delta(0) - 8\pi c_4^- \delta(r_1).$$

Заключение

Сравнение результатов, полученных в данной статье, с представленными ранее и основанными на формуле (4), показывает, что в итоге проведенного исследования появляются новые возможности использования фановой модели. Так, можно дополнительно строить фановые модели облаков зарядов, расположенных в различных областях сред и объектов:

в сферическом слое;

в шаре с одним знаком заряда и с окружающим его сферическим слоем зарядов противоположного знака.

Во втором случае необходимо задавать особенности функции ε как в центре шара, так и на его поверхности.

Кроме того, важно отметить, что «электрическая фановая проницаемость» ε может быть функцией, зависящей от времени. В предлагаемой статье зависимость ε от времени не рассматривалась, однако авторами уже получена фановая модель квантовой точки, излучающей на частоте, зависящей от размеров квантовой точки и от материала, в котором она создана. Результаты расчетов совпадают с известными экспериментальными данными. Все это подтверждает необходимость дальнейшего расширения понятия фана.

Следует повториться, что при более сложных расчетных областях необходимо применять блочные численно-аналитические методы (BNAM), использующие в значительной степени аналитические выкладки и позволяющие численно-аналитически решать краевые задачи в наносредах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пашковский А.В., Пашковский В.И. Блочные численно-аналитические методы и новые математические модели в расчете силовых взаимодействий наночастиц // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2012. № 4 (158). С. 39–44.
2. Пашковский В.И. Фаны в атомном и наном мире, численно-аналитический метод СЭМ в расчетах полевых задач нанотехнологий // Творческие поиски ученых Израиля сегодня. Ежегодник. Ашкелон: Международный центр научных исследований и практики творчества, 2009. № 13. С. 92–95.
3. Pashkovsky V. Method of standard elements (SEM) in nanomaterials designing, measurements and nanobiological models. *ECASIA'09 book of abstracts. 13-th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis*. 18.10. 2009. Antalya, Turkey, pp. 55–56.
4. Пашковский В.И. Создание антител методами нанотехнологии // Творческие поиски ученых Израиля сегодня. Ежегодник. Ашкелон: Международный центр научных исследований и практики творчества, 2010. № 14. С. 91–93.
5. Пашковский В.И. BNAM-блочные численно-аналитические методы [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://sites.google.com/site/bnamapl/home> (дата обращения: 15.06.13).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАШКОВСКИЙ Александр Владимирович — кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем, электропривода и автоматики Невинномысского технологического института (филиал ФГБОУ ВПО Северо-Кавказского федерального университета), Россия.
357108, Россия, Ставропольский край, г. Невинномысск, ул. Гагарина, 1
alecsandr_607@rambler.ru

ПАШКОВСКИЙ Владимир Изефович — кандидат физико-математических наук, президент компьютерной лаборатории сверхсложных прикладных задач (BNAMapl), г. Ашдод, Израиль.
77336, Израиль, г. Ашдод, ул. Эвен Гвириоль, 7
pp-vladimir@013.net.il

Pashkovsky A.V., Pashkovsky V.I. PHAN MODELS OF ELECTRIC FIELD OF NUCLEONS AND ELECTRONS.

In this article, we construct a model which describes the potential of electric charges distribution using degenerate partial differential equations. It has been proved that the potential of the electron cloud in the hydrogen atom being in the ground state and a hydrogen atom itself can be described by such equations. This description obviates the need to use the notion of a point charge. The medium properties are modeled by the equation coefficients, which can turn into infinity, solutions being sought in a certain class of functions. We name the constructed models “phan models”. We put forward a construction technique of phan models for different media containing divided charges, such as colloids and biological media. The models may be used in suprachemistry to calculate force interactions between the particles. Phan models are close to the Maxwell ones. Their applications are promising for cases when the quantum-mechanical calculations are too complex and conventional electromechanical models are not able to reflect accurately the medium properties. The examples given show the possibilities for the further development of phan theory.

PHAN, PHAN MODEL, NUCLEON, ELECTRON, HYDROGEN ATOM, POINT CHARGE, POTENTIAL, DEGENERATE PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATION, COLLOIDAL SOLUTION, SUPRACHEMISTRY.

REFERENCES

1. Pashkovsky A.V., Pashkovsky V.I. Blochnye chislenno-analiticheskie metody i novye matematicheskie modeli v raschete silovykh vzaimodeystviy nanochastits. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2012, No. 4 (158), pp. 39–44. (rus)
2. Pashkovsky V.I. Fany v atomnom i nanomire, chislenno-analiticheskij metod SEM v raschetakh polevykh zadach nanotekhnologij. *Tvorcheskie poiski uchenykh Izrailya segodnya*, Ezhegodnik. Ashkelon, Mezhdunarodnyj tsentr nauchnykh issledovanij i praktiki tvorchestva, 2009, № 13, pp. 92–95. (rus)
3. Pashkovsky V. Method of standard elements (SEM) in nanomaterials designing, measurements and nanobiological models. *ECASIA'09 book of*



abstracts. 13-th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis. 18.10.2009. Antalya-Turkey, 2009, pp.55- 56.

4. **Pashkovsky V.I.** Sozdanie antitel metodami nanotekhnologii. *Tvorcheskie poiski uchenykh Izrailya segodnya*. Ezhegodnik, Ashkelon, Mezhdunarodnyj

tsentr nauchnykh issledovanij i praktiki tvorchestva, 2010. No. 14, pp. 91-93. (rus)

5. **Pashkovsky V.I.** BNAM-blochnye chislenno-analiticheskie metody. Available at: <http://sites.google.com/site/bnamapl/home> (dataobrashcheniya: 15.06.13). (rus)

THE AUTHORS

PASHKOVSKY Alexander V.

Nevinnomyssk Institute of Technology (branch of North-Caucasus Federal University)

1 Gagarina St., Nevinnomyssk, 357108, Russia

alecsandr_607@rambler.ru

PASHKOVSKY Vladimir I.

Computing laboratory of super-difficult applied problems

7 Even Gvirol St., Ashdod, 77336, Israel

pp-vladimir@013.net.il

УДК 537.86

А.А. Сочава, А.С. Черепанов, Н.Н. Зернов, А.А. Битюков

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

XXVII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ СТУДЕНТОВ-РАДИОФИЗИКОВ

Представлена информация о XVII Всероссийской научной конференции студентов-радиофизиков, которая прошла 22 – 23 апреля 2014 года в Петродворце в учебном комплексе Санкт-Петербургского государственного университета.

НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ, СТУДЕНТ-РАДИОФИЗИК, НАУЧНЫЙ ДОКЛАД, ДИПЛОМ УЧАСТНИКА КОНФЕРЕНЦИИ.

Очередная, уже семнадцатая по счету Всероссийская научная конференция студентов-радиофизиков, организуемая Санкт-Петербургским государственным университетом (СПбГУ) и Санкт-Петербургским государственным политехническим университетом (СПбГПУ), прошла 22 – 23 апреля 2014 года в Петродворце на базе физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета. С этого года время проведения конференции перенесено с декабря на конец апреля с тем, чтобы дать возможность студентам выпускных курсов, будущим бакалаврам и магистрам, представить уже законченные исследования. К сожалению, ввиду указанных изменений конференция в 2013 году не проводилась.

В конференции 2014 года приняли участие около 40 студентов и аспирантов, а также преподаватели ряда вузов Санкт-Петербурга. Количество докладов остается примерно постоянным уже несколько лет, и на этот раз их было 35.

Перечислим российские университеты, которые прислали своих докладчиков: Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций, Южный федеральный университет, Сыктывкарский

государственный университет, Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики (МИРЭА), Самарский государственный университет, Владимирский государственный университет.

Наибольшее количество докладов представили СПбГУ (9) и СПбГПУ (5).

Тематика докладов, представленных на конференции, отражает многие направления современной радиофизики. Это теория колебаний, излучение и распространение электромагнитных волн, электронные устройства и системы, квантовая радиофизика, а также физические явления, которые исследуются радиофизическими методами.

По традиции заседания проводятся последовательно, что дает возможность студентам познакомиться с докладами других направлений и расширить свой кругозор в области радиофизики. Общий уровень докладов в этом году оказался довольно высоким, что вызвало интерес и множество вопросов, а также поставило перед жюри конференции сложную задачу.

По окончании конференции жюри, в которое вошли члены оргкомитета, после долгих обсуждений подвело итоги, назвав лауреатов. Было решено поставить на первое место и наградить дипломами первой степе-

ни сразу два доклада: студентов И.В. Агеева (6-й курс, кафедра физики твердого тела СПбГУ) и Е.А. Данилогорской (6-й курс, кафедра радиофизики СПбГУ).

В докладе И.В. Агеева «Краткий обзор результатов высокотемпературных измерений интенсивности рассеяния электромагнитного излучения в стеклах и их расплавах» рассматривается рассеяние видимого света, и на этой основе изучаются флуктуационные явления в стеклах и их расплавах. В свою очередь, понимание сущности флуктуационных процессов, происходящих в температурном интервале стеклования, необходимо для дальнейшего развития теории стеклообразного состояния. Совокупность экспериментальных результатов по поведению интенсивности рассеяния электромагнитного излучения в интервале стеклования, полученную в последние десятилетия, сложно интерпретировать в рамках существующих представлений. Поведение интенсивности рассеянного света характеризуется существованием гистерезиса ее температурной зависимости, отличительная особенность которой — это образова-

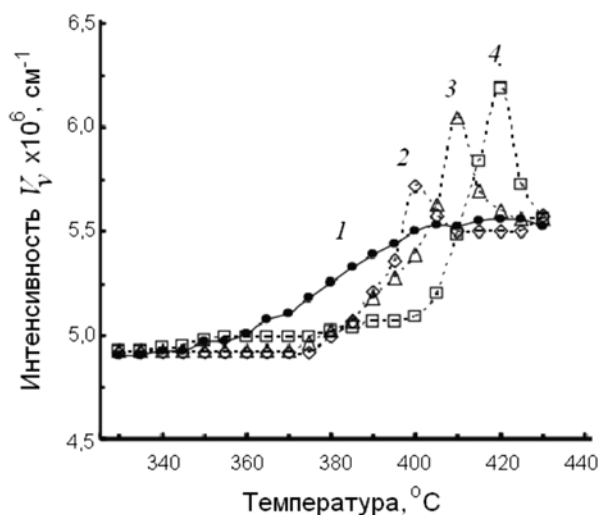


Рис. 1. Температурные зависимости поляризованной V_v -составляющей света, рассеянного фосфатным стеклом (9,4 мол.% Na_2O -57,7 мол.% ZnO -32,9 мол.% P_2O_5) в интервале стеклования при его охлаждении со скоростью 10 °C/мин (кривая 1) и последующем нагреве с разными скоростями, °C/мин: 10 (2), 30 (3) и 50 (4)

ние максимума в режиме нагрева стекла через интервал стеклования (рис. 1).

В результате исследований, выполненных методом рассеяния видимого света для целого ряда оксидных стекол, было установлено, что такой вид зависимости интенсивности рассеяния от температуры в интервале стеклования носит универсальный характер.

Работа студентки Е.А. Данилогорской «О вкладе горизонтальных градиентов в ошибки измерения координат местоположения объектов глобальными навигационными спутниковыми системами» находится в русле традиционного направления исследований, проводимых на кафедре радиофизики СПбГУ и относящихся к распространению волн и свойствам ионосферы.

Существующие подходы к определению ошибки измерения дальности, возникающей из-за присутствия неоднородной ионосферы, базируются на решении геометро-оптических уравнений с использованием теории возмущений по прямым лучам, где малым параметром является квадрат отношения плазменной частоты к рабочей. В представленной работе предлагается явная процедура суммирования всех частотных эффектов в виде точного решения для сферически-слоистой среды, а горизонтальные градиенты электронной плотности ионосферы учитываются в рамках теории возмущений.

Два диплома второй степени присуждены докладу студента А.С. Мязина (4-й курс, кафедра радиофизики СПбГПУ) и коллективному докладу студенток Е.Г. Курдюковой (3-й курс, кафедра радиофизики и электроники СыктГУ) и Е.С. Пилипец (5-й курс, та же кафедра). Эти доклады хотя и подготовлены по материалам бакалаврских работ, в том числе будущих магистерских, но выделяются из прочих высоким научным уровнем, что и оценило жюри.

Презентация работы студента А.С. Мязина «Повышение точности измерения электрических полей при помощи интегрально-оптического волоконного поляризационного датчика» была посвящена исследованиям в области свойств и применений волоконно-оптических датчиков, проводи-

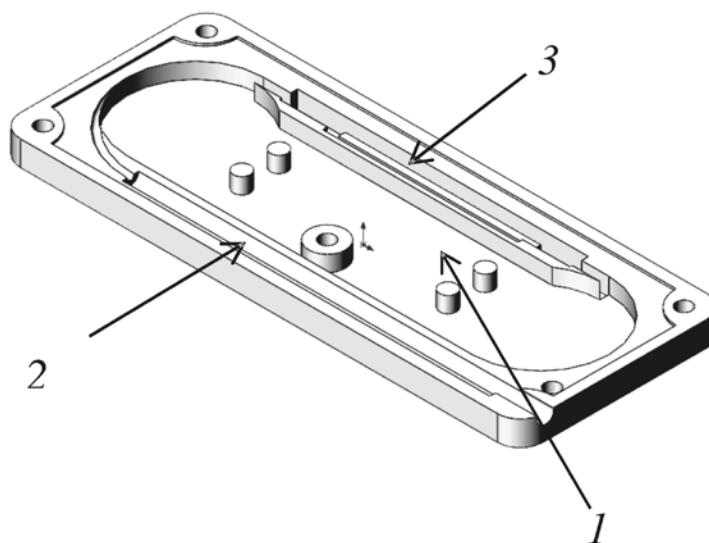


Рис. 2. Предлагаемая конструкция волоконно-оптического поляризационного датчика:
1 — объем для укладки волокна с заданным радиусом, 2 — канавка для кембрика
с подводящим и отводящим оптическим волокном, 3 — разъем для чувствительного элемента

мых в лаборатории профессора О.И. Котова на кафедре радиофизики СПбГПУ.

В докладе рассмотрены методы минимизации погрешностей, возникающих при измерении напряженности электрических полей с помощью волоконно-оптического поляризационного датчика (рис. 2). Приведены результаты теоретического анализа оптической схемы прибора, измерения поляризационных характеристик входящих в нее элементов, практические результаты измерения полей, полученные на созданном лабораторном макете. Эксперименты демонстрируют возможности существенного повышения точности измерений на основе результатов проведенных исследований.

Доклад студенток Е.Г. Курдюковой, Е.С. Пилипец «Моделирование нелинейной динамики двух взаимодействующих магнитных диполей» относится к области теории колебаний. Работа посвящена исследованию нелинейной радиочастотной динамики системы двух взаимодействующих изотропных магнитных частиц в форме эллипсоидов вращения. В результате численного эксперимента были построены временные зависимости и прецессионные портреты колебаний намагниченности. Рассмотрены случаи слабого и сильно-

го взаимодействий между частицами. При слабом магнитном взаимодействии обнаружено семь различных режимов колебаний векторов намагниченности частиц, в том числе автоколебательный и хаотический режимы. Для случая сильного магнитного взаимодействия было обнаружено около десяти различных колебательных режимов. Определены также области существования различных режимов магнитных колебаний в зависимости от частоты и амплитуды переменного поля для случаев слабого и сильного магнитных взаимодействий частиц. Получены зависимости времени релаксации магнитных колебаний от амплитуды переменного поля и зависимость периода магнитных колебаний частиц от частоты переменного магнитного поля.

Дипломами третьей степени отмечены доклады студентов А.А. Гофмана (5-й курс, кафедра радиофизики СПбГУ), С.В. Крутиева (6-й курс, кафедра прикладной электродинамики и компьютерного моделирования ЮФУ) и А.А. Попов (6-й курс, кафедра радиофизики СПбГПУ)

В работе А.А. Гофмана «Солнечные микровсплески» рассмотрены микровсплески в дециметровом диапазоне радиоизлучения активных областей Солнца. Исследование

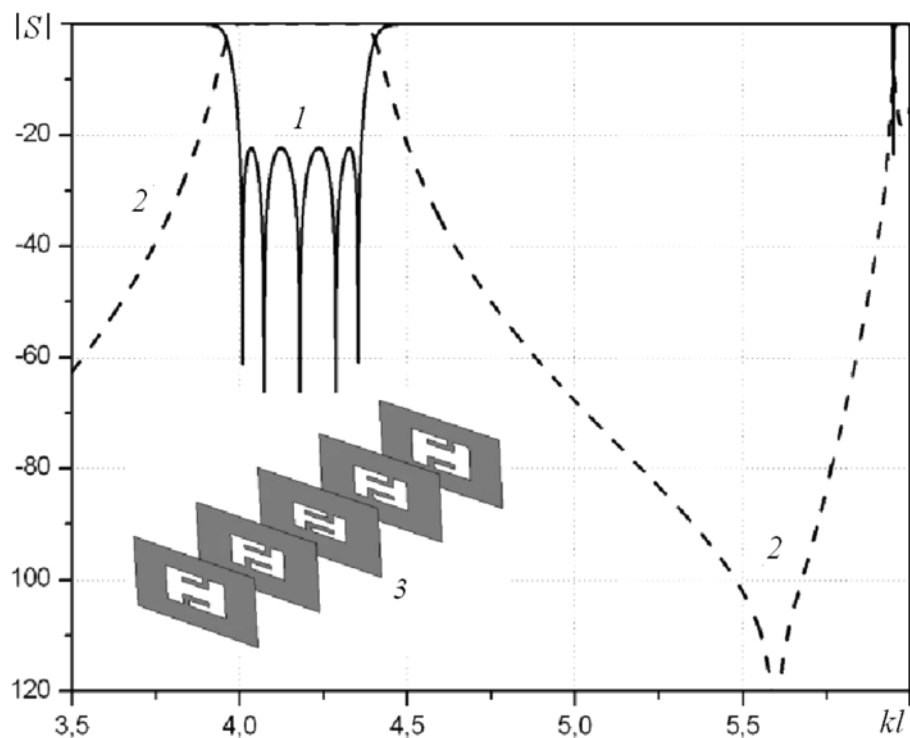


Рис. 3. Характеристики двух модулей матрицы рассеяния фильтров: S_{11} (1) и S_{21} (2). Представлена структура фильтра (3)

представляет собой как теоретическое описание механизма генерации излучения, так и анализ экспериментальных данных, полученных с использованием радиотелескопа РАТАН-600. В результате была определена длительность отдельного всплеска и построен частотный спектр излучения. Существование явления микровсплесков было подтверждено анализом статистических характеристик записей радиотелескопа РАТАН-600. Для описания обнаруженного явления были рассмотрены плазменный и гиротронный механизмы генерации излучения при различных видах распределения энергичных электронов по скоростям. Определен ряд характеристик области генерации микровсплесков на основе плазменного механизма генерации радиоволн.

Доклад С.В. Крутиева «Волноводный полосно-пропускающий фильтр на сложных резонансных диафрагмах» относится к практической задаче синтеза резонаторных полосно-пропускающих фильтров, связанной с радиоэлектронной темати-

кой конференции. Приводятся результаты электродинамического анализа одиночных резонансных диафрагм в виде прямоугольного окна с двумя L -образными гребнями в прямоугольном волноводе, а также результаты синтеза полосно-пропускающих фильтров на их основе. Электромагнитные поля и критические волновые числа прямоугольного волновода с двумя L -гребнями, образующего апертуру диафрагм, определены методом частичных областей с учетом особенности поля на ребре.

Предложенная апертура диафрагмы позволяет не только получать более высокую добротность резонаторов, по сравнению с обычными прямоугольными окнами, но и обеспечивать уровни затухания, рекордно низкие для данного типа фильтров в полосе заграждения, благодаря наличию антирезонанса в переходной характеристике фильтра (рис. 3).

В докладе студента А.А. Попова (6-й курс, кафедра радиофизики СПбГПУ) «Исследование возможностей и особен-

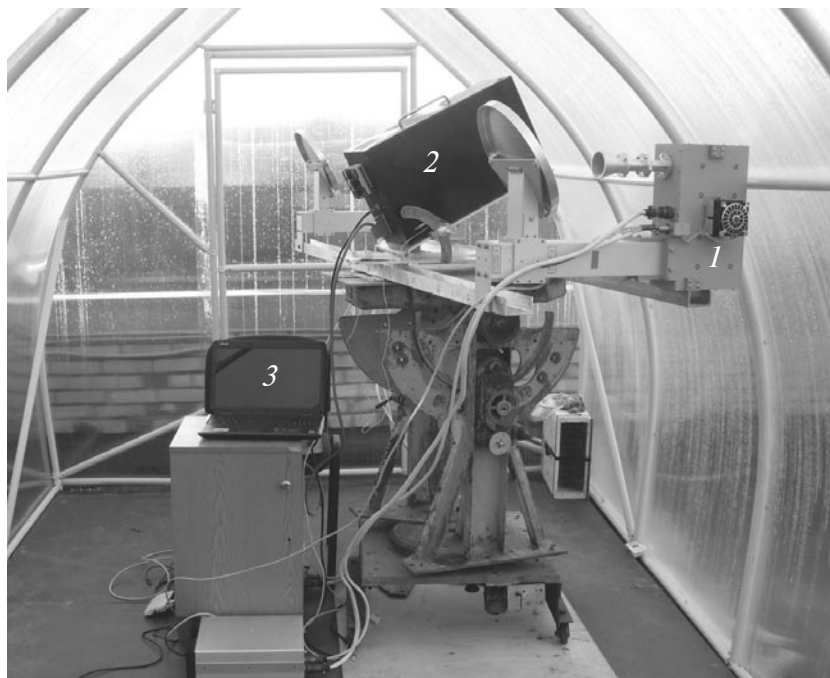


Рис. 4. Внешний вид радиометрического комплекса:
1 – блок радиометра с антенной, 2 – регистратор, 3 – управляющий компьютер

ности работы микроволнового спектрометра, предназначенного для дистанционного мониторинга влажностных характеристик атмосферы» рассматриваются теоретические основы и способ построения СВЧ радиометрического комплекса для анализа интегрального влагозапаса в атмосфере. Эту работу также можно отнести к тематике анализа и синтеза радиоэлектронных устройств СВЧ. В ней проводится исследование возможностей микроволнового спектрометра (рис. 4), предназначенного для дистанционного мониторинга влажностных характеристик атмосферы и позволяющего измерять радиояркостные температуры атмосферы в широком диапазоне частот.

Были получены регрессионные зависи-

мости между радиояркостной температурой атмосферы в зените и интегральными влажностными характеристиками атмосферы для разнообразного набора метеоусловий. Проведено сравнение с известными ранее результатами российских и зарубежных исследователей для отдельных точек диапазона частот.

Помимо дипломов всем студентам были выданы грамоты участников конференции.

В заключение необходимо отметить, что в этом году всероссийская конференция получила статус «конференции с международным участием» благодаря тому, что на ней были представлены доклады иностранных студентов.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

СОЧАВА Александр Андреевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
sochava@mail.ru

ЧЕРЕПАНОВ Андрей Сергеевич — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой радиофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
ascherspb@mail.ru

ЗЕРНОВ Николай Николаевич — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой радиопластики Санкт-Петербургского государственного университета.

198504, Россия, г. Санкт-Петербург, Петропавров, Ульяновская ул., 1
zernov@paloma.spbu.ru

БИТЮКОВ Александр Анатольевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиопластики Санкт-Петербургского государственного университета.

198504, Россия, г. Санкт-Петербург, Петропавров, Ульяновская ул., 1
abityukov@mail.ru

Sochava A.A., Cherepanov A.S., Zernov N.N., Bityukov A.A. THE 17th ALL-RUSSIAN SCIENTIFIC CONFERENCE OF RUSSIAN UNDERGRADUATES SPECIALIZING IN RADIOPHYSICS.

The paper discusses the 17th All-Russian scientific conference of undergraduates specializing in radiophysics, which took place on April, 22–23, 2014 in Petrodvoretz in the educational center of Saint Petersburg State University (SPbSU). About forty undergraduates and postgraduates and lecturers from Saint Petersburg’s institutions of higher education took part in the conference. The most number of reports were presented by SPbSU (9) and SPbSPU (5), and their total number was 35.

The reports presented were written on a diverse range of subject matter, such as vibration theory, radiation and propagation of electromagnetic waves, electronic devices and systems, quantum radiophysics, and physical phenomena studied by radiophysical methods. Two reports from SPbSU got the 1st degree awards: (i) I.V. Ageev’s “The short review of results of high-temperature measurements of electromagnetic radiation scattering intensity in glasses and their melts”; (ii) E.A. Danilogorskaya’s “On the horizontal gradients contribution in errors of object positions establishment with global navigation satellite systems”.

SCIENTIFIC CONFERENCE, UNDERGRADUATE SPECIALIZING IN RADIOPHYSICS, SCIENTIFIC REPORT, AWARD FOR CONFERENCE.

THE AUTHORS

SOCHAVA Alexander A.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
sochava@mail.ru

CHEREPANOV Andrey S.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
ascherspb@mail.ru

ZERNOV Nikolay N.

St. Petersburg State University,
1 Ulyanovskaya St., St. Petersburg, Petrodvoretz, 198504, Russia
zernov@paloma.spbu.ru

BITYUKOV Alexander A.

St. Petersburg State University,
1 Ulyanovskaya St., St. Petersburg, Petrodvoretz, 198504, Russia
abityukov@mail.ru

К 115-летию со дня основания СПбГПУ

УДК 51:378.662(470.23-25)

В.И. Антонов, Ю.С. Васильев

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

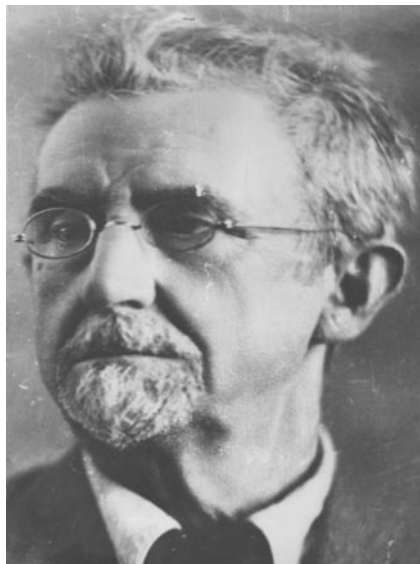
КАФЕДРА ВЫСШЕЙ МАТЕМАТИКИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ИСТОРИЯ И СОВРЕМЕННОСТЬ

В статье изложены основные этапы становления и развития кафедры высшей математики СПбГПУ — одной из крупнейших в вузах России. Большое внимание уделено истории развития Политехнического института, неотъемлемой частью которого с самого его основания является кафедра высшей математики. Наряду с историей большое внимание уделено современному состоянию математического образования в Политехническом университете, а также задачам, стоящим перед коллективом кафедры в настоящее время.

ВЫСШАЯ МАТЕМАТИКА, ПРОФЕССОР, КАФЕДРА, УЧЕНЫЙ, АЛГЕБРА, ТЕОРИЯ ОПТИМИЗАЦИИ, МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ.

Содня основания Санкт-Петербургского политехнического института одним из важнейших предметов была высшая математика. Высочайшее соизволение Императора Николая II о создании Политехнического института последовало 19 февраля 1899 года. Эту дату принято считать днем основания Политехнического института. И уже 23 февраля была образована «Особая строительная комиссия по сооружению зданий Политехнического института в г. Санкт-Петербурге». Разработка положения и штатов Политехнического института проводилась с 21 августа 1900 года при учебном отделе министерства финансов особой «Комиссией по выработке положений о Политехническом институте в Санкт-Петербурге в составе отделений коммерческого, электромеханического, кораблестроительного, металлургического» под председательством инженер-генерала Н.П. Петрова. 22 августа 1900 года комиссия была разделена на две части: одна, под председательством В.И. Ковалевского, занималась коммерческим отделением, а другая, под председательством В.Л. Кирпичёва, — техническими отделени-

ями. По результатам работы комиссии министром финансов была создана докладная записка «Об учреждении Политехнического института в Санкт-Петербурге» от 23 ноября 1900 года за № 31403, которая и была внесена в Госсовет. Законопроект и пояснительная записка к нему были не только представлены в Госсовет, но и разосланы в различные ведомства, которые были в этом заинтересованы. В начале 1901 года от ведомств в министерство финансов поступили замечания и предложения по предлагаемому законопроекту. На эти замечания министр финансов ответил запиской от 4 мая 1901 года за № 5459, которая была разослана членам Госсовета. В конце 1901 года был создан временный орган «Совещание г.г. директора и деканов Санкт-Петербургского политехнического института», утвержденный министром финансов. Только 19 октября 1901 года Госсовет начал рассматривать представление министра финансов об учреждении Политехнического института в Санкт-Петербурге. После длительного обсуждения 4 февраля 1902 года Император утвердил заключение Госсовета



Иван Иванович Иванов (1862 – 1939)

об учреждении Политехнического института в Санкт-Петербурге, и затем 2 мая 1902 года Император Николай II на документе «Положение Санкт-Петербургского политехнического института и его штат» написал: «Быть по сему».

Высшая математика была одной из первых дисциплин, преподаваемых во вновь открытом институте. Первым ординарным профессором по кафедре математики с 1902 вплоть до 1935 года был Иван Иванович Иванов. Экстраординарным профессором по кафедре математики (также с 1902 года) был Виктор Иванович (Виктор Эмерик-Ян) Станевич; он работал в институте до 1919 года включительно. Распределение преподавания высшей математики между И.И. Ивановым и В.И. Станевичем было произведено на первом Соединенном собрании технических отделений 29 мая 1902 года. В сентябре 1903 года на должность штатного преподавателя по кафедре математики был зачислен Алексей Алексеевич Адамов (экстраординарный профессор с 1908 года); он работал в вузе по 1927 год. Лекции по математике читали все трое: в первых двух семестрах — параллельно И.И. Иванов (аналитическая геометрия) и В.И. Станевич (анализ бесконечно малых), а затем — А.А. Адамов.

В то время курс высшей математики был общим для всех технических отделений. Иван Иванович Иванов (1862 – 1939) руководил коллективом математиков вплоть до 1935 года. В 1924 году его избрали в члены-корреспонденты АН СССР, а в 1933 году ему было присвоено почетное звание заслуженного деятеля науки РСФСР.

И.И. Иванов — один из крупнейших математиков своего времени, ему принадлежит около 70 научных публикаций, большая часть которых связана с теорией чисел. Значительная часть работ И.И. Иванова посвящена изучению некоторых тождеств и неравенств, стоящих в связи с теорией степенных вычетов. Он с полным правом может быть отнесен к той когорте ученых, которая создавала мировую славу русской науке. Работы И.И. Иванова уже своей тематикой прокладывали путь дальнейшим успехам отечественной математики.

Профессор А.А. Адамов преподавал математику вплоть до своей кончины в 1927 году. В 1920-е гг. с участием профессора А.А. Адамова и под редакцией профессора Н.М. Гюнтера был издан «Сборник задач по высшей математике», выдержавший 13 переизданий в течение полувека.

Существенное влияние на развитие кафедры оказал видный ученый и педагог Иван Матвеевич Виноградов (1891 – 1983), работавший здесь с 1920 года. Он окончил Санкт-Петербургский университет в 1914 году, стал впоследствии действительным членом АН СССР (с 1929 года), почетным членом пятнадцати иностранных академий и научных обществ, дважды Героем Социалистического Труда, лауреатом Ленинской премии. Основные работы И.М. Виноградова, относящиеся к области использования метода оценок тригонометрических сумм в теории чисел, который был им создан в 1934 году, заслужили высокую оценку. Благодаря этому методу ему удалось впервые (1937) решить знаменитую тернарную проблему Гольдбаха.

Член-корреспондент АН СССР, заслуженный деятель науки РСФСР Николай Максимович Гюнтер (1871 – 1941) пришел

в коллектив в 1926 году. Этот ученый выдвигал оригинальные идеи в своих трудах по математической физике, публикация которых началась в 1923 году. Большой цикл образуют его работы по гидродинамике идеальной жидкости, в связи с которыми им были проведены исследования по классической теории потенциала.

Профессор Родион Осиевич Кузьмин (1891 — 1949), член-корреспондент АН СССР с 1946 года, преподавал математику в институте с 1922 года, а заведовал кафедрой математики в 1945–1949 гг. Научное наследие Р.О. Кузьмина весьма разнообразно: труды по алгебре, теории чисел, теории вероятностей, конструктивной теории функций, теории упругости. В работе «Об одном арифметическом свойстве алгебраических функций» (1927) он предложил простое доказательство знаменитой теоремы Гильберта.

Профессор Александр Яковлевич Билибин (1879 — 1935), будучи доцентом, а затем профессором, преподавал математику в институте в 1924 — 1930 гг., затем с 1930 года — в Ленинградском машиностроительном институте, а потом в Ленинградском индустриальном институте.

Профессор Сергей Иванович Амосов (1891 — 1969) работал на кафедре в 1928 — 1969 гг., а руководил ею в 1949 — 1951 гг. Его научные интересы распространялись на область прикладной математики. Так, исследуя теплопроводность в процессе сварки, он решил плоскую задачу теплопроводности при подвижном источнике тепла. Кроме того, он предложил метод решения некоторых сложных трансцендентных уравнений с эллиптическими интегралами. Не одно поколение выпускников института помнит его как опытного лектора и талантливого педагога.

Профессор Иван Александрович Лаппо-Данилевский (1896 — 1931), член-корреспондент АН СССР с 1931 года, пришел на кафедру в 1929 году. В конце 1920-х гг. им был опубликован цикл работ по аналитической теории систем линейных дифференциальных уравнений. Для этого он

разработал и применил теорию функций от матриц, которая теперь применяется математиками во всем мире.

В соответствии с приказом ВСНХ СССР от 30 июня 1930 года, Ленинградский политехнический институт им. М.И. Калинина был ликвидирован. В начале 1930-х гг. в отраслевых вузах стали создаваться кафедры современного типа, в том числе и кафедры высшей математики, которые возглавили видные ученые: в Ленинградском металлургическом институте — академик АН СССР И.М. Виноградов, в Ленинградском электромеханическом — член-корреспондент АН СССР И.И. Иванов, в Ленинградском гидротехническом — профессор Р.О. Кузьмин, в Ленинградском физико-механическом — профессор А.Ф. Гаврилов, в Ленинградском машиностроительном — профессор Д.Л. Гавра, во Всесоюзном котлотурбинном институте — профессор Н.Н. Семенов (математик).

В 1934 году было проведено объединение отраслевых институтов в Ленинградский индустриальный институт. С 1935 года заведующим кафедрой стал профессор Сергей Натанович Бернштейн (1880 — 1968), действительный член АН СССР с 1929 года; он руководил кафедрой до 1941 года. Решив в 1903 году девятнадцатую, а в 1908 году двадцатую проблемы Гильберта, он смело вошел в науку. За решение девятнадцатой проблемы ему была присуждена степень доктора наук. Значительная часть его исследований посвящена теории функций. Он первый построил аксиоматику теории вероятностей и получил общие результаты по предельным теоремам для зависимых и независимых случайных величин.

1934 — 1941 гг. — это период наибольших научных и педагогических успехов кафедры. Именно в это время здесь работала настоящая плеяда талантливейших ученых, таких как С.Н. Бернштейн, И.И. Иванов, Р.О. Кузьмин, Н.М. Гюнтер, Н.Н. Гернет, М.Л. Франк, С.И. Амосов. По-настоящему



Н.М. Гюнтер (1871 – 1941)



Р.О. Кузьмин (1891 – 1949)



Н.Н. Гернет (1877– 1943)



С.Н. Бернштейн (1880 – 1968)



С.И. Амосов (1891 – 1969)



Д.С. Горшков (1916 – 1978)

одержимые наукой, они создавали вокруг себя атмосферу творчества и взаимопонимания.

Профессор Надежда Николаевна Гернет (1877 – 1943) в 1898 году окончила Высшие женские (Бестужевские) курсы (г. Санкт-Петербург), после чего продолжала заниматься математикой в Геттингенском университете под руководством великого Гильберта. В 1901 году она защитила диссертацию на степень доктора «с высшей похвалой», с 1901 года преподавала на Высших женских курсах, причем после защиты магистерской диссертации в 1915 году – в должности профессора. Это была вторая женщина-математик (после С.В.

Ковалевской), получившая ученую степень в русском университете. Она начала работу на кафедре в 1930 году, и затем работала вплоть до гибели от голода в 1943 году в блокадном Ленинграде. Некоторые научные результаты, полученные Н.Н. Гернет, вошли в учебники вариационного исчисления.

Профессор Михаил Людвигович Франк (1878 – 1942) работал на кафедре с 1930 по 1941 год. Его главные труды относятся к двум областям: геометрии и прикладной математике. Из геометрических работ на первое место следует поставить его оригинальное исследование об односторонних поверхностях, о котором он докладывал на



Сотрудники кафедры высшей математики во главе с академиком С.Н. Бернштейном (третий справа в первом ряду). Фото 1939 года

съезде математиков в 1934 году.

В 1930-е гг. на кафедре трудился ученик Н.М. Гюнтера, профессор Николай Павлович Еругин (1907 – 1990), ставший впоследствии действительным членом АН БССР. Успех его работ по теории дифференциальных уравнений был обеспечен соединением метода Лаппо-Данилевского, которым он свободно владел, с идеями А.М. Ляпунова, что позволило ему создать общую теорию приводимых систем. Работы Н.П. Еругина обеспечили также существенный прогресс качественной теории дифференциальных уравнений и теорию устойчивости.

Значительный вклад в развитие математических наук и преподавание внесли профессор Е.В. Вороновская (1898 – 1972), А.И. Попов (1899 – 1973), В.М. Филиппов (1876 – 1941), Я.С. Безикович (1886 – 1958), Б.М. Коялович (1867 – 1941), Н.Н. Лебедев (1911 – 1994).

Годы Великой Отечественной войны

представляют собой трагическую страницу в истории кафедры. Многие сотрудники ушли на фронт. Среди них был доцент К.У. Шахно (1909 – 1995), работавший на кафедре с 1930 по 1984 год, автор тринадцати учебных пособий по элементарной и высшей математике. Погибли во время блокады в Ленинграде М.А. Гельбке, Н.Н. Гернет, М.С. Елецкий, В.И. Никонов, часть сотрудников кафедры эвакуировались вместе с институтом в Пятигорск, затем в Ташкент, часть не выдержала суровых военных испытаний. Талантливые математики Т.Н. Блинчиков и Н.А. Розенсон были расстреляны немцами в Пятигорске.

Непосредственно после реэвакуации кафедрой заведовал Р.О. Кузьмин, которого затем сменил С.И. Амосов. С 1952 по 1954 год кафедрой заведовал профессор Г.И. Джанелидзе (1916 – 1964). Его научная работа относится к теориям колебаний, упругости и пластичности.



Заведующий
кафедрой высшей математики СПбГУ,
профессор Валерий Иванович Антонов.
Фото 2010 года

С 1945 по 1974 год на кафедре высшей математики работал Дмитрий Сергеевич Горшков (1916 — 1978), который руководил ею с 1954 по 1974 год. После ранения на фронте и длительного лечения он возвращается в Казанский университет, оканчивает его и поступает в аспирантуру Ленинградского отделения Математического института к профессору Д.К. Фаддееву. В 1954 году Д.С. Горшков защитил кандидатскую диссертацию в ЛГУ, однако ученый совет рекомендовал ее как докторскую; в 1957 году ему была присвоена ученая степень доктора физико-математических наук, в 1963 году — ученое звание профессора. Из многих глубоких работ Дмитрия Сергеевича наиболее замечательными являются его исследования знаменитой задачи Маркова о спектре арифметических минимумов неопределенных бинарных квадратичных форм с вещественными коэффициентами.

Многолетняя педагогическая деятельность Д.С. Горшкова разнообразна и плодотворна. Он был сторонником преподавания математики на высоком уровне строгости. Целью курса он считал создание у учащегося определенного уровня математического развития и боролся против утилитарного подхода к высшей математике как к предмету, дающему сумму фактов и

умений. Большая заслуга Дмитрия Сергеевича — это предпринятая по его инициативе коренная переработка действовавших в ЛПИ программ по высшей математике, необходимость которой диктовало время и новые задачи науки и техники.

В период 1945 — 1959 гг. кафедра активно трудилась над переработкой и новыми изданиями знаменитого трехтомного сборника задач по высшей математике, впервые опубликованного в 1911 году под редакцией Н.М. Гюнтера. В ряду его первых десяти составителей было трое политехников: А.А. Адамов, Н.М. Гюнтер, А.А. Фридман. В дальнейшем в число его авторов (в связи с расширением тематики) добавились политехники Р.О. Кузьмин, С.Н. Бернштейн, С.И. Амосов, Н.Н. Гернет. После войны под руководством Р.О. Кузьмина, Г.И. Джанелидзе, С.И. Амосова над переработкой трудилась целая бригада преподавателей кафедры из 15 человек. Последнее (четырнадцатое) издание вышло в 1959 году и было приспособлено для нужд вузов.

Некоторое время (с 1972 по 1985 год) кафедра высшей математики была разделена на две: № 1 и № 2. Заведовали ими профессора А.П. Аксенов, Д.С. Горшков, И.С. Сребрянский, И.Ю. Рыжаков, В.М. Калинин. После объединения в 1985 году кафедрой заведовал профессор Е.С. Озеров, а затем (с 1987 по 2003 год) — профессор Ю.А. Хватов. С 2003 года кафедрой заведует доктор наук, профессор В.И. Антонов.

В соответствии с общей концепцией деятельности физико-механического факультета, направленной на развитие современных средств организации исследований, в 1962 году была создана кафедра вычислительной математики. Ее создание было определено началом интенсивного распространения в СССР электронной вычислительной техники и возросшим интересом ученых и инженеров к ее использованию в технических расчетах. Эти же обстоятельства определили научные интересы вновь созданного коллектива, который с тех пор можно рассматривать как родственный ка-

федре высшей математики.

Организатором и первым заведующим кафедрой был молодой талантливый воспитанник школы Анатолия Исааковича Лурье — доктор физико-математических наук, профессор Владимир Александрович Троицкий. В настоящее время кафедра носит название «Прикладная математика».

К числу родственных можно также отнести кафедру «Информационные системы в экономике и менеджменте» Инженерно-экономического института. Ее организатором и первым заведующим был доктор экономических наук, заслуженный деятель науки и техники РСФСР, профессор С.А. Соколицын. Принял активное участие и оказал поддержку в организации кафедры лауреат Нобелевской премии по экономике, академик Л.В. Канторович. В настоящее время этой кафедрой заведует доктор экономических наук, профессор И.П. Ильин (бывший сотрудник кафедры высшей математики).

Следует заметить, что наряду с созданием «родственных» кафедр, в 1990-е гг. наметилась тенденция передачи чтения некоторых специальных разделов высшей математики представителям выпускающих кафедр. Действительно, в то время на этих кафедрах было немало сотрудников, получивших хорошее фундаментальное образование в области математики. В связи с отсутствием соответствующей нагрузки кафедру математики покинули несколько талантливых профессоров. Большинство из них нашло применение своим способностям на математико-механическом факультете Санкт-Петербургского государственного университета.

В последнее время начинает проявляться обратная тенденция: выпускающие кафедры все чаще обращаются к кафедре математики с предложением чтения специальных разделов математики, в основном для магистров. В первую очередь это связано с отсутствием «смены поколений». Нет сомнений, что уровень математической культуры большинства современных выпускников вузов существенно ниже, чем

у их предшественников, а поколение последних, как говорится, не вечно. Поэтому перед кафедрой стоит задача освоения новых курсов, во многом приближенных к потребностям выпускающих кафедр.

В настоящее время на кафедре высшей математики работают 102 преподавателя, из них 19 докторов наук и профессоров и более 60 кандидатов наук. Научные исследования ведутся по нескольким направлениям: алгебра, теория оптимизации, теория графов, теория приближений, теория обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений с частными производными, функциональный анализ, теория вероятностей и математическая статистика, программирование, численные методы, математическое моделирование, в том числе — нейросетевое (профессора Д.А. Тархов, А.Н. Васильев). За последние годы достигнут ряд интересных результатов, представляющих немаловажный вклад в математическую науку.

Профессор Д.Ф. Кузнецов активно работает в области стохастических дифференциальных уравнений, защитил докторскую диссертацию по этой тематике, издал и переиздал монографию «Стохастические дифференциальные уравнения: теория и практика численного решения».

Профессор Г.Л. Шевляков получил новые результаты в области робастной статистики и опубликовал несколько монографий по этой тематике в России и за рубежом.

Профессор В.Д. Ногин плодотворно работал над проблемами многокритериальной оптимизации. По этой тематике им опубликовано несколько монографий в издательстве Политехнического университета и внешних издательствах.

Профессор Г.С. Осипенко разработал новые методы исследования устойчивости решений дифференциальных уравнений.

Важно отметить, что в связи с развитием современных вычислительных средств и программных комплексов существенно изменяются направления научных исследований в области математики. В технических университетах на первый план выходят за-



дачи, связанные с математическим моделированием реальных процессов: физических, технических, экономических, социальных и многих других. Для создания хороших математических моделей уже недостаточно быть математиком или инженером. Как правило, наиболее интересные задачи лежат на стыке наук.

Кафедра высшей математики старается идти в ногу со временем, работать в соответствии с новыми задачами. В настоящее время основным направлением научной деятельности кафедры является анализ поведения сложных систем методами математического моделирования. Научным руководителем этой тематики является В.И. Антонов, автор более ста работ в данной области.

В рамках выбранного направления проводятся исследования в следующих областях:

1. Разработка методов анализа биологических сигналов методами нелинейной динамики и фрактального анализа с целью предсказания изменений в поведении таких систем и переходов в критические состояния;

2. Математическое моделирование сложных техносферных систем и процессов;

3. Разработка математических моделей физико-химических процессов для получения новых материалов и создания новых технологий.

Для координации проводимых научных исследований на кафедре периодически функционирует научный семинар. В его работе участвуют как математики, так и представители смежных наук, для которых и разрабатываются математические модели. Руководит работой семинара заведующий кафедрой, профессор В.И. Антонов.

Важной частью научных исследований является проведение конференций и выпуски сборников трудов.

В 2004 году кафедрой была проведена крупная научная конференция «Модели долговечности, старения и деградации в теории надежности, здравоохранении, медицине и биологии». В работе конференции

приняли участие многие крупные российские и зарубежные ученые. Двухтомное издание трудов конференции на английском языке стало важным вкладом в развитие взаимопонимания между учеными, работающими в различных областях науки.

В 2008 году были изданы труды научно-методического семинара кафедры под редакцией В.И. Антонова и Д.В. Серова.

В 2013 году проведен международный семинар по нелинейным феноменологическим моделям. Содержание докладов на английском языке вышло под редакцией В.И. Антонова и Д.В. Серова.

Большое внимание сотрудники кафедры уделяют выпуску учебно-методической литературы.

Профессорами В.И. Антоновым и Ю.Д. Максимовым подготовлен и в 2011 году издан сборник, посвященный истории и современному состоянию математических наук, под названием «Исторические очерки, научные обзоры математических наук от возникновения до наших дней».

Историческая и философская тематика в учебной и научной работе кафедры занимает значительное место. Профессором Ю.Д. Максимовым изданы книги «Историко-философские вопросы математики» (2012), «Великие математики в общей истории от палеолита по XX век» (2013), готовится к изданию в 2014 году книга «Российская математика в общей истории от Рюрика по XX век».

Профессорами В.И. Антоновым и Ю.Д. Максимовым подготовлена и в 2011 году издана книга «История кафедры высшей математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 1902 — 2010. Очерки. Научные обзоры. Биографии».

До периода перестройки в нашей стране многие преподаватели трудились над решениями научных проблем на условиях хозяйственных работ.

Преподаватели кафедры постоянно ведут большую работу в направлении поиска наиболее эффективных методов обучения, подготовки научно-методических посо-

бий, применения компьютеров в учебном процессе, активно участвуют в программах «Высшая школа России».

Профессорами Ю.Д. Максимовым и Ю.А. Хватовым изданы две книги методического направления «Базис дисциплины высшая математика» и «Структурированная программа». Профессорами В.И. Антоновым и Ю.Д. Максимовым подготовлен и издан в 2009 году специальный сборник «Методические рекомендации для преподавателей и студентов», посвященный чтению лекций, проведению практических занятий и выполнению других видов учебной работы по математике.

Кафедра активно внедряет в учебный процесс современные технологии контроля в преподавании высшей математики: письменные экзамены, двухступенчатые экзамены, тестовой контроль знаний (профессор Ю.А. Хватов). Эти технологии обеспечивают объективную оценку качества усвоения учебного материала, возможность более четкого представления о необходимом уровне усвоения той или иной темы (знания, умения, навыки) и оказывают свое влияние на содержание курсов, на понимание преподавателем необходимости их переработки. На кафедре разрабатываются принципы конструирования тестов, основы их использования, оценки валидности и трудности. Для общетехнических и экономических специальностей уже созданы пакеты тестов, которые активно используются в учебном процессе. Одновременно создается банк заданий по высшей и элементарной математике, на базе которого разрабатываются генераторы тестов. Банк заданий создается в стандартном формате Ворда, что делает банк легко доступным для любого пользователя.

Много внимания кафедра уделяет подготовке учебников и учебных пособий. Профессор В.Д. Ногин является одним из авторов книги «Основы теории оптимизации», а профессор Л.В. Васильев — одним из авторов монографии «Недифференцируемая оптимизация».

В 1995 году кафедра выиграла конкурс, объявленный Государственным комитетом РФ по высшему образованию, на создание учебника по математике для бакалавров технических направлений. В 1999 году вышел 1-й том «Общие разделы математики», в 2001 году — 6-й том «Вероятностные разделы математики». Подготовленный материал для остальных томов использован для создания других учебников. В 1999 году издательство «Специальная литература» выпустило учебник по математике для гуманитарных специальностей, подготовленный кафедрой высшей математики СПбГПУ. Сотрудники кафедры Ю.Д. Максимов, М.Ф. Романов, А.В. Ястребов написали совместно с кафедрой социологии и права монографию «Математические методы моделирования процессов управления в социальной сфере». Книга вышла в издательстве «Нестор» в 1999 году и также успешно использована в учебном процессе для подготовки бакалавров и магистров в области социологии. Уже использована и может быть в дальнейшем использована монография «Математические методы и модели в экологии», переиздававшаяся уже четыре раза с различными дополнениями. В ее подготовке принимали участие профессора кафедры М.Ф. Романов и Ю.Д. Максимов. Профессором А.П. Аксеновым издано учебное пособие в четырех томах по математике для студентов физико-механического факультета. Профессор И.Ю. Рыжаков подготовил и издал несколько выпусков курса математики, обеспечивающих преподавание на ряде физических специальностей.

В содружестве с Дрезденским техническим университетом в 1986 году издана, а в 1992 году переиздана книга «Введение в теорию массового обслуживания». В ее написании участвовали профессор Ю.Д. Максимов и доцент Н.Н. Амосова. Эта книга стала основой другого учебного пособия — «Теория массового обслуживания», написанная теми же авторами и изданная под редакцией профессора В.В. Глухова в СПбГПУ в 2013 году.

В 2007 году профессор Ю.Д. Максимов



издал монографию «Новые методы детерминационного и корреляционного анализа», а в период 2008 – 2010 гг. он же выпустил еще три учебных пособия: «Теория вероятностей и случайных процессов», «Теория и практика математической статистики. Конспект-справочник по теории вероятностей», «Случайные процессы. Теория и задачи».

Кафедрой создан новый вид учебного пособия – опорные конспекты по всем разделам курса математики. Уже издано девять выпусков. Они пользуются большой популярностью и периодически переиздаются. В опорном конспекте материал излагается в логической последовательности с иллюстрациями и примерами; второстепенные вопросы и трудные доказательства опущены, а приведены только небольшие.

В 2013 году коллективом авторов кафедры подготовлен к изданию задачник в четырех частях под редакцией профессора В.И. Антонова, охватывающий весь курс математики для общетехнических специальностей; причем курс ориентирован на новые условия работы кафедры.

В организационном плане кафедра раз-

делена на секции по числу обслуживаемых институтов. Секции возглавляются профессорами и ведущими доцентами. Работе заведующего кафедрой помогают три заместителя: по учебной работе (профессор С.П. Преображенский), по методике преподавания (профессор Ю.А. Хватов), по научной работе (профессор И.А. Халидов). Заведующий кафедрой, его заместители и руководители секций, а также профорг составляют совет кафедры, который систематически собирается и обсуждает основные рабочие вопросы.

Кафедра высшей математики СПбГПУ является крупнейшей математической кафедрой вузов Северо-Запада и одной из крупнейших в стране. Неудивительно, что она пользуется заслуженным авторитетом среди своих коллег. Так, заведующий кафедрой В.И. Антонов активно работает в составе научно-методического совета по математике при Министерстве образования и науки РФ. Сотрудники кафедры приняли активное участие в обсуждении концепции математического образования в России, проходившей в этом году.

Кафедра постоянно поддерживает свя-



Совет кафедры высшей математики СПбГПУ. Фото 2014 года

зи с Российской Академией наук. Почетными профессорами нашего университета являются выдающиеся математики России Ю.С. Осипов и В.А. Садовничий. Ряд наших коллег входят в международные математические общества.

В настоящее время перед сотрудниками кафедры стоят важные задачи, связанные с участием нашего университета в программе вхождения пяти российских вузов в состав ста лучших мировых университетов. Частью этой программы является существенное улучшение качества научной работы на фоне сокращения количества педагогических работников университета. Решить такую, во многом противоречивую, задачу можно только смещением акцентов при формировании коллектива преподавателей в пользу талантливых, активно работающих математиков.

Однако известно, что за последние годы уровень подготовки выпускников школ существенно снизился. Ввиду этого обстоятельства, педагогам общих кафедр приходится тратить все больше сил на дополнительную работу с нерадивыми студентами. Трудно ожидать, что этим будут заниматься талантливые ученые.

Выходом из сложившейся ситуации может стать перераспределение функций сотрудников без ущемления их законных прав. Так, активные ученые могут иметь меньшую учебную нагрузку и получать дополнительное вознаграждение за результаты своей научной работы. В то же время существенное увеличение учебной нагрузки также должно приводить к увеличению заработной платы. В любом случае следует воздержаться от слишком больших перекосов в уровне оплаты труда различных категорий преподавателей, чтобы избежать социальных конфликтов.

Несмотря на все объективные и субъективные трудности, мы с определенным оптимизмом смотрим в будущее. При этом постоянно помним о такой важной задаче, как передача своего опыта новому поколению сотрудников. Пусть пока профессия педагога не является престижной для молодежи. Обязательно должно прийти понимание того, что этот труд имеет огромное значения для формирования базовых устоев нашего общества. Мы ждем молодежь на кафедру высшей математики СПбГПУ и готовы поделиться с ней своими знаниями.



Кафедра высшей математики, 1990 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. История кафедры «Высшая математика» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета / Под. ред. В.И. Антонова, Ю.Д. Максимова. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2011. 406 с.
2. Меншуткин Б.Н. История Санкт-Петербургского политехнического института. СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2012. 507 с.
3. Васильев Ю.С. 110 лет на службе России. Сборник статей о Политехническом университете. СПб.: Изд-во «Наука», 2009. 276 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АНТОНОВ Валерий Иванович — доктор технических наук, заведующий кафедрой высшей математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
antonovvi@mail.ru

ВАСИЛЬЕВ Юрий Сергеевич — академик РАН, профессор Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, научный руководитель университета.
195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
president@spbstu.ru

Antonov V.I., Vasiliev Yu.S. THE DEPARTMENT OF HIGHER MATHEMATICS OF ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY: HISTORY AND THE PRESENT.

The article outlines the main stages of formation and development of the Department of Higher Mathematics which is one of the largest university departments in Russia. Much attention is paid to the history of the Polytechnical Institute, because since the foundation the Chair of Higher Mathematics has been its integral part. Ivan Ivanovich Ivanov was the first ordinary professor at the Department from 1902 to 1935. The themes of his research paved the way for the further success of Russian mathematicians. The most progress in studies and teaching was achieved by the department staff between 1934 and 1941. It was then that a plethora of talented scientists worked there.

A lot of attention is paid to the modern state of mathematical education at the Polytechnical University, as well as to its history, and to the challenges facing the department staff at present. Professor V.I. Antonov (Dr. Sc.) has been the chairman since 2003. The first major problem facing the staff is to familiarize itself with new training courses which answer the needs of graduating departments in many respects. The research is carried out in different directions. They are algebra, optimization theory and others. Currently a major avenue of scientific work at the department is the analysis of complicated systems by simulation methods.

HIGHER MATHEMATICS, PROFESSOR, DEPARTMENT, SCIENTISTS, ALGEBRA, OPTIMIZATION THEORY, SIMULATION OF COMPLICATED SYSTEMS.

REFERENCES

1. *Istoriya kafedry «Vysshaya matematika» Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo politekhnicheskogo universiteta* [The history of the Department of Higher Mathematics of the St. Petersburg State Polytechnical University]. Ed. by Antonov V.I., Maksimov Yu.D. St. Petersburg, Izdatelstvo Politekhnicheskogo universiteta, 2011, 406 p. (rus)
2. *Menshutkin B.N. Istoriya Sankt-Peterburgskogo politekhnicheskogo instituta* [The history of St. Petersburg Polytechnical University]. St. Petersburg, Izdatelstvo Politekhnicheskogo universiteta, 2012, 507 p. (rus)
3. *Vasiliev Yu.S. 110 let na sluzhbe Rossii. Sbornik statey o Politekhnicheskome universitete*. St. Petersburg, Izdatelstvo “Nauka”, 2009, 276 p. (rus)

THE AUTHORS

ANTONOV VALERY I.

St. Petersburg State Polytechnical University

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

antonovvi@mail.ru

VASILIEV Yuri S.

St. Petersburg State Polytechnical University

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

president@spbstu.ru



АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Антонов В.И.	154	Модестов В.С.	35
Байрамов Б.Х.	82	Пашковский А.В.	139
Байрамов Ф.Б.	82	Пашковский В.И.	139
Битюков А.А.	148	Петриченко М.Р.	47, 118
Васильев Ю.С.	154	Полоскин Е.Д.	82
Винниченко М.Я.	110	Семенов А.С.	20
Головков О.Л.	74	Софронов А.Н.	110
Грищенко А.И.	20	Сочава А.А.	148
Дремов С.С.	110	Степанов В.А.	74
Дубина М.В.	82	Тер-Мартirosян А.Л.	110
Жуков В.А.	57	Топоров В.В.	82
Зернов Н.Н.	148	Фаддеев Л.Д.	9
Иванков А.А.	92	Фирсов Д.А.	110
Купцова Г.А.	74	Харьков Н.С.	47
Лахдеранта Е.	82	Хохлюк В.И.	126, 131
Лашкул А.	82	Чабанов В.Е.	57
Липсанен Г.	82	Черепанов А.С.	148
Лукин А.В.	35	Чернев А.Л.	82
Мельников Б.Е.	20		

Научное издание

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА.
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ
«ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL.
PHYSICS AND MATHEMATICS»
№ 3 (201) 2014**

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 29.09.2014. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1.
Печать офсетная. Усл. печ. л. 21,09. Уч.-изд. л. 21,09. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
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 двойными 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 международную систему 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