

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«ПЕРМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ФИЗИКА ДЛЯ ПЕРМСКОГО КРАЯ

*Материалы
региональной научно-практической конференции
студентов, аспирантов и молодых ученых*

Выпуск 12



Пермь 2019

УДК 53(470.53)
ББК 22.3(2Рос4Пер)
Ф503

Физика для Пермского края [Электронный ресурс]: материалы регион. науч.-практ. конф. студ., асп. и молодых ученых / под общ. ред. Н. Н. Картавых; Перм. гос. нац. исслед. ун-т. – Электрон. дан. – Пермь, 2019. – Вып. 12. – 14 Мб; 204 с. – Режим доступа: <http://www.psu.ru/files/docs/science/books/sborniki/fizika-v-permskom-krae.pdf>. – Загл. с экрана.

ISBN 978-5-7944-3338-8 (вып. 12)

ISBN 978-5-7944-1699-2

В данном сборнике представлены материалы региональной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, проходившей на базе Пермского государственного национального исследовательского университета с 20 по 29 апреля 2019 г. Традиционно в конференции принимали участие не только представители вузов и научных учреждений Пермского края, но и работники наукоемких промышленных предприятий региона.

Тематика сборника охватывает широкий спектр актуальных исследований в области физической гидродинамики, физики твердого тела, перспективных материалов и технологий, физики мягких конденсированных сред, радиофизики и электроники, информационных технологий, методов и средств защиты информации.

Издание предназначено для научных работников, аспирантов и студентов естественнонаучных специальностей вузов.

УДК 53(470.53)
ББК 22.3(2Рос4Пер)

*Издается по решению ученого совета физического факультета
Пермского государственного национального исследовательского университета*

ISBN 978-5-7944-3338-8 (вып. 12)

ISBN 978-5-7944-1699-2

© ПГНИУ, 2019

ОРГАНИЗАТОРЫ

Физический факультет Пермского государственного национального исследовательского университета.

Председатель конференции

Гаврилов К. А. – к. ф.-м. н., декан физического факультета Пермского государственного национального исследовательского университета.

Члены оргкомитета

Бабушкин И. А. – к. ф.-м. н., доцент, зав. кафедрой общей физики;

Волынцев А. Б. – д. ф.-м. н., профессор, зав. кафедрой физики твердого тела;

Демин В. А. – д. ф.-м. н., доцент, зав. кафедрой теоретической физики;

Лунегов И. В. – к. ф.-м. н., доцент, зав. кафедрой радиоэлектроники и защиты информации;

Макаров Д. В. – к. ф.-м. н., доцент, врио зав. кафедрой физики фазовых переходов;

Машкин С. В. – к. т. ф., врио зав. кафедрой компьютерных систем и телекоммуникаций.

Ученый секретарь конференции

Картавых Н. Н. – к. ф.-м. н., зам. декана физического факультета по научной работе.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Булатов М. И., Смирнова А. Н., Григорьев Н. С., Лисина С. С., Азанова И. С., Волынцев А. Б.</i> Прочность и долговечность оптического волокна в полиимидном покрытии.....	7
<i>Чуракова А. И., Семенова О. Р.</i> Исследование структуры и свойств планарных волноводов на основе ниобата лития.....	11
<i>Ветрова Е. В.</i> Влияние граничного условия на катоде на электрические характеристики слабопроводящей жидкости в плоском конденсаторе при наличии инжекции и диффузии.....	15
<i>Казанцев П. Н., Краузин П. В.</i> Конвективная устойчивость магнитной жидкости в шаровой полости в магнитном поле, параллельном силе тяжести.....	21
<i>Князева Л. И., Макаров Д. В.</i> Спиральная структура смеси холестерических жидких кристаллов.....	27
<i>Кузнецов А. С., Ильин В. А.</i> Исследование модели электроконвекции слабопроводящей жидкости в невесомости при низких частотах электрического поля.....	32
<i>Лисобой А. С., Петров Д. А.</i> Уравнения ориентационного равновесия жидкого кристалла в скрещенных электрическом и магнитном полях в рамках сферического приближения.....	37
<i>Мыльников П. В., Ильин В. А.</i> Исследование модели электроконвекции слабопроводящей жидкости в невесомости в переменном электрическом поле.....	43
<i>Пешков Е. А., Краузин П. В.</i> Установление равновесного распределения концентрации коллоидных частиц в шаровой полости.....	47
<i>Полушкина М. А., Макаров Д. В.</i> Спиральная структура холестерического жидкого кристалла в осциллирующем поле.....	53
<i>Третьяков Д. А., Петров Д. А.</i> Влияние поляризации жидкокристаллической среды на ориентационные переходы в ферронематике.....	59
<i>Чупеев И. А., Петров Д. А.</i> Влияние бистабильного сцепления на магнито ориентационный отклик суспензии углеродных нанотрубок в нематическом жидком кристалле.....	65
<i>Володин И. В., Алабужев А. А.</i> Моделирование поверхностных волн методом решеточных уравнений Больцмана.....	71
<i>Галицын О. В., Алабужев А. А.</i> Моделирование термогравитационной конвекции в двухслойной системе в вычислительном пакете OpenFOAM.....	76

<i>Демин В. А., Мухайлова Ю. Н.</i> Вибрационные механизмы переноса примесей в простых конвективных системах.....	81
<i>Колупаев В. С.</i> Собственные колебания полусферической капли вязкой жидкости с закрепленной линией контакта.....	89
<i>Пермякова Э. В., Самойлова А. Е.</i> Моделирование протонного обмена в кристалле ниобата лития.....	95
<i>Струнина Я. Ю., Циберкин К. Б.</i> Магниторезонансный отклик кристаллов с косвенным обменным взаимодействием.....	101
<i>Тюлькина И. В., Голдобин Д. С., Пиковский А.</i> Стабилизация прямого численного счета при конечном обрывании разложений по круговым кумулянтам.....	107
<i>Хабин М. Р., Марышев Б. С.</i> Переход к субдиффузионному транспорту в сложных гидродинамических потоках.....	114
<i>Буркова Е. Н., Фролова А. Е.</i> Исследование седиментации концентрированной магнитной жидкости во внешних полях.....	120
<i>Хохрякова К. А., Колесниченко Е. В.</i> Двухслойная система жидкостей в вертикальном магнитном поле.....	126
<i>Гаранина М. С., Машкин С. В.</i> Получение суперпиксельного изображения методом суперразрешения.....	131
<i>Ермолаева М. А., Карпов С. Б.</i> Автоматизация верстки документации при расчетах надежности радиоэлектронных изделий.....	137
<i>Козьминых П. С., Карпов С. Б.</i> Визуализация данных электроразведки на базе комплекса АМС.....	143
<i>Коротаев В. Е., Машкин С. В.</i> Решение обратной задачи для магнитного диполя методом роя частиц.....	148
<i>Муралев А. И.</i> Мобильное приложение под ОС Android для чтения информации с датчиков по протоколу Modbus.....	153
<i>Никулин М. В., Селетков И. П.</i> Фильтрация временных последовательностей геолокационных данных.....	158
<i>Ханнанов Р. М., Поляков В. Б.</i> Система формирования светового и звукового сопровождения для релаксации человека.....	164
<i>Чеурин Я. Е., Машкин С. В.</i> Сравнение методов вычитания фона, построенных на основе смеси гауссиан (MoG) и устойчивых к дрожанию камеры.....	168
<i>Вдовин А. С., Гавшин А. В., Вольхин И. Л.</i> Спектральное уплотнение и усиление оптических сигналов в телекоммуникационных сетях.....	174
<i>Винокуров А. П., Кузнецов А. А.</i> Численное моделирование динамики активных броуновских частиц.....	180

<i>Лунегов А. И., Манцуров А. В., Лунегов И. В.</i> Устройство для биометрической идентификации человека по рисунку вен ладони.....	186
<i>Тарасов Д. Ю., Вольхин И. Л.</i> Исследование системы диагностики летательных аппаратов на электромагнитную совместимость.....	192
<i>Трушников А. С., Кузнецов А. А.</i> Равновесный магнитный отклик суспензии анизометричных магнитных наночастиц.....	198

ПРОЧНОСТЬ И ДОЛГОВЕЧНОСТЬ ОПТИЧЕСКОГО ВОЛОКНА В ПОЛИИМИДНОМ ПОКРЫТИИ

М. И. Булатов^{a,b}, А. Н. Смирнова^b, Н. С. Григорьев^c, С. С. Лисина^a,
И. С. Азанова^{a,b}, А. Б. Волынцев^a

^aПермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

^bПАО Пермская научно-производственная приборостроительная компания,
614007, Пермь, 25 октября, 106

^cПермский национальный исследовательский политехнический
университет, 614990, Пермь, Комсомольский проспект, 29

Исследована прочность оптического волокна в полиимидном покрытии производства ПАО «ПНППК» с помощью метода осевого растяжения. Определён предел прочности на трёх разных скоростях нагружения. Построены графики Вейбула и рассчитана долговечность этого оптического волокна при нормальных климатических условиях.

Ключевые слова: оптическое волокно; прочность; полиимид

STRENGTH AND DURABILITY OPTICAL FIBER POLYIMIDE COATING

M. I. Bulatov^{a,b}, A. N. Smirnova^b, N. S. Grigorev^c, S. S. Lisina^a,
I. S. Azanova^{a,b}, A. B. Volyntsev^a

^aPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

^bPAO Perm Scientific Production Instrument Company,
October 25, 106, 614007, Perm

^cPerm National Research Polytechnic University,
Komsomolsky Pr., 29, 614990, Perm

The strength of an optical fiber in a polyimide coating by PAO PNPPK was studied using the axial tension method. I determined the tensile strength at three different loading speeds. Weibul graphs were constructed and the durability of the optical fiber in the polyimide coating under normal climatic conditions was calculated.

Key words: optical fiber; strength; polyimide

Долговечность оптического волокна (ОВ) связана с его пределом прочности (прочность при разрыве), что отображено в построениях распределения Вейбула [1]. Теоретическая прочность ОВ составляет около 20 ГПа, что выше прочности стальной проволоки такого же диаметра [2]. В реальности значения прочности при разрыве в разы ниже [3–6]. Снижение предела прочности ОВ обусловлено наличием микротрещин на границе кварцевый световод – полимерное защитно-упрочняющее покрытие (ЗУП).

Для работоспособности ОВ при температуре до 300 °С на кварцевый световод во время вытяжки наносят специальное полиимидное ЗУП. Поли-

имидное ЗУП тонкое (5–30 мкм) и жёсткое, ОВ в полиимидном ЗУП чувствительно к изгибам [3].

Известно, что предел прочности реальных ОВ зависит от скорости нагружения, качества подготовки заготовки к вытяжке и типа ЗУП. Ранее в работах [3–6] было показано, что предел прочности ОВ в полиимидном ЗУП (6,39÷6,51) ГПа [3] выше, чем в стандартном акрилатном ЗУП (4,45÷6,0) ГПа [4–6]. При этом в открытых источниках данных о расчёте долговечности ОВ в полиимидном ЗУП не найдены.

В данной работе методом осевого растяжения на трёх скоростях нагружения [1, 7] определили пределы прочности ОВ в полиимидном ЗУП производства ПАО «ПНППК» (диаметр кварцевой оболочки (125 ± 1) мкм, диаметр по полиимидному ЗУП (155 ± 5) мкм), построили графики распределения Вейбула для трёх скоростей нагружения и рассчитали его долговечность.

Предельная прочность образцов определялась методом осевого растяжения на разрывной машине Instron 5969 на скоростях растяжения 500, 100 и 50 мм/мин. На выборке из 15 образцов на каждой из трёх скоростей растяжения ОВ был определён предел прочности ОВ в полиимидном ЗУП и построены распределения Вейбула (рис. 1–3) [8].

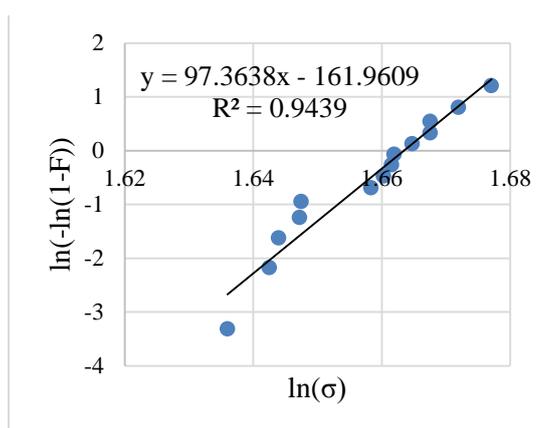


Рис. 1. Кривые Вейбулла для ОВ в полиимидном ЗУП, скорость растяжения ОВ 50 мм/мин. Средний предел прочности 5,2 ГПа

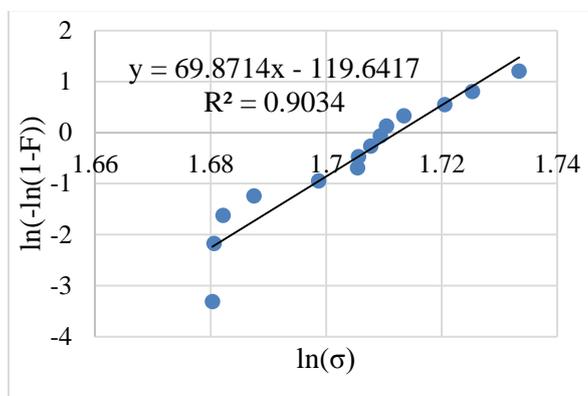


Рис. 2. Кривые Вейбулла для ОВ в полиимидном ЗУП, скорость растяжения ОВ 100 мм/мин. Средний предел прочности 5,5 ГПа

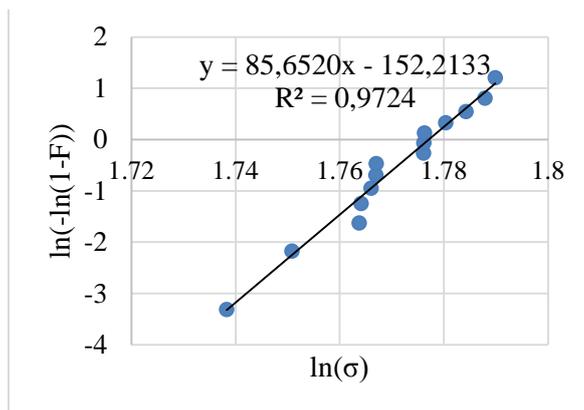


Рис. 3. Кривые Вейбулла для ОВ в полиимидном ЗУП, скорость растяжения ОВ 500 мм/мин. Средний предел прочности 5,9 ГПа

Распределение Вейбулла используется для описания вероятности роста трещины от границы полимерное покрытие – кварцевая оболочка вплоть до разрушения ОВ [5, 8].

Долговечность ОВ в полиимидном ЗУП рассчитана по методикам [1, 8]. Из построенной зависимости логарифма разрывного усилия ОВ от логарифма скорости изменения нагружения (рис. 4) по углу наклона, равному отношению $1 / (1 + n_D)$, определили параметр динамической усталости n_D . Из значения угла наклона рассчитали параметр динамической усталости – 22. В соответствии с [9] для одномодовых оптических волокон в акрилатном ЗУП значение параметра динамической усталости должно быть не ниже 18.

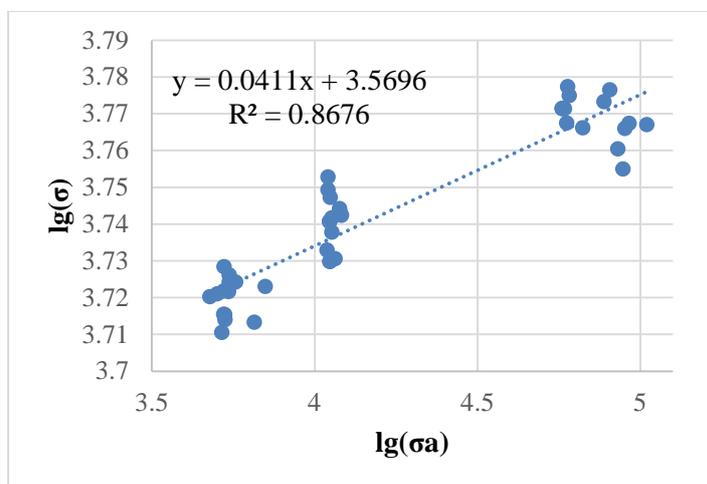


Рис. 4. График динамической усталости ОВ в полиимидном ЗУП

По методике [1] рассчитали среднеквадратичную ошибку определения наклона графика динамической усталости. Допустимым считается среднеквадратичное отклонение менее 0,0017 [1], для ОВ в полиимидном ЗУП среднеквадратичное отклонение составило 0,0003, что удовлетворяет [1].

Расчёт срока службы ОВ (τ в секундах) приведён ниже [8]:

$$\tau = B \cdot \left((\sigma_{\text{пер}})^{n-1} / (\sigma_{\text{раб}})^n \right),$$

где $\sigma_{\text{пер}}$ – это усилие, с которым перемотано ОВ после вытяжки (0,69 ГПа); $\sigma_{\text{раб}}$ – усилие, с которым, предположительно, будет натянуто ОВ в процессе

эксплуатации (0,20 ГПа); n – динамический параметр усталости ОВ (22); B – характеристика дефектности ОВ, минимальное значение $(8 \cdot 10^{-3}) \text{ ГПа}^2 \cdot \text{с}$ [9]. Таким образом срок службы ОВ в полиимидном ЗУП в нормальных климатических условиях составил $\tau \sim 30$ лет.

В работе показано, что ОВ в полиимидном ЗУП производства ПАО «ПНППК» удовлетворяет требованиям [9], и срок службы этого ОВ при нормальных климатических условиях порядка 30 лет. При этом задача по расчёту долговечности ОВ в полиимидном ЗУП при температуре до 300°C является нестандартной и требует учёта дополнительных факторов, снижающих прочностные параметры ОВ.

Список литературы

1. ГОСТ Р МЭК 60793-1-33-2014. Волокна оптические. Методы измерений и проведение испытаний. Стойкость к коррозии в напряжённом состоянии. Дата введения 2016-01-01. 30 с.
2. *France P. W., Dunn P. L., Reeve M. H.* Plastic coating of glass fibers and its influence on strength // *Fiber and Integrated Optics*. 1979. Vol. 2 (3–4). P. 267–286.
3. *Косолапов А. Ф., Пластинин Е. А., Семенов С. Л., Байминов С., Сапожников Д. А., Алексеева Д. Д., Выгодский Я. С.* Высокотехнологичный полиимидный лак для изготовления волоконного световода // *Краткие сообщения по физике физического института им. П. Н. Лебедева Российской Академии Наук*. № 6. 2017. С. 9–14.
4. *Ероньян М. А., Мешковский И. К.* Основы нанотехнологии анизотропных одномодовых волоконных световодов: учебное пособие. СПб: НИУ ИТМО, 2014. 80 с.
5. *Листвин А. В., Листвин В. Н.* Рефлектометрия оптических волокон. М.: ЛЕСАРарт, 2005. 208 с.
6. *Мильков А. В.* Экспериментальное исследование кратковременной и длительной прочности оптического волокна и расчет его надежности: аттестационная работа. Кафедра «Прикладная механика», Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, Москва, 2000. 45 с.
7. ГОСТ Р МЭК 60793-1-31-2010. Волокна оптические. Методы измерений и проведение испытаний. Прочность при разрыве. Дата введения 2012-01-01. 15 с.
8. *Богатырев В. А., Бубнов М. М., Вечканов Н. Н., Гурьянов А. Н., Семенов С. Л.* Прочность стеклянных волоконных световодов большой длины // *Труды Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук. Волоконная оптика*. М.: Наука, 1987. Т.5. С. 60–72.
9. ГОСТ Р МЭК 60793-2-50-2018. Волокна оптические. Технические требования к изделию. Групповые технические требования к одномодовым оптическим волокнам класса В. Дата введения 2019-07-01. 31 с.
10. *Craig S. P., Duncan W. J., France P. W., Snodgrass J. E.* The strength and fatigue of large flaws in silica optical fiber // *Proceedings of the 8th European Conference on Optical Communication*. Cannes, France, 1982. P. 205–208.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПЛАНАРНЫХ ВОЛНОВОДОВ НА ОСНОВЕ НИОБАТА ЛИТИЯ

А. И. Чуракова, О. Р. Семенова

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

В работе получены планарные волноводы, созданные на основе X-среза монокристалла ниобата лития в результате протонного обмена. Исследованы изменения структуры и оптических свойств полученных волноводов в различных температурных режимах. Установлено, что глубина волновода зависит не только от температурного режима протонного обмена, но продолжительности постобменного отжига.

Ключевые слова: ниобат лития; планарные волноводы; протонный обмен

IVESTIGATION OF THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF PLANAR WAVEGUIDE ON THE BASIS OF LITHIUM NIOBATE

A. I. Churakova, O. R. Semenova

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

In this work, planar waveguides, created on the basis of the X-cut of the lithium niobate crystal as a result of the proton exchange, were obtained. The changes in the structure and optical properties of the obtained waveguides in different temperature regimes are investigated. It was established that the depth of the waveguide depends not only on the temperature regime of the proton exchange, but on the length of post-exchange annealing.

Keywords: lithium niobate; planar waveguide; proton exchange

В настоящее время в интегральной и волоконной оптике используется большое разнообразие оптических волноводов с различными свойствами. Оптические волноводы – это диэлектрические структуры, по которым может распространяться электромагнитная энергия в видимой и инфракрасной областях спектра. Среди различных видов оптических волноводов выделяют планарные волноводы, которые чаще всего используются в интегральной оптике для передачи оптических сигналов на небольшие расстояния (несколько десятков миллиметров), а также их усиления и обработки, например, в интегрально-оптических переключателях, модуляторах, усилителях, лазерах, датчиках [1].

Планарный волновод представляет собой слоистую структуру, характеризующуюся тем, что каждый слой имеет показатель преломления, отличающийся от показателя преломления соседнего слоя. Величина показателя преломления слоев подбирается таким образом, чтобы обеспечить выполнение закона полного отражения света на границе раздела двух соседних слоев.

Монокристалл ниобата лития является одним из наиболее широко применяемых в настоящее время сегнетоэлектрических материалов. Также ниобат лития является универсальным кристаллом для оптических применений благодаря возможности управления его свойствами в широких пределах путем варьирования состава. По этой причине он был выбран в качестве объекта исследований.

Одним из способов создания планарных волноводов на основе монокристалла ниобата лития является протонный обмен (ПО). ПО представляет собой ионообменную реакцию между кристаллом ниобата лития и расплавом бензойной кислоты. В ходе такой реакции происходит частичное замещение ионов лития кристалла на протоны кислоты в его приповерхностном слое. Показатель преломления этого слоя отличается от показателя преломления кристалла в объеме, что приводит к возможности распространения светового сигнала в полученном волноводе.

Выбор бензойной кислоты обусловлен тем, что при температурах, наиболее пригодных для ПО (170 – 200°C), данная кислота находится в жидком состоянии, но еще в значительном удалении от ее точки кипения. Бензойная кислота также обеспечивает приемлемую интенсивность ПО и получение волноводов с необходимыми оптическими характеристиками [2].

Протонный обмен проводился на образцах X-среза кристалла ниобата лития. Образцы имели размер $10 \times 15 \times 1$ мм³. Формирование планарных волноводов путем протонного обмена осуществлялось при температурах 175, 190 и 210°C в течение 2 ч в циркониевом реакторе закрытого типа.

После протонного обмена у волновода получается ступенчатый профиль показателя преломления [3]. В этом случае при стыковке оптического волокна с полученным волноводом получается большая разность между показателями преломления волновода и волокна, которая будет приводить к обратным отражениям. Для минимизации этого явления, а так же стабилизации оптических свойств волноводов проводят отжиг. Отжиг полученных волноводов проводили при температуре 350°C в течение 5.5 ч.

Для изучения структурных изменений кристаллической решетки в результате протонирования монокристаллов ниобата лития проведен рентгенографический анализ $\theta/2\theta$ дифракционных кривых, полученных на рентгеновском двухкристальном дифрактометре ДРОН-УМ1. Используемое излучение отвечает β -линии К-серии характеристического спектра кобальтового анода ($\lambda_{\beta} = 1.62073$ Å). Кривые дифракционного отражения от плоскости (110) первого порядка приведены на рис. 1. Из анализа кривых на рис. 1б видно, что в ходе протонного обмена образуется не менее одной кристаллических фаз. Этот вывод следует из того, что кривые $\theta-2\theta$ имеют несколько разных по величине пиков. Все они расположены в области меньших углов, и, следовательно, отвечают фазе с большим параметром решетки. Толщина слоя этих фаз определяет глубину волновода. Максимальный пик на рис. 1 соответствует пику подложки. Так же были получены дифракционные кривые второго порядка отражения от плоскости (110).

Отметим, что пик подложки и дополнительные пики разделены областью, которая по интенсивности близка к фону дифрактограммы. Это свидетельствует о том, что в ниобате лития в результате ПО параметр решетки меняется скачком при движении от глубины образца к его поверхности.

Для полученных планарных волноводов определены профили приращения показателя преломления необыкновенного луча $\Delta n_e(x)$ и значения $\Delta n_e(0)$ на поверхности волноводного слоя методом модовой спектроскопии. С помощью призматического ввода излучения (длина волны $\lambda = 0.633$ мкм) были измерены эффективные показатели преломления волноводных мод. По ним был восстановлен профиль $\Delta n_e(x)$ по глубине волноводного слоя в среде MathLab с помощью обратного метода Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна [4] и определена глубина волновода.

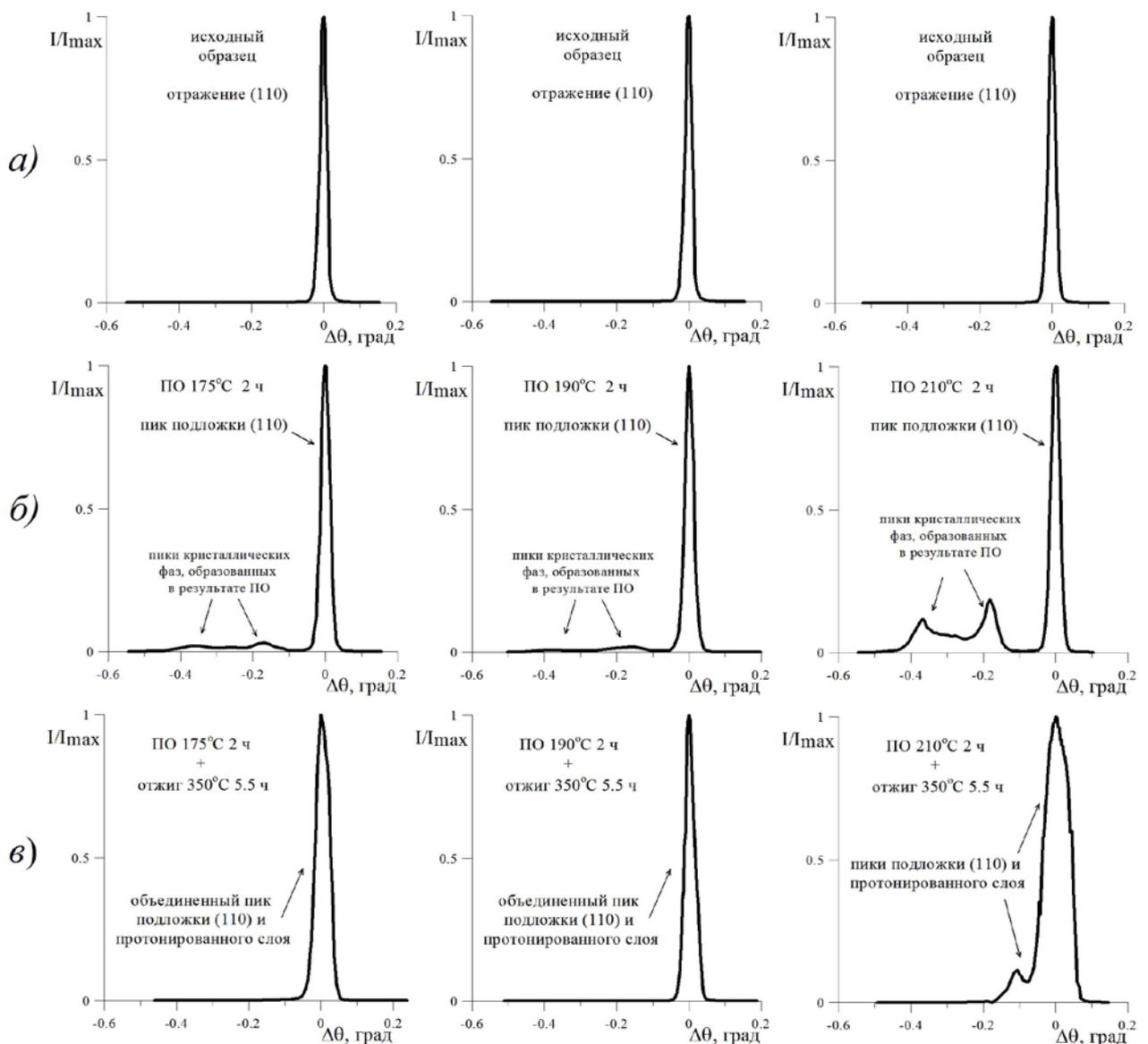


Рис. 1. Дифракционные кривые отражения (110) для образцов ниобата лития:

а) в исходном состоянии; б) после протонного обмена; в) после отжига

Был произведен расчет микродеформации кристаллической решетки по формуле

$$\varepsilon^2 = \frac{cB_1^2B_2 - B_2^2B_1}{cB_2 - tB_1} \frac{1}{\operatorname{tg}^2\theta_1}.$$

Здесь $t = \frac{\operatorname{tg}^2\theta_2}{\operatorname{tg}^2\theta_1}$, $c = \frac{\cos^2\theta_1}{\cos^2\theta_2}$, B_1 и B_2 – полуширины (ширина на половине высоты) дифракционных максимумов первого и второго порядков отражения, θ_1 и θ_2 – соответствующие им брегговские углы. Результаты расчета микродеформации и результаты измерений модовой спектроскопии представлены в табл. 1.

Табл. 1. Характеристики полученных волноводов

Образец	Величина деформации	$\Delta n_e(0)$	Глубина волновода, мкм
ПО 175°C 2 ч + отжиг 350°C 5.5 ч	0.000088	0.02676	4.57
ПО 190°C 2 ч + отжиг 350°C 5.5 ч	0.00015	0.02438	7.76
ПО 210°C 2 ч + отжиг 350°C 5.5 ч	0.00034	0.04785	4.82

При проведении работы ожидалось, что увеличение температуры ПО приведет к увеличению глубины волновода. Но, как следует из табл. 1, это не так. Поэтому для установления этой зависимости необходимо провести дополнительные исследования. При этом следует учесть тот факт, что в ходе проведения данной работы не было учтено, что при повышении температуры ПО следует увеличивать продолжительность постобменного отжига.

Список литературы

1. *Никоноров Н. В., Шандаров С. М.* Волноводная фотоника: учебное пособие. СПб: СПбГУ ИТМО, 2008. 143 с.
2. *Петухов И. В., Кичигин В. И., Мушинский С. С., Минкин А. М., Шевцов Д. И.* Влияние воды, содержащейся в бензойной кислоте, на процесс протонного обмена, структуру и свойства протонообменных волноводов на монокристаллах ниобата лития // Конденсированные среды и межфазные границы. 2012. Т. 14. № 1. С. 119–123.
3. *Korkishko Y. N., Fedorov V. A.* Structural phase diagram of $H_xLi_{1-x}NbO_3$ waveguides: The correlation between optical and structural properties // IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics. 1996. Vol. 2 (2). P. 187–196.
4. *Колосовский Е. А., Петров Д. В., Царев А. В.* Численный метод восстановления профиля показателя преломления диффузных волноводов // Квантовая электроника. 1981. Т. 8. № 12. С. 2557–2568.

ВЛИЯНИЕ ГРАНИЧНОГО УСЛОВИЯ НА КАТОДЕ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЛАБОПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ В ПЛОСКОМ КОНДЕНСАТОРЕ ПРИ НАЛИЧИИ ИНЖЕКЦИИ И ДИФФУЗИИ

Е. В. Ветрова

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Решена задача о распределении электрических характеристик в плоском конденсаторе, заполненном слабопроводящей жидкостью. Для разных граничных условий на катоде получены аналитические выражения для плотности заряда, электрического потенциала и напряженности поля в неподвижной слабопроводящей жидкости, заполняющей плоский конденсатор, при наличии инжекции с анода и диффузии заряда.

Ключевые слова: слабопроводящая жидкость; инжекция; диффузия заряда

INFLUENCE OF THE CATHODE BOUNDARY CONDITION ON THE ELECTRICAL CHARACTERISTICS OF A LOW CONDUCTING LIQUID IN A FLAT CAPACITOR IN THE PRESENCE OF INJECTION AND DIFFUSION

E. V. Vetrova

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The problem of distribution of electrical characteristics in a flat capacitor filled with a low conducting liquid is solved. Analytical expressions for charge density, electric field strength and electric potential are obtained for different boundary conditions at the cathode in the quiescent low conducting liquid in the presence of injection from the anode and charge diffusion.

Keywords: low conducting liquid; injection; charge diffusion

1. Введение

Слабопроводящие жидкости – вещества, электропроводность которых лежит в интервале $10^{-8} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1} \div 10^{-17} \text{ Ом}^{-1} \text{ м}^{-1}$ [1]. К этому классу веществ можно отнести конденсаторное и трансформаторные масла, топлива и т.д. Существует множество механизмов формирования заряда в жидкости и связанных с ними электрических и гидродинамических явлений [2–7].

Один из механизмов зарядообразования – инжекция состоит в том, что свободный заряд образуется на одном или двух электродах. Существует тип ионной инжекции, когда диэлектрическая проницаемость жидкости настолько высока, что ионы «вытягиваются» в объем жидкого диэлектрика. В этом случае инжекцию называют автономной [1–2].

Попадая в жидкость, ионы начинают распространяться в ней под действием проводимости, диффузии, а при определенных условиях и вследствие конвективного переноса.

1. Постановка задачи

Рассмотрим плоский горизонтальный конденсатор, внутри которого находится слабопроводящая жидкость. На пластинах конденсатора задана разность потенциалов U , которая создает постоянное вертикальное электрическое поле \mathbf{E} (рис. 1).

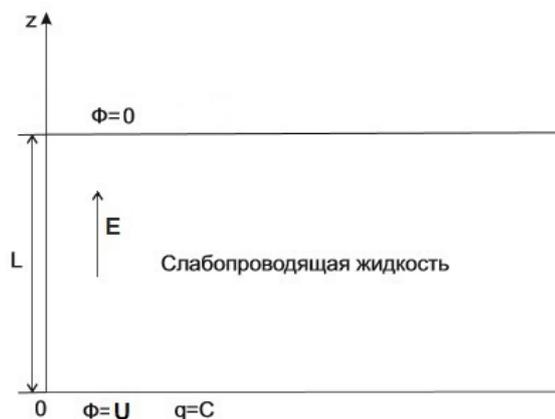


Рис. 1. Геометрия задачи

На аноде происходит автономная инжекция заряженных частиц в жидкость, характеризующаяся коэффициентом инжекции C , т.е.:

$$q(z = 0) = C. \quad (1)$$

Полагаем, что на катоде ($z = 1$) для заряда в общем случае реализуется граничное условие третьего рода:

$$\frac{dq}{dz} + kq = 0, \quad (2)$$

которое в частных случаях дает: при $k = 0$

$$\frac{dq}{dz} = 0, \quad (3)$$

а при $k = \infty$:

$$q = 0. \quad (4)$$

2. Метод решения

Для описания распределения электрических характеристик неподвижной слабопроводящей жидкости запишем следующие уравнения [4].

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + \operatorname{div}(q\mathbf{E}) &= \alpha\Delta q, \\ \Delta\varphi &= -q, \quad \mathbf{E} = -\nabla\varphi, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\alpha = D/KU$ (D и K – коэффициенты диффузии и подвижности зарядов). Коэффициент α – безразмерный коэффициент диффузии (характеризует отношение диффузионного и электрического токов).

Для характеристики протекающих в конденсаторе процессов используем также полный заряд Q в конденсаторе:

$$Q(t) = \int_0^L q(z) dz, \quad (6)$$

и полный ток на верхней границе, который состоит из тока проводимости и диффузионного тока:

$$j(z = L) = qE - \alpha \frac{dq}{dz}. \quad (7)$$

Будем считать, что инжекция с анода малая $C \ll 1$ и применим разложение по малому параметру C [8].

$$\begin{aligned} q &= q_0(z) + Cq_1(z) + C^2q_2(z) + \dots \\ E &= E_0(z) + CE_1(z) + C^2E_2(z) + \dots \\ \varphi &= \varphi_0(z) + C\varphi_1(z) + C^2\varphi_2(z) + \dots \end{aligned}$$

Найдем решение для различных граничных условий на катоде (2–4).

В нулевом приближении решение системы (5) запишется в виде системы:

$$q_0^2 - \nabla\varphi_0\nabla q_0 = \alpha q_0, \quad \Delta\varphi_0 = -q_0,$$

решение которой для всех случаев граничных условий будет иметь одинаковый вид:

$$\begin{aligned} q_0 &= 0, \\ \varphi_0 &= Az + B = 1 - z, \\ E_0 &= -\frac{d\varphi_0}{dz} = 1. \end{aligned}$$

Решение системы (5) с граничным условием (2) в первом приближении имеет вид:

$$q_1 = -\frac{e^{1/\alpha}(1+k\alpha)}{e^{1/\alpha+k\alpha}(e^{1/\alpha}-1)}(e^{z/\alpha}-1) + e^{z/\alpha}, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{-e^{1/\alpha}(1+k\alpha)}{e^{1/\alpha+k\alpha}(e^{1/\alpha}-1)}(ae^{z/\alpha}-z) + \alpha e^{z/\alpha} + \alpha^2 + \\ &+ \frac{e^{1/\alpha}(1+k\alpha)}{e^{1/\alpha+k\alpha}(e^{1/\alpha}-1)}\left(a^2e^{1/\alpha}-\frac{1}{2}\right) - a^2e^{1/\alpha} + 1 - \frac{e^{1/\alpha}(1+k\alpha)\alpha^2}{e^{1/\alpha+k\alpha}(e^{1/\alpha}-1)}, \quad (9) \end{aligned}$$

$$\Phi_1 = \frac{e^{1/\alpha}(1+k\alpha)\left(a^2 e^{z/\alpha} - \frac{1}{2}z^2\right)}{e^{1/\alpha+k\alpha}(e^{1/\alpha}-1)} - \alpha^2 e^{z/\alpha} + 1 - \frac{e^{1/\alpha}(1+k\alpha)a^2}{e^{1/\alpha+k\alpha}(e^{1/\alpha}-1)} + z \left(\alpha^2 - \frac{e^{1/\alpha}(1+k\alpha)a^2}{e^{1/\alpha+k\alpha}(e^{1/\alpha}-1)} \right) + \alpha^2 - z \left(\frac{e^{1/\alpha}(1+k\alpha)}{e^{1/\alpha+k\alpha}(e^{1/\alpha}-1)} \left(a^2 e^{1/\alpha} - \frac{1}{2} \right) - \alpha^2 e^{1/\alpha} + 1 \right). \quad (10)$$

3. Результаты

Ток на верхней границе j представлен на рис. 1, 2.

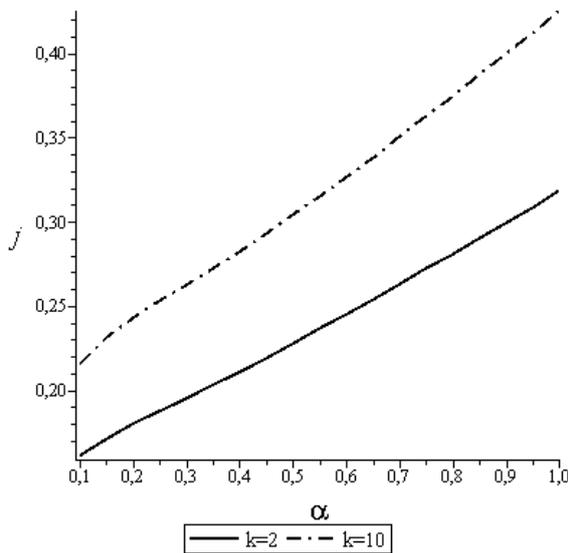


Рис. 2. Зависимость тока на верхней границе j от α и k для условия $q' + kq = 0$ при $z = 1$

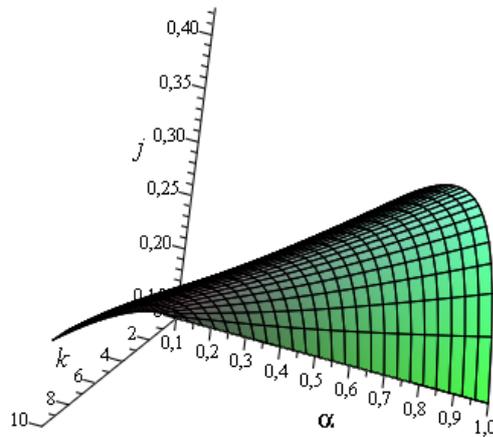


Рис. 3. Зависимость тока на верхней границе j от α для условия $q' + kq = 0$

Из графика зависимости тока на верхней границе от α (рис. 2, 3) можно сделать вывод, что чем больше α , тем больше ток j . При этом сам ток увеличивается и при росте k . Например, при $k = 2$, ток при малых α равен 0, а в случае $k = 10$ значение его увеличивается до 0.21.

Анализируя графики зависимости полного заряда в конденсаторе от величины диффузии α и степени инжекции C (рис. 4–8), видно, что чем больше величина заряда инжектируемого с анода C , тем больше полный заряд Q . С другой стороны, рост коэффициента диффузии увеличивает отток заряда из конденсатора, что ведет к уменьшению общего заряда в системе. Зависимость полного заряда в конденсаторе от коэффициента диффузии α и k представлена на рис. 8. Рост этих двух параметров приводит к понижению общего заряда в конденсаторе.

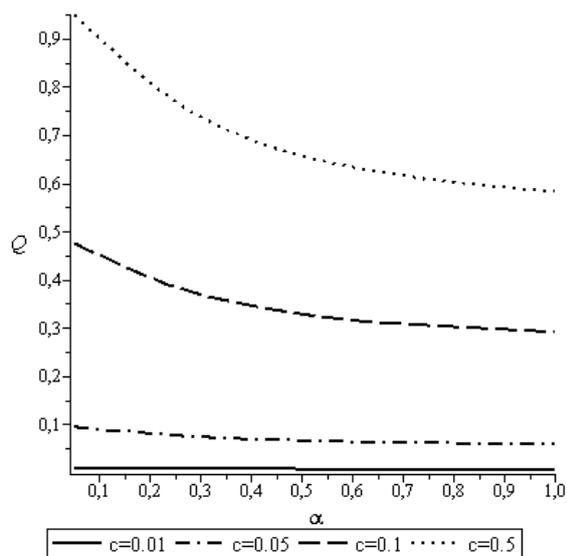


Рис. 4. Зависимость полного заряда Q от α для условия $q(z = 1) = 0$

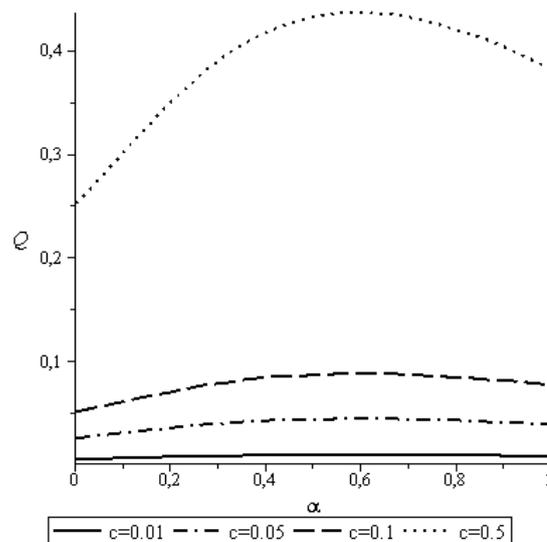


Рис.5. Зависимость полного заряда Q от α для условия $q'(z = 1) = 0$

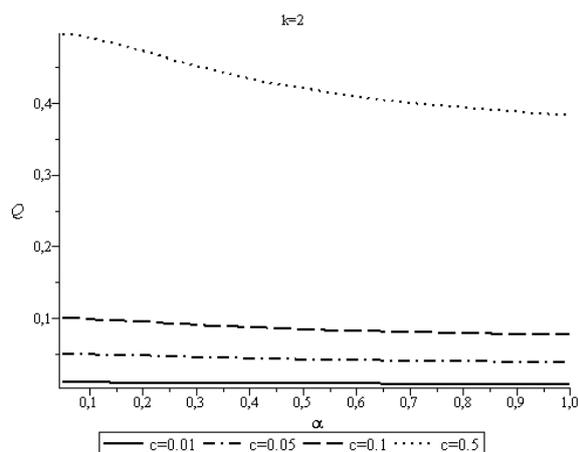


Рис. 6. Зависимость полного заряда Q от α для условия $q' + kq = 0$ при $k = 2$

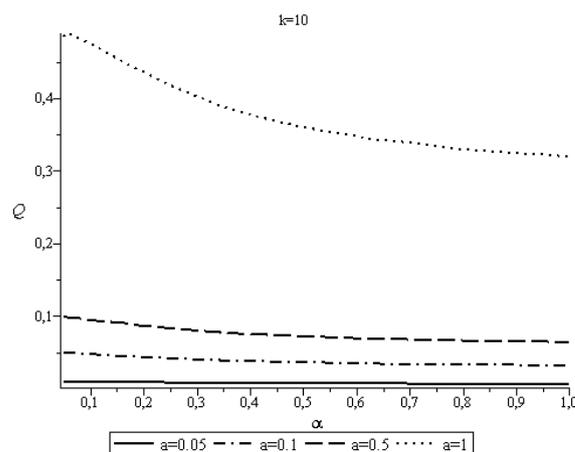


Рис. 7. Зависимость полного заряда Q от α для условия $q' + kq = 0$ при $k = 10$

4. Заключение

В настоящей работе исследовано распределение электрических характеристик (заряда q , напряженности E , потенциала φ) в плоском конденсаторе заполненном, слабопроводящей жидкостью. Показано, что в случае, когда заряд на катоде равен нулю, полный заряд Q в конденсаторе наибольший, а в случае отсутствия диффузионного тока – наименьший.

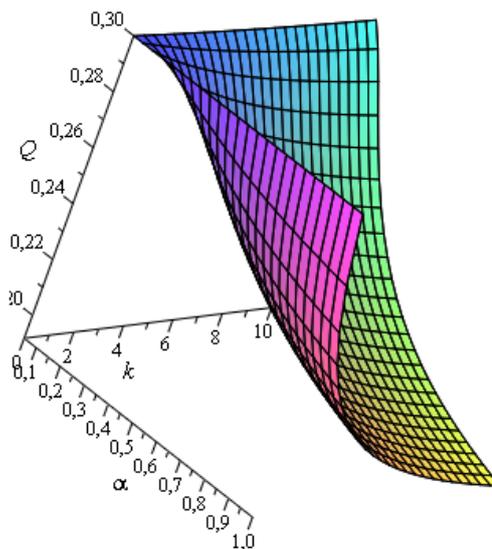


Рис. 8. Зависимость полного заряда Q от α и k для условия $q' + kq = 0$ при $C = 0.3$.

Список литературы

1. Жакин А. И., Приэлектродные и переходные процессы в жидких диэлектриках // Успехи физических наук. 2006. Т. 176. № 3. С. 289–310.
2. Pontiga F., Castellanos A. Physical mechanism of instability in a liquid layer subjected to an electric field and a thermal gradient // Physics of Fluids. 1994. Vol. 6. P. 1684–1701.
3. Смородин Б. Л., Тараут А. В. Влияние модуляции электрического поля на распространение заряда в полярной слабопроводящей жидкости // Прикладная механика и техническая физика. 2008. Т. 49. № 1. С. 3–12.
4. Perez A. T., Castellanos A. Role of charge diffusion in finite-amplitude electroconvection // Physical review. 1989. Vol.40 (10). P. 5844–5855.
5. Ильин В. А., Смородин Б. Л. Периодические и хаотические режимы электроконвекции жидкого диэлектрика в горизонтальном конденсаторе // Письма в Журнал технической физики. 2005. Т. 31. № 10. С. 57–63.
6. Ильин В. А., Смородин Б. Л. Нелинейные режимы электроконвекции слабопроводящей жидкости // Письма в Журнал технической физики. 2007. Т. 33. № 8. С. 81–87.
7. Найфэ А. Введение в методы возмущений. М.: Мир, 1984. 535 с.

КОНВЕКТИВНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ В ШАРОВОЙ ПОЛОСТИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ, ПАРАЛЛЕЛЬНОМ СИЛЕ ТЯЖЕСТИ

П. Н. Казанцев, П. В. Краузин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Для многих прикладных направлений очень важна возможность управлять жидкостью с помощью магнитного поля, поэтому магнитные жидкости (МЖ) многие годы вызывают интерес к исследованию. В данной работе исследуется конвективная устойчивость МЖ в шаровой полости в магнитном поле, параллельном силе тяжести. С помощью метода Бубнова-Галеркина определены критические значения чисел Рэлея, отвечающие первым двум модам неустойчивости. Построены зависимости критических чисел Рэлея в отсутствие гравитации от относительной магнитной проницаемости и относительной теплоемкости.

Ключевые слова: магнитная жидкость; сферическая полость; конвективная устойчивость; метод Бубнова-Галеркина

CONVECTIVE STABILITY OF MAGNETIC FLUID IN A SPHERICAL CAVITY IN A MAGNETIC FIELD, PARALLEL TO THE FORCE OF GRAVITY

P. N. Kazantsev, P. V. Krauzin

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

For many applications, it is very important to control a liquid by a magnetic field, therefore ferrofluids (FF) have been interesting to research for many years. In this paper, the convective stability of an FF in a spherical cavity in a magnetic field parallel to gravity is investigated. Using the Galerkin method, the critical values of Rayleigh numbers are determined, corresponding to the first two critical motions. Also, dependences of the critical Rayleigh numbers in the absence of gravity on relative magnetic permeability and relative heat capacity were plotted.

Keywords: ferrofluid; spherical cavity; convective stability; Galerkin method

Рассмотрим сферическую полость, окруженную бесконечным массивом и заполненную магнитной жидкостью (рис. 1). Коэффициенты теплопроводности и магнитные проницаемости массива и жидкости равны $\lambda_m, \lambda_{ж}, \mu_m, \mu_{ж}$, соответственно. На бесконечном большом расстоянии от полости заданы однородное магнитное поле H_∞ и температурный градиент γ_∞ .

Система уравнений конвекции несжимаемой магнитной жидкости имеет вид [1]:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} + \mu_0 M \nabla H, \quad \nabla \cdot \mathbf{v} = 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_{\text{ж}}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) T_{\text{ж}} &= \kappa_{\text{ж}} \Delta T_{\text{ж}}, & \frac{\partial T_{\text{м}}}{\partial t} &= \kappa_{\text{м}} \Delta T_{\text{м}}, \\ \nabla \times \mathbf{H} &= 0, & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, & \mathbf{B} &= \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}), \end{aligned} \quad (1)$$

где ρ – плотность жидкости, \mathbf{v} – скорость, p – давление, η – коэффициент сдвиговой вязкости, $\kappa = \lambda / \rho c_p$ – коэффициент температуропроводности, c_p – изобарная удельная теплоемкость, T – температура, \mathbf{M} – вектор намагниченности, \mathbf{H} – вектор напряженности магнитного поля, \mathbf{B} – вектор магнитной индукции.

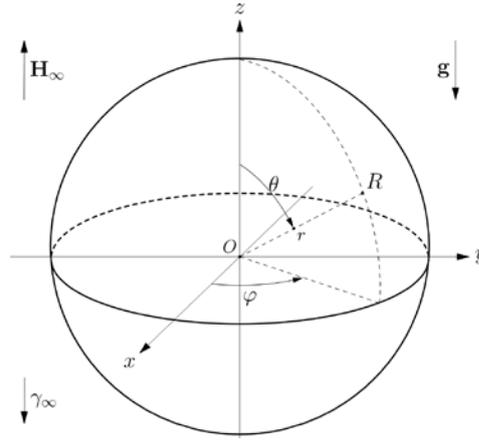


Рис. 1. Геометрия задачи

Замыкают систему (1) уравнения состояния:

$$\rho = \rho(T, p), \quad \mathbf{M} = M(H, T) \mathbf{H} / H.$$

На границах полости должны выполняться следующие условия для температуры и магнитного поля:

$$\begin{aligned} T_{\text{ж}} &= T_{\text{м}}, & \lambda_{\text{ж}} \frac{\partial T_{\text{ж}}}{\partial n} &= \lambda_{\text{м}} \frac{\partial T_{\text{м}}}{\partial n}, \\ (\mathbf{B}_{\text{ж}} - \mathbf{B}_{\text{м}}) \cdot \mathbf{n} &= 0, & (\mathbf{H}_{\text{ж}} - \mathbf{H}_{\text{м}}) \cdot \boldsymbol{\tau} &= 0, \end{aligned}$$

где \mathbf{n} и $\boldsymbol{\tau}$ – векторы нормали и касательной к поверхности сферической полости. Для скорости ставится условие прилипания: $\mathbf{v} = 0$.

Пусть жидкость в рассматриваемом объеме неподвижна. Тогда распределения температуры и потенциала магнитного поля $\mathbf{H} = \nabla \psi$ внутри и вне полости определяются выражениями:

$$\begin{aligned} T_{\text{ж}}(r, \theta) &= T_* + \frac{3\gamma_{\infty}}{2 + \lambda} r \cos \theta, & T_{\text{м}}(r, \theta) &= T_* + \gamma_{\infty} \left[1 + \frac{1 - \lambda}{2 + \lambda} \left(\frac{R}{r} \right)^3 \right] r \cos \theta, \\ \psi_{\text{ж}}(r, \theta) &= \frac{3H_{\infty}}{2 + \mu} r \cos \theta, & \psi_{\text{м}}(r, \theta) &= H_{\infty} \left[1 + \frac{1 - \mu}{2 + \mu} \left(\frac{R}{r} \right)^3 \right] r \cos \theta, \end{aligned}$$

где $\lambda = \lambda_{\text{ж}} / \lambda_{\text{м}}$ и $\mu = \mu_{\text{ж}} / \mu_{\text{м}}$, а T_* – температура жидкости в центре полости.

Перейдем к анализу устойчивости системы. Представим величины в виде линейной суперпозиции равновесного значения и бесконечно малых возмущений [1]:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \mathbf{v}_0 + \mathbf{v}', & T &= T_0 + T', & H &= H_0 + H', & \mathbf{H} &= \mathbf{H}_0 + \mathbf{h}, \\ M &= M_0 + M', & \mathbf{M} &= \mathbf{M}_0 + \mathbf{m}, & p &= p_0 + p', & \rho &= \rho_0 + \rho', \end{aligned}$$

где $\mathbf{v}_0 = 0$, T_0 , H_0 , \mathbf{H}_0 , M_0 , \mathbf{M}_0 , p_0 , ρ_0 – величины в равновесном состоянии, а \mathbf{v}' , T' , H' , \mathbf{h} , M' , \mathbf{m} , p' , ρ' – их бесконечно малые возмущения. Из соображений удобства опустим индекс «ж» у величин, описывающих жидкость. Выберем следующие масштабы: расстояния – радиус полости R , времени – R^2/ν , массы – $\rho_* R^3$, температуры – γR , магнитного поля – $K_* \gamma R / (1 + \chi_*^{(r)})$, где $\gamma = 3\gamma_\infty / (2 + \lambda)$ – равновесный градиент температуры внутри полости; $\chi_*^{(r)} = \partial M / \partial H \Big|_{\substack{T=T_* \\ H=H_*}}$ – дифференциальная магнитная восприимчивость; $K_* = -\partial M / \partial T \Big|_{H=H_*}$ – абсолютный температурный коэффициент намагниченности. Преобразованная система уравнений (1) в приближении Буссинеска:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= -\nabla p + \Delta \mathbf{v} + \text{Gr} T \mathbf{e}_z + \text{Gr}_m (H \nabla T_0 - T \nabla H_0), \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, & \mathbf{e}_z &= -\mathbf{g} / g, & \mathbf{e}_H &= \mathbf{H}_0 / H_0, \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T_0 &= \text{Pr}^{-1} \Delta T, & \frac{\partial T_m}{\partial t} &= \text{Pr}^{-1} \kappa^{-1} \Delta T_m, \\ \Delta \psi &= \mathbf{e}_H \cdot \nabla T, & \Delta \psi_m &= \mathbf{e}_H \cdot \nabla T_m. \end{aligned} \tag{2}$$

В получившейся системе \mathbf{v} , p , T , H – безразмерные возмущения, а все производные берутся по безразмерным времени и координатам. В систему (2) входят безразмерные параметры $\text{Gr} = \frac{\beta_* g \gamma R^4}{\nu^2}$ и $\text{Gr}_m = \frac{\mu_0 K_*^2 \gamma^2 R^4}{\nu^2 (1 + \chi_*^{(r)})}$ – гравитационное и магнитное числа Грасгофа соответственно, число Прандтля $\text{Pr} = \nu / \kappa$ и отношение температуропроводностей $\kappa = \kappa_{\text{ж}} / \kappa_{\text{м}}$.

Эта система имеет частные решения, зависящие от времени по экспоненциальному закону: $\{v, p, T, H\} \propto e^{-\Lambda t}$, где Λ – декремент возмущения. При $\Lambda = 0$ возмущения критические (не возрастают и не затухают) [2]. Тогда система (2) относительно амплитуд критических возмущений имеет вид:

$$\begin{aligned} -\nabla p + \Delta \mathbf{v} + \text{Gr} T \mathbf{e}_z + \text{Gr}_m (H \nabla T_0 - T \nabla H_0) &= 0, & \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, \\ \mathbf{v} \cdot \nabla T_0 = \text{Pr}^{-1} \Delta T, & \Delta T_m = 0, \\ \Delta \psi = \mathbf{e}_H \cdot \nabla T, & \Delta \psi_m = \mathbf{e}_H \cdot \nabla T_m. \end{aligned} \tag{3}$$

Добавим для безразмерных амплитуд условия на границе (при $r=1$)

$$v = 0, \quad T = T_m, \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial T_m}{\partial r}, \quad \psi = \psi_m, \quad \mu \frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{\partial \psi_m}{\partial r}, \quad (4)$$

и условия вдали от полости (при $r \rightarrow \infty$)

$$T_m = 0, \quad \psi_m = 0. \quad (5)$$

Для отыскания критических чисел Грасгофа воспользуемся методом Бубнова-Галеркина. Представим базисные функции для аппроксимации скорости в виде полиномов, удовлетворяющих граничным условиям. Воспользовавшись уравнением непрерывности и ограничившись полиномами степени не выше четырех, получим 11 независимых базисных векторов для скорости: $\mathbf{v} = \sum_{i=1}^{11} a_i \mathbf{v}_i$ [2]. Также из преобразованного уравнения теплопроводности, с учетом (4), (5) получим 11 базисных функций для температуры $T = \sum_{i=1}^{11} a_i T_i$.

Для нахождения базисных функций для магнитного потенциала подставим полученную аппроксимацию температуры в уравнения Максвелла. Однако аналитическое решение, удовлетворяющее (4), (5), возможно лишь для первых 6 базисных функций распределения магнитного потенциала:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= f_3 P_2^{(1)} \sin \varphi, \quad \psi_2 = -f_3 P_2^{(1)} \cos \varphi, \quad \psi_3 = 0, \\ \psi_4 &= -\psi_5 = f_4 P_3^{(2)} \sin(2\varphi), \quad \psi_6 = 2f_4 P_3^{(2)} \cos(2\varphi), \end{aligned}$$

где $P_n^{(m)}$ – присоединенный полином Лежандра (его аргумент – $\cos \theta$ – опускается), f_3 и f_4 – радиальные функции:

$$\begin{aligned} f_3(r) &= \text{Pr} \left(\frac{(13 + 14\mu)r^2}{1260(3 + 2\mu)} - \frac{r^4}{210} + \frac{r^6}{756} \right), \\ f_4(r) &= \text{Pr} \left(\frac{(30 + 671\mu)r^3}{83160(2 + 33\mu)} - \frac{r^5}{3780} + \frac{r^7}{11880} \right). \end{aligned}$$

После подстановки аппроксимаций в первое уравнение из (3) получим систему из 6 уравнений. Из условия разрешимости данной системы следует:

$$\frac{\text{Ra}}{\text{Ra}^*} + \frac{\text{Ra}_m}{\text{Ra}_m^*} = 1,$$

где Ra^* и Ra_m^* – критические числа Рэлея в отсутствие магнитного поля и гравитации соответственно. Они определяют две критические моды:

$$\text{Ra}^{*(1)} = \frac{17325(2 + \lambda)}{37 + 68\lambda}, \quad \text{Ra}^{*(2)} = \frac{63063(3 + 2\lambda)}{2(47 + 79\lambda)}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \text{Ra}_m^{*(1)} &= \frac{34650(2\lambda\mu + 3\lambda + 4\mu + 6)}{244\lambda\mu + 399\lambda + 92\mu + 204}, \\ \text{Ra}_m^{*(2)} &= \frac{189189(66\lambda\mu + 4\lambda + 99\mu + 6)}{2(6281\lambda\mu + 450\lambda + 2343\mu + 246)}. \end{aligned} \quad (7)$$

На рис. 2 представлена зависимость критического числа Рэлея в отсутствие гравитации Ra_m^* от относительной магнитной проницаемости μ при определенных значениях λ для критических движений 1 и 2, а на рис. 3 – от отношения теплопроводностей λ при определенных значениях μ для критических движений 1 и 2.

Из полученных зависимостей следует, что при увеличении μ критическое число Рэлея Ra_m^* растет для любых λ , а при увеличении λ – наоборот, убывает для любых μ . Аналогичный характер вышеописанных зависимостей был получен в работе [3], в которой исследовалась конвекция магнитной жидкости внутри горизонтального цилиндра под действием магнитного поля.

Также на рис. 2 можно заметить, что при увеличении λ критическое число Рэлея Ra_m^* все меньше зависит от μ и при $\lambda \rightarrow \infty$ почти не зависит от нее. Другими словами, критическое число Рэлея в отсутствие гравитации практически не зависит от относительной магнитной проницаемости при идеально теплопроводящем массиве.

Более того, стоит отметить, что для любых λ критическое число Рэлея Ra_m^* медленно растет при увеличении μ и в пределе $\mu \rightarrow \infty$ стремится к асимптоте:

$$\text{Ra}_m^{*(1)} \Big|_{\mu \rightarrow \infty} = \frac{17325(2 + \lambda)}{23 + 61\lambda}, \quad \text{Ra}_m^{*(2)} \Big|_{\mu \rightarrow \infty} = \frac{567567(3 + 2\lambda)}{2(571 + 213\lambda)}.$$

Примечательно, что кривые зависимости критического числа Рэлея Ra_m^* от относительной магнитной проницаемости μ (рис. 3) практически совпадают для $1 < \mu < 5$. Это особенно проявляется для критического движения 2. Отметим, что относительная магнитная проницаемость, характерная для большинства реальных магнитных жидкостей и массивов, как раз лежит в данных пределах.

Таким образом, в данной работе было найдено равновесное распределение для температуры и магнитного поля в сферической полости и окружающем бесконечном массиве. Также с помощью метода Бубнова-Галеркина были определены критические значения чисел Рэлея, отвечающие первым двум критическим движениям. Показано, что однородное внешнее магнитное поле понижает порог конвекции. Проведено сравнение с гравитационной конвекцией в сферической полости [2] и термомагнитной конвекции в горизонтальном цилиндре [3]. Оказалось, что магнитное поле не изменяет критические движения магнитной жидкости.

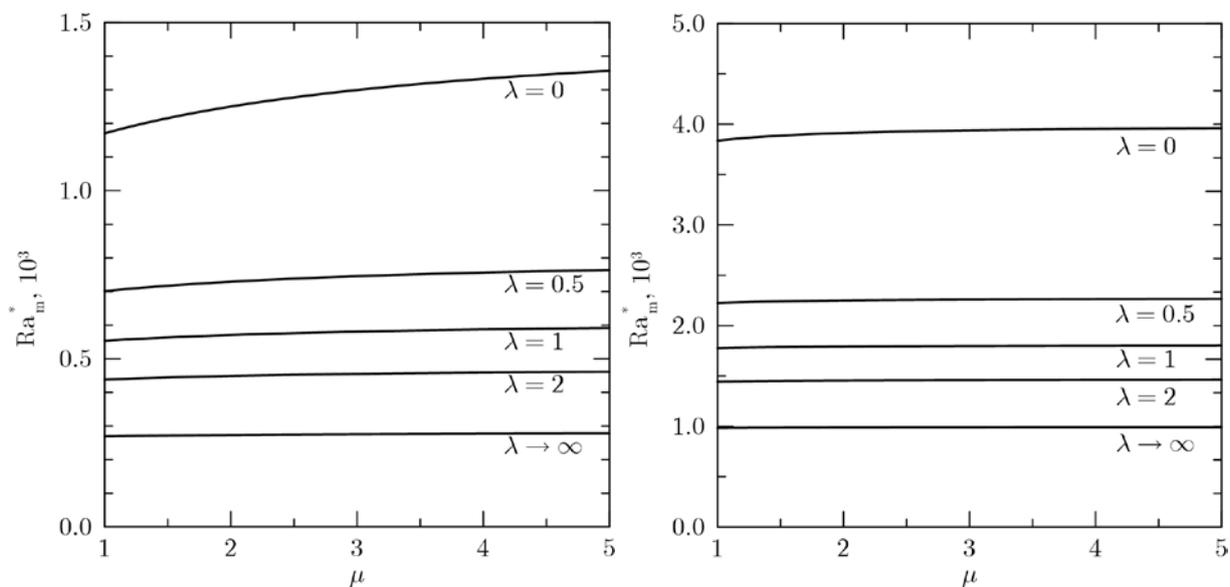


Рис. 2. Зависимость критического числа Рэля в отсутствие гравитации Ra_m^* от μ для критических движений 1 и 2 соответственно

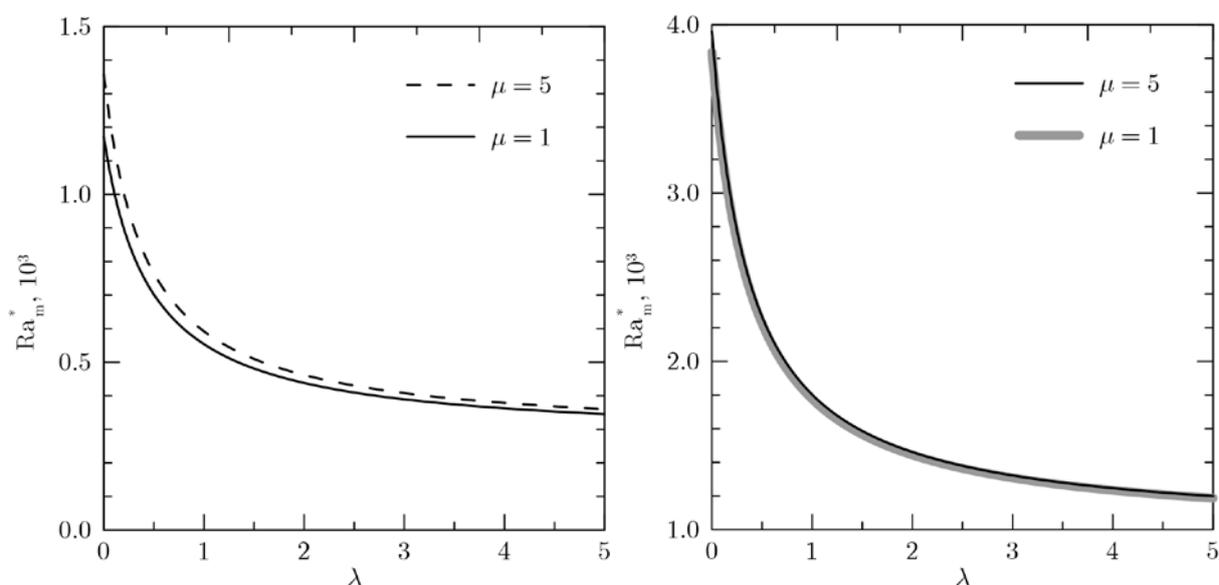


Рис. 3. Зависимость критического числа Рэля в отсутствие гравитации Ra_m^* от λ для критических движений 1 и 2 соответственно

Список литературы

1. Баитовой В. Г., Берковский Б. М., Вислович А. Н. Введение в термомеханику магнитных жидкостей. М.: ИВТАН, 1985. 188 с.
2. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
3. Krakov M. S., Nikiforov I. V. Natural convection in a horizontal cylindrical enclosure filled with a magnetic nanofluid: Influence of the uniform outer magnetic field // International Journal of Thermal Sciences. 2018. Vol. 133. P. 41–54.

СПИРАЛЬНАЯ СТРУКТУРА СМЕСИ ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Л. И. Князева, Д. В. Макаров

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Предложена модификация теории Озеена-Франка для бинарной смеси холестерических жидких кристаллов. Проанализированы ориентационные состояния при различных типах взаимодействия между молекулами. Изучена зависимость шага спиральной структуры смеси от объемной доли примесной подсистемы. Обнаружено, что при планарном типе сцепления между компонентами смеси нетривиальные решения уравнений ориентационного равновесия существуют только в приближении однодиректорного векторного поля.

Ключевые слова: холестерический жидкий кристалл; бинарная смесь; шаг спирали

THE HELICAL STRUCTURE OF A CHOLESTERIC LIQUID CRYSTAL MIXTURE

L. I. Knyazeva, D. V. Makarov

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

A modification of the Oseen-Frank theory for a binary mixture of cholesteric liquid crystals is proposed. The orientational states for various types of interaction between molecules are analyzed. The dependence of the pitch of the spiral structure of the mixture on the volume fraction of the impurity subsystem is studied. It is revealed that for the planar type of coupling between the components of the mixture, nontrivial solutions of the orientation equilibrium equations exist only in the approximation of a single-vector field.

Keywords: cholesteric liquid crystal; binary mixture; helix pitch

Холестерический жидкий кристалл (ХЖК) – это один из видов жидких кристаллов, характеризующийся спонтанным ориентационным порядком хиральных молекул, организующих в нем спиральную структуру. Жидким кристаллам присуща способность изменять свои оптические свойства при изменении внешних силовых полей и температуры. В частности, для ХЖК характерна температурная зависимость шага спиральной структуры, приводящая к изменению спектрального состава света, отраженного поверхностью ХЖК (так называемый цветотемпературный эффект), что позволяет использовать их в устройствах отображения информации [1]. В связи с этим создание ХЖК с заданными макроскопическими характеристиками, обеспечивающими требуемый отклик системы на внешнее воздействие, является актуальной задачей. А наиболее удобными для этого являются не однокомпонентные вещества, а смеси, изменение

состава которых позволяет нужным образом менять характеристики жидкокристаллической системы.

В данной работе предложена континуальная теория на основе модифицированного потенциала Озеена-Франка, описывающая ориентационную структуру бинарной смеси холестерических жидких кристаллов в рамках двухдиректорной модели без учета расслоения. В данном подходе направление преимущественной ориентации молекул каждой из компонент смеси задается с помощью двух единичных векторов \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 , называемых директорами (рис. 1).

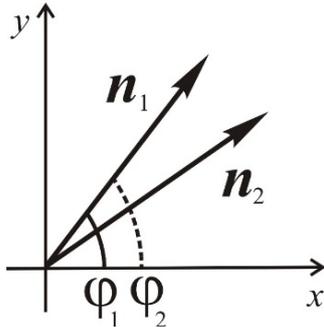


Рис. 1. Двухкомпонентный ХЖК

Проанализируем основное состояние бинарной холестерической смеси в отсутствие внешних полей. Как известно, равновесную ориентационную структуру смеси ХЖК можно найти из условия минимума полной свободной энергии ХЖК [2]. Определим объемную плотность свободной энергии смеси следующим образом:

$$F = y_1 F_d^{(1)} + y_2 F_d^{(2)} - y_1 y_2 W (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)^2, \quad (1)$$

здесь первые два слагаемых

$$F_d^{(1,2)} = \frac{1}{2} \left[K_{11}^{(1,2)} (\nabla \cdot \mathbf{n}_{1,2})^2 + K_{22}^{(1,2)} (\mathbf{n}_{1,2} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}_{1,2}) + q_0^{(1,2)})^2 + K_{33}^{(1,2)} (\mathbf{n}_{1,2} \times (\nabla \times \mathbf{n}_{1,2}))^2 \right] \quad (2)$$

определяют энергию ориентационно-упругих деформаций каждой из компонент смеси, а последний вклад описывает энергию взаимодействия подсистем. Эффекты, вносимые каждой из компонент, определяются их объемными долями y_1 и $y_2 = 1 - y_1$. Последний вклад в (1) характеризует плотность энергии взаимодействия компонент смеси. Положительному значению феноменологического параметра W будут соответствовать параллельные ориентации директоров \mathbf{n}_1 и \mathbf{n}_2 (планарное сцепление), а отрицательному – ортогональные ориентации (гомеотропное сцепление). Предложенный потенциал (1) не учитывает эффекты расслоения холестерической смеси.

Введем безразмерные величины для удобства последующего теоретического анализа. Для этого выберем первую компоненту в качестве основной и введем следующие отношения: $q = q_0^{(2)} / q_0^{(1)}$, $k = K_{22}^{(2)} / K_{11}^{(1)}$. Через $\sigma = W / (K_{11}^{(1)} q_0^{(1)2})$ обозначим безразмерную плотность энергии сцепления, а в качестве безразмерной координаты выберем $\zeta = q_0^{(1)} z$.

Преобразуя выражения (1) и (2) с учетом введенных безразмерных величин, получим следующее выражение для плотности свободной энергии смеси ХЖК в безразмерной форме:

$$\tilde{F} = \frac{y_1}{2} \left(\frac{d\varphi_1}{d\zeta} - 1 \right)^2 + \frac{y_2}{2} k \left(\frac{d\varphi_2}{d\zeta} - q \right)^2 - y_1 y_2 \sigma \cos^2(\varphi_1 - \varphi_2). \quad (3)$$

Минимизация свободной энергии по углам ориентации директоров подсистем дает следующие уравнения равновесия:

$$y_1 \frac{d^2 \varphi_1}{d\zeta^2} - y_1 y_2 \sigma \sin 2(\varphi_1 - \varphi_2) = 0, \quad (4)$$

$$k y_2 \frac{d^2 \varphi_2}{d\zeta^2} + y_1 y_2 \sigma \sin 2(\varphi_1 - \varphi_2) = 0. \quad (5)$$

Анализ этих уравнений показывает, что нетривиальные вещественные решения для $\varphi_1 \neq \varphi_2$ существуют при $\sigma < 0$, что отвечает гомеотропному сцеплению между подсистемами. Реализацию такого типа сцепления между компонентами смеси можно представить только для смеси палочкообразных и дискообразных молекул, но она будет расслаиваться. При $\sigma > 0$ мы имеем нетривиальные решения только в приближении однодиректорного векторного поля. В этом случае угол поворота директора описывается выражением:

$$\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi = \frac{y_1 + y_2 k q}{y_1 + y_2 k} \zeta. \quad (8)$$

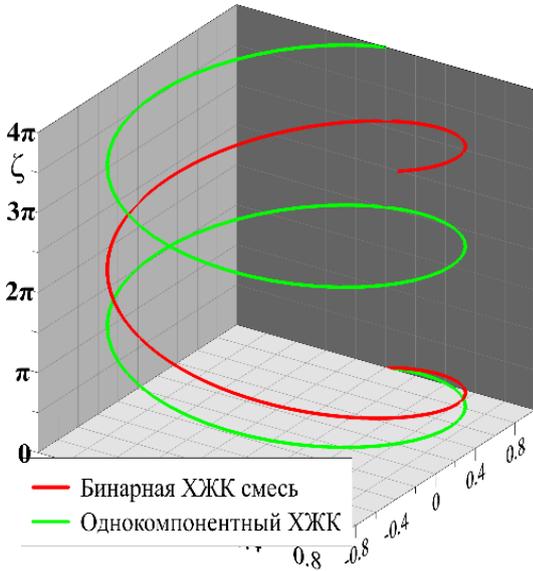


Рис. 2. Спираль двухкомпонентного ХЖК при $y_2 = 0.4$, $k = 1.5$, $q = 0.3$

В этом случае наблюдается спирально закрученная в пространстве структура (рис. 2), со следующим значением шага спирали:

$$p = 2\pi \frac{y_1 + y_2 k}{y_1 + y_2 k q}. \quad (9)$$

Видно, что в отсутствие примесной компоненты получается шаг спирали $p_* = 2\pi$, соответствующий однокомпонентному ХЖК [3].

На рис. 3 представлены зависимости приведенного шага спирали p/p_* от объемной доли примесной компоненты y_2 при различных отношениях констант упругости холестериков с одинаковым знаком собственного кручения ($q > 0$). Если волновое число первой компоненты больше волнового числа второй компоненты (рис. 3а), то с ростом объемной доли y_2 происходит монотонный рост шага спирали бинарной смеси. По мере увеличения константы упругости второй

компоненты вогнутая зависимость $p(y_2)$ сменяется выпуклой. Если волновое число второй компоненты больше соответствующего числа первой компоненты (рис. 3б), то с ростом объемной доли y_2 шаг спирали уменьшается, причем по мере увеличения k выпуклая зависимость $p(y_2)$ сменяется вогнутой.

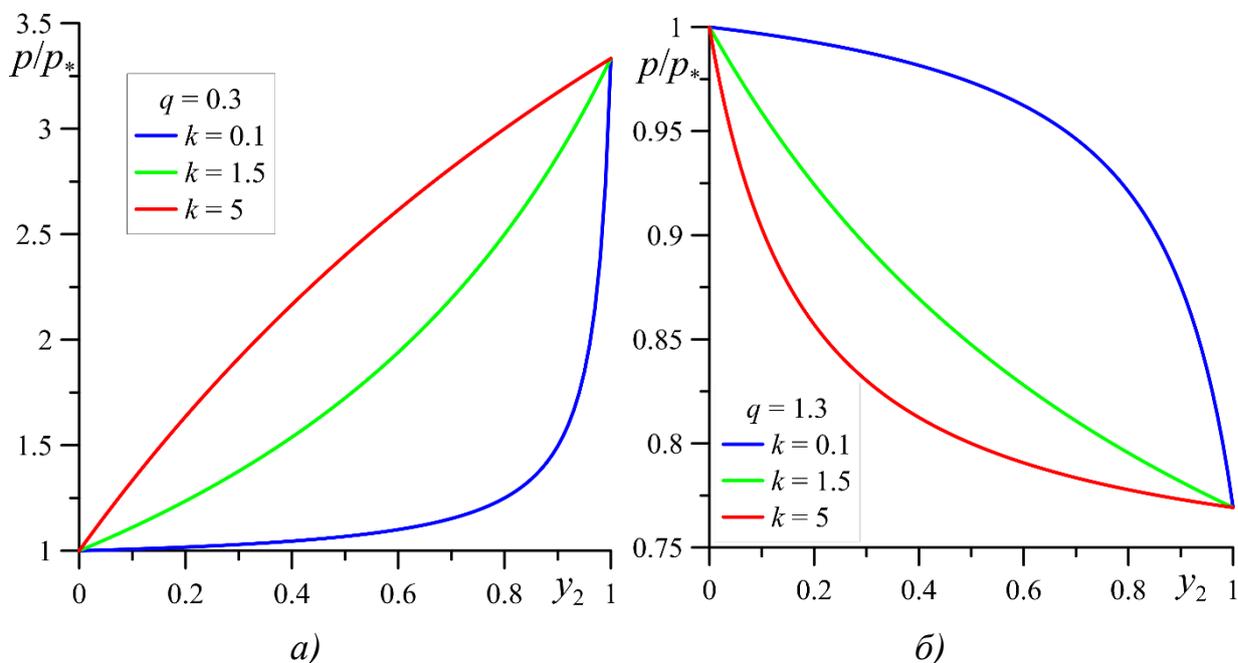


Рис. 3. Зависимость приведенного шага спирали p/p_* от объемной доли примесной компоненты y_2 : а) $0 < q < 1$; б) $q > 1$

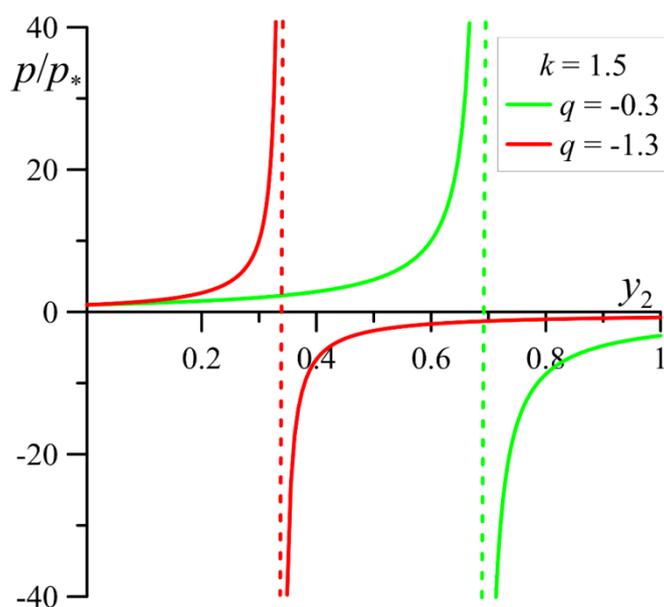


Рис. 4. Зависимость приведенного шага спирали p/p_* от объемной доли примесной компоненты y_2 для смеси правоспирального и левоспирального холестериков ($q < 0$)

На рис. 4 показаны концентрационные зависимости шага спирали смеси правоспирального и левоспирального холестериков. Эти зависимости построены для двух значений параметра q , отрицательное значение которого соответствует различным направлениям закрутки спирали холестериков. Из рисунка видно, что можно подобрать такое значение объемной доли примесной компоненты y_2 , что в отсутствие внешнего поля бинарная смесь будет иметь нематическую структуру (шаг $p = \infty$). Соответствующее критическое значение y_2 определяет точку инверсии шага, при переходе через которую правовинтовая ориентационная структура холестерической смеси сменяется левовинтовой. При увеличении параметра q по абсолютной величине происходит сдвигание точки инверсии шага смеси в область меньших концентраций второй компоненты.

Список литературы

1. *Blinov L. M., Chigrinov V. G.* Electrooptic Effects in Liquid Crystal Materials. Springer, New York, 1994. 464 p.
2. *Stewart I. W.* The Static and Dynamic Continuum Theory of Liquid Crystals. Taylor & Francis, London and New York, 2004. 360 p.
3. *Беляков В. А., Сонин А. С.* Оптика холестерических жидких кристаллов. М.: Наука, 1982. 360 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОКОНВЕКЦИИ СЛАБОПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ В НЕВЕСОМОСТИ ПРИ НИЗКИХ ЧАСТОТАХ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

А. С. Кузнецов, В. А. Ильин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Изучена электроконвекция неизотермической слабопроводящей жидкости в переменном электрическом поле горизонтального слоя. Рассматривается электрокондуктивный механизм зарядообразования. На основе маломодовой модели исследовано влияние низкочастотного поля на нелинейные режимы электроконвекции в невесомости. Изучены гистерезисы и сценарии перехода к хаосу.

Ключевые слова: электроконвекция; слабопроводящая жидкость

INVESTIGATION OF ELECTROCONVECTION MODEL POORLY CONDUCTING LIQUID IN WEIGHTLESSNESS AT LOW FREQUENCIES ELECTRIC FIELD

A. S. Kuznetsov, V. A. Il'in

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

Electroconvection of a nonisothermal poorly conducting liquid in an alternating electric field of a horizontal layer has been studied. The electroconductive mechanism of charge formation is considered. The effect of field in low frequencies on nonlinear regimes of electroconvection in weightlessness is investigated on the basis of a low-mode model. Hysteresis and scenarios of transition to chaos are studied.

Keywords: electroconvection; poorly conductive liquid

Движение жидкостей в электрическом поле привлекает внимание тем, что представляет собой способ прямого преобразования энергии электрического поля в энергию движения жидкой среды [1]. В электрическом поле в жидкости могут происходить различные процессы и движения [2, 3]. С практической точки зрения знание законов действия электрического поля на конвективные течения актуально в связи с проблемой эффективного управления конвекцией, тепло- и массопереносом в различных технологических ситуациях, например, в электрогидродинамических насосах и немеханических переключателях.

Существует несколько механизмов электроконвекции в диэлектрических жидкостях [2, 3]. Неустойчивость и электроконвекция в постоянном электрическом поле горизонтального конденсатора при участии электрокондуктивного механизма зарядообразования в слабопроводящих жидкостях рассмотрена в статье [4], влияние переменного электрического поля сред-

них частот на электроконвекцию изучено в [5]. В настоящей работе в аналогичной постановке проведено исследование влияния переменного электрического поля низкой частоты на электроконвекцию слабопроводящей жидкости, находящейся в подогреваемом горизонтальном конденсаторе.

Нелинейные режимы электроконвекции были исследованы на основе маломодовой модели электроконвекции слабопроводящей жидкости [5] (точка над переменными обозначает производную по времени):

$$\begin{aligned}\dot{X} &= \text{Pr}(-X + rY + eW \cos^2 2\pi\nu t), \\ \dot{Y} &= -Y + X + XZ, \\ \dot{Z} &= -bZ - XY, \\ \dot{V} &= \text{Pr}\left(-dV + (rW - eY \cos^2 2\pi\nu t)/d\right), \\ \dot{W} &= -dW + V.\end{aligned}$$

Здесь X, Y, Z, V, W – перемасштабированные амплитуды, характеризующие различные пространственные моды функции тока, температуры и плотности заряда; Pr – число Прандтля; r, e – нормированные тепловое и электрическое числа Рэлея; b, d – геометрические параметры, зависящие от волнового числа; ν – частота электрического поля; t – время.

Параметры жидкости при исследовании случая невесомости ($g = 0$) выбраны следующие [4, 5]: $\text{Pr} = 100$; волновое число $k = 0.962$, соответствующее минимуму нейтральной кривой, даёт значения геометрических параметров: $b = 2.077$, $d = 2.56$. Система уравнений решалась методом Рунге-Кутты с постоянными начальными условиями или методом продолжения по параметру для различных значений e и ν . Исследование проведено для низких частот электрического поля.

Приведём полученные результаты для частоты внешнего электрического поля $\nu = 0.05$. Вначале вычисления были проведены с постоянными начальными условиями: $X = 0, Y = 0.5, Z = 0, V = 0, W = 0$. Ниже критического значения электрического числа жидкость находится в равновесии. При $e = 67.81$ возникает колебательным образом конвекция и устанавливается периодический режим движения жидкости (рис. 1). Из рис. 1 видно, что колебания состоят из отдельных «всплесков». На спектре частот, полученном в результате Фурье-анализа (рис. 2), присутствует определённый набор частот. «Всплески» носят не хаотический, а периодический характер.

При рассматриваемой нами частоте внешнего поля $\nu = 0.05$ все частоты Фурье-спектра (рис. 2) являются комбинацией внешней частоты и могут быть обобщены формулой $(2n + 1)\nu$, где n – целое число. Т. е. в спектре содержится частота внешнего поля и её нечётные гармоники. Это синхронные колебания. Подобные колебания были описаны ранее в работе [6], в частности, они были разделены на три следующих типа: тип, содержащий только нечётные гармоники частоты внешнего поля; тип, содержащий только чёт-

ные гармоники и комбинация предыдущих двух типов, содержащая как чётные, так и нечётные гармоники. Колебания, обнаруженные при $e = 67.81$, относятся к первому типу.

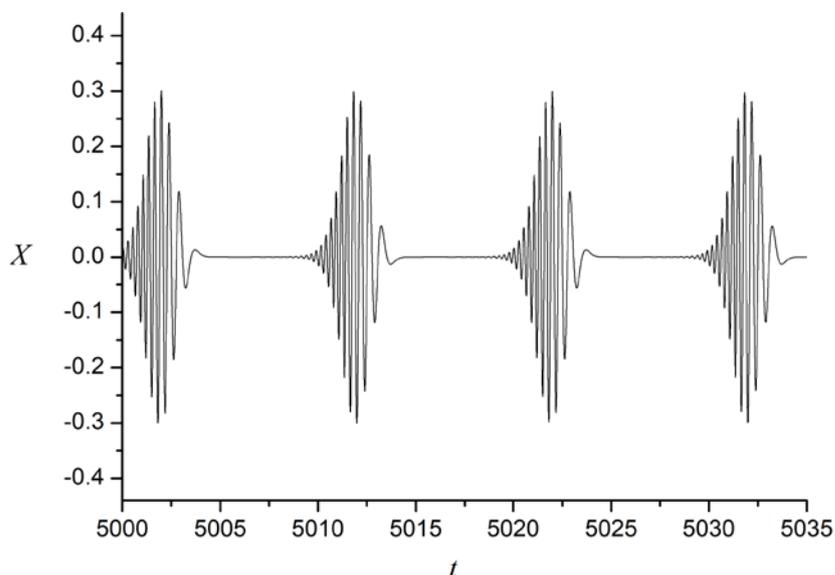


Рис. 1. Зависимость X от времени при $e = 67.81$ в интервале от $t = 5000$ до $t = 5035$ (видны отдельные «всплески»)

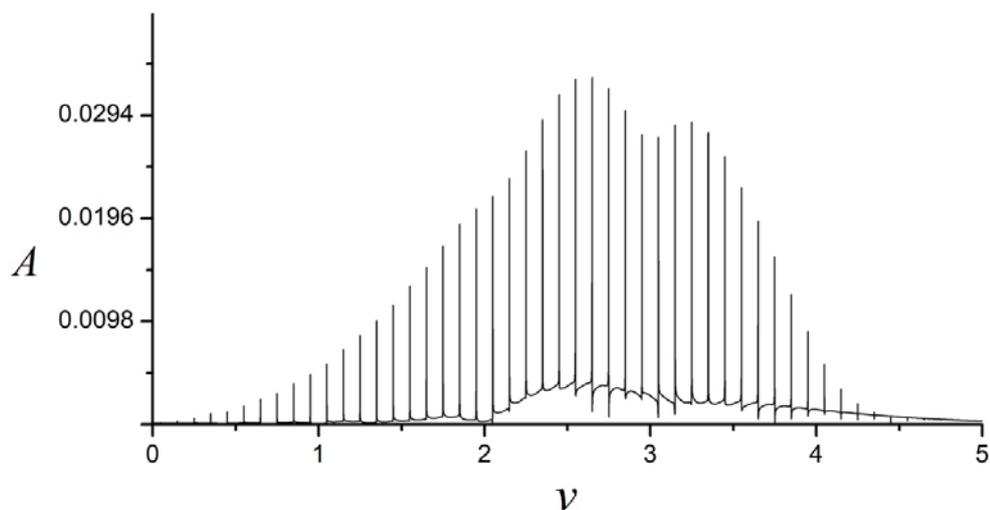


Рис. 2. Спектр Фурье при $e = 67.81$

С ростом электрического параметра (приложенного напряжения в конденсаторе) амплитуда синхронного режима растёт, а затем он исчезает и устанавливается равновесие. При $e = 69.38$ возникает синхронный режим второго типа, в его спектре содержатся чётные гармоники внешней частоты: $2n\nu$. Затем в некотором интервале параметров существует периодический режим, в спектре которого присутствует частота, равная половине внешней частоты, и её нечётные гармоники – это субгармонический режим. Вычисления с постоянными начальными условиями показали, что этот режим переходит в синхронный режим 2 типа.

При дальнейшем увеличении электрического параметра e происходит бифуркация удвоения периода – возникает частота в два раза меньше, затем происходит ещё одно удвоение и так происходит до тех пор, пока не возникнет хаос. Фурье-спектр для $e = 69.8450$ приведён на рис. 3.

Первые четыре значения параметра e , при которых происходит удвоение периода, равны соответственно: $e_1 = 69.7729$, $e_2 = 69.8422$, $e_3 = 69.8567$ и $e_4 = 69.8599$. Постоянная Фейгенбаума [7], вычисленная по первым трём значениям, получилась равной: $\delta = 4.7793$; вычисления по следующим трём значениям дали значение: $\delta = 4.5123$. Т. е. можно с уверенностью говорить, что в данной области реализуется сценарий перехода к хаосу через последовательность бифуркаций удвоения периода – сценарий Фейгенбаума [7]. При $e = 69.87$ происходит переход к хаосу, при котором спектр Фурье становится сплошным.

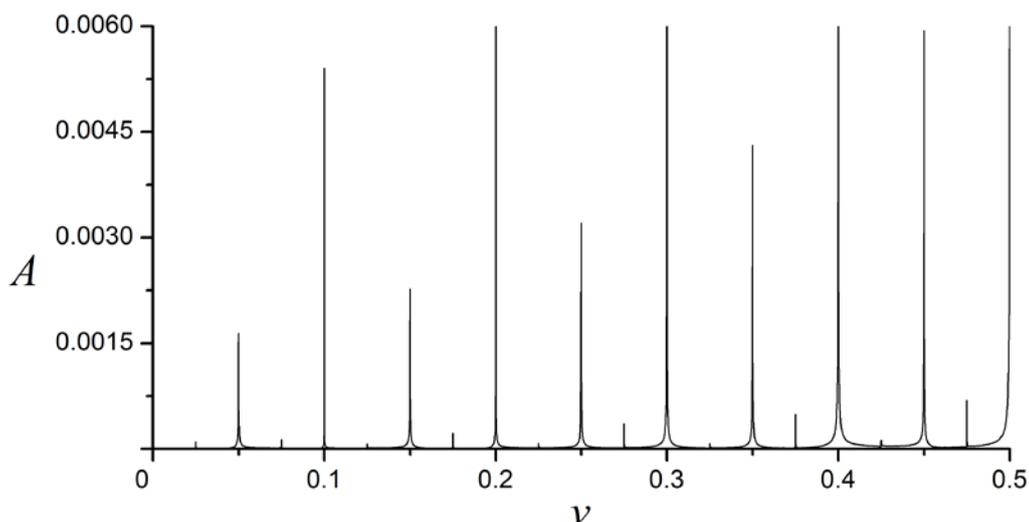


Рис. 3. Участок Фурье-спектра при $e = 69.8450$

После расчётов методом продолжения по параметру было выявлено более сложное поведение. Были обнаружены гистерезисные переходы между тремя режимами. Они хорошо видны при вычислении зависимости безразмерного теплопотока (числа Нуссельта [5]) в зависимости от нормированного электрического числа Рэлея (рис. 4). Оказалось, что первый синхронный режим продолжает существовать при больших значениях параметра e . При $e = 70.47$ он переходит к хаотическому режиму через перемежаемость [6].

В интервале параметров электрического числа от 67.81 до 68.58 существует только 1 режим, от 68.59 до 69.37 конкурируют 1 режим и равновесие, от 69.38 до 69.56 сосуществуют режим 1 и 2. В интервале от 69.57 до 69.61 конкурируют 3 режима: два синхронных (1 и 2 режимы) и один субгармонический (3 режим). Переход к хаосу в 3 субгармоническом режиме происходит при $e = 69.607$ по сценарию Фейгенбаума (постоянная Фейген-

баума получилась равной $\delta = 5$). В интервале от 69.62 до 69.94 конкурируют 1 и 2 синхронные режимы. При 69.95 режим 2 переходит в режим 1.

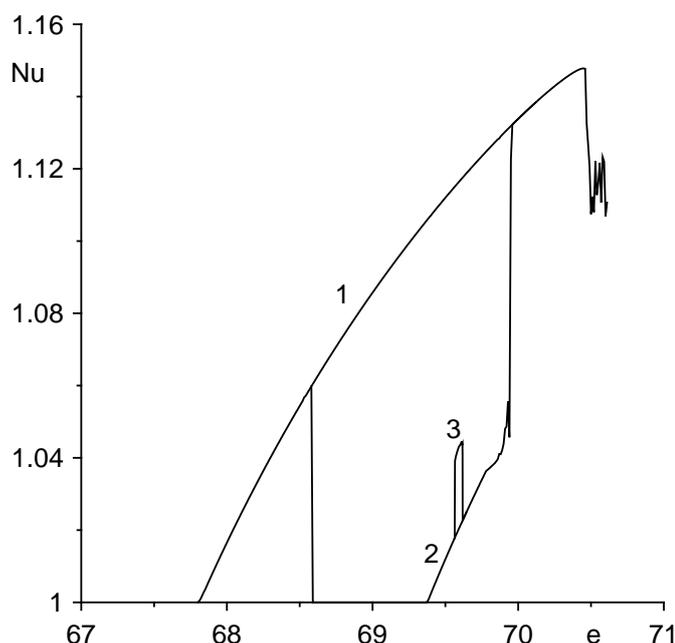


Рис. 3. Зависимость числа Нуссельта от электрического числа Рэлея (1 – синхронный режим 1 типа, 2 – синхронный режим 2 типа, 3 – субгармонический режим)

Список литературы

1. *Остроумов Г. А.* Взаимодействие электрических и гидродинамических полей: Физические основы электрогидродинамики. М.: Наука, 1979. 319 с.
2. *Болога М. К., Гросу Ф. П., Кожухарь И. А.* Электроконвекция и теплообмен. Кишинев: Штиинца, 1977. 320 с.
3. *Саранин В. А.* Устойчивость равновесия, зарядка, конвекция и взаимодействие жидких масс в электрических полях. М.; Ижевск: НИЦ РХД, 2009. 332 с.
4. *Ильин В. А.* Электроконвекция слабопроводящей жидкости в постоянном электрическом поле // Журнал технической физики. 2013. Т. 83. Вып. 1. С. 64–73.
5. *Картавых Н. Н., Смородин Б. Л., Ильин В. А.* Параметрическая электроконвекция слабопроводящей жидкости в горизонтальном плоском конденсаторе // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 148. Вып. 1 (7). С. 178–189.
6. *Картавых Н. Н.* Движение слабопроводящей жидкости в горизонтальном конденсаторе при нагреве снизу // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2017. Вып. 1 (35). С. 41–53.
7. *Фрик П. Г.* Турбулентность: подходы и модели. Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. 292 с.

УРАВНЕНИЯ ОРИЕНТАЦИОННОГО РАВНОВЕСИЯ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА В СКРЕЩЕННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ И МАГНИТНОМ ПОЛЯХ В РАМКАХ СФЕРИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

А. С. Лисобой, Д. А. Петров

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Рассмотрена молекулярно-статистическая теория среднего поля нематического жидкого кристалла, помещенного в скрещенные электрическое и магнитное поля. Использовано известное в физике ферромагнетиков сферическое приближение, которое позволяет найти аналитическое выражение для свободной энергии и получить алгебраическое уравнение ориентационного состояния нематического жидкого кристалла, описывающие температурные и полевые зависимости параметра порядка.

Ключевые слова: жидкий кристалл; фазовые переходы; сферическое приближение

ORIENTATIONAL EQUILIBRIUM EQUATIONS OF A LIQUID CRYSTAL IN CROSSED ELECTRIC AND MAGNETIC FIELDS IN THE FRAMEWORK OF THE SPHERICAL APPROXIMATION

A. S. Lisoboy, D. A. Petrov

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The molecular statistical mean-field theory of a nematic liquid crystal placed in crossed electric and magnetic fields is considered. The spherical approximation, known in ferromagnetic materials, is used, which allows us to obtain an analytical expression for the free energy and an algebraic equation for the orientational state of a nematic liquid crystal, describing the temperature and field dependences of the order parameter.

Keywords: liquid crystal; phase transitions; spherical approximation

Введение

Майером и Заупе [1] была предложена относительно простая молекулярно-статистическая теория нематического упорядочения жидких кристаллов (ЖК). Основанная на модели среднего поля, по аналогии с Вейссовой теорией ферромагнетизма, эта теория позволяет вычислить температурные зависимости параметра порядка, которые удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. Модель среднего поля хоть и принадлежит к классу точно решаемых моделей, но в ней для одноосного случая требуется численно решать нелинейное интегральное уравнение самосогласования для одного параметра порядка.

Для описания поведения ЖК в скрещенных электрическом и магнитном полях нами предлагается использовать сферическое приближение [2, 3], известное в теории магнетизма, для получения простой версии модели среднего поля. В рамках такого подхода удастся точно вычислить статистический интеграл и найти все необходимые средние по ансамблю.

Молекулярно-статистический подход

С грубой стерической точки зрения молекула нематического жидкого кристалла (НЖК) представляет собой твердый стержень с отношением длины к толщине порядка четырех. Ориентацию такой палочкообразной молекулы в точке \mathbf{r}_α будем описывать симметричным бесследовым тензором второго ранга

$$v_{ik}^\alpha = \sqrt{\frac{3}{2}} \left(v_{ai} v_{ak} - \frac{1}{3} \delta_{ik} \right), \quad (1)$$

где \mathbf{v}_α – единичный вектор вдоль главной оси α -ой молекулы нематика ($\alpha = 1, \dots, N$, где N – число молекул). Нормировочный коэффициент в определении (1) выбран так, что $v_{ik}^\alpha v_{ik}^\alpha = 1$. Макроскопический тензор ориентации получается путем статистического усреднения тензора (1)

$$\eta_{ik} = \langle v_{ik}^\alpha \rangle. \quad (2)$$

Представим тензор (2) через единичный вектор, определяющий главную ось нематического порядка \mathbf{n} (единственное макроскопически выделенное направление)

$$\eta_{ik} = \sqrt{\frac{3}{2}} \eta \left(n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} \right). \quad (3)$$

Здесь введен скалярный параметр порядка

$$\eta = \frac{3}{2} \langle (\mathbf{n}\mathbf{v})^2 \rangle - \frac{1}{2} = \langle P_2(\mathbf{n}\mathbf{v}) \rangle, \quad (4)$$

P_2 – второй полином Лежандра. Область изменения параметра η представляет интервал от $-1/2$ до 1.

Полный гамильтониан НЖК в магнитном и электрическом полях имеет вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{orien} + \mathcal{H}_H + \mathcal{H}_E. \quad (5)$$

Здесь ориентационная часть энергии парного взаимодействия молекул ЖК имеет вид

$$\mathcal{H}_{orien} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta}^N A(r_{\alpha\beta}) v_{ik}^\alpha v_{ik}^\beta, \quad (6)$$

где $A > 0$ – потенциал взаимодействия, зависящий от расстояния $r_{\alpha\beta} = |\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|$ между центрами масс двух молекул, находящихся соответственно в точках \mathbf{r}_α и \mathbf{r}_β . Оставшиеся два вклада в (5) соответственно отвечают за энергию взаимодействия молекул ЖК с магнитным \mathbf{H} и электрическим \mathbf{E} полями

$$\mathcal{H}_H = - \sum_{\alpha=1}^N \sqrt{\frac{2}{3}} \chi_a^n v_{ik}^\alpha H_i H_k, \quad \mathcal{H}_E = - \sum_{\alpha=1}^N \sqrt{\frac{2}{3}} \varepsilon_a^n v_{ik}^\alpha E_i E_k, \quad (7)$$

где χ_a^n и ε_a^n – анизотропии диамагнитной восприимчивости и диэлектрической проницаемости молекулы ЖК соответственно.

Для перехода от микроскопического гамильтониана (5) к гамильтониану среднего поля \mathcal{H}_{mf} представим тензор ориентации молекулы ЖК v_{ik}^α как сумму статистического среднего (2) и флуктуации

$$v_{ik}^\alpha = \eta_{ik} + (v_{ik}^\alpha - \eta_{ik}) \quad (8)$$

и подставим в (6). В результате пренебрежения квадратами флуктуациями параметра порядка, т.е. слагаемыми вида $(v_{ik}^\alpha - \eta_{ik})(v_{ik}^\beta - \eta_{ik})$, полный гамильтониан (5) в приближении среднего поля примет вид

$$\mathcal{H}_{mf} = \frac{1}{2} N \lambda \eta_{ik} \eta_{ik} - \sum_{\alpha}^N \left[\lambda \eta_{ik} + \sqrt{\frac{2}{3}} \chi_a^n H_i H_k + \sqrt{\frac{2}{3}} \varepsilon_a^n E_i E_k \right] v_{ik}^\alpha. \quad (9)$$

Здесь введено обозначение для константы среднего поля, которая зависит от числа частиц, их геометрических размеров и сил, действующих между ними

$$\lambda \equiv \sum_{\beta}^N A(r_{\alpha\beta}). \quad (10)$$

Сферическое приближение

Воспользуемся теперь так называемой сферической связью [3] и откажемся от условия единичности вектора \mathbf{v}_α

$$\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{v}_\alpha^2 = N. \quad (11)$$

Условие (11) учтем с помощью метода множителей Лагранжа, тогда гамильтониан (9) переписется в виде

$$\tilde{\mathcal{H}}_{mf} = \frac{1}{2} N \lambda \eta_{ik} \eta_{ik} - \sum_{\alpha}^N \left[\lambda \eta_{ik} + \sqrt{\frac{2}{3}} \chi_a^n H_i H_k + \sqrt{\frac{2}{3}} \varepsilon_a^n E_i E_k \right] v_{ik}^\alpha +$$

$$+\mu \left[\sum_{\alpha=1}^N \mathbf{v}_{\alpha}^2 - N \right]. \quad (12)$$

Здесь μ – неопределенный множитель Лагранжа.

Тензор ориентации молекулы ЖК нужно переписать в следующем виде

$$v_{ik}^{\alpha} = \sqrt{\frac{3}{2}} \left(v_{\alpha i} v_{\alpha k} - \frac{1}{3} \mathbf{v}_{\alpha}^2 \delta_{ik} \right), \quad (13)$$

так как в сферическом приближении вектор \mathbf{v}_{α} для индивидуальной молекулы не является единичным.

Будем полагать, что директор ЖК, определяющий главную ось нематического порядка, в отсутствие внешних полей направлен вдоль оси z декартовой системы координат, т.е. имеет вид $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$. Внешние магнитное и электрическое поля соответственно направим вдоль оси z и y , т.е. $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ и $\mathbf{E} = (0, E, 0)$. Теперь можно вычислить все свертки в гамильтониане (12), после чего получим

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_{mf} = & N \left(\frac{1}{2} \lambda \eta^2 - \mu \right) + \sum_{\alpha=1}^N \left[\left(\mu + \frac{1}{2} \lambda \eta + \frac{1}{3} \chi_a^n H^2 + \frac{1}{3} \varepsilon_a^n E^2 \right) v_{\alpha_x}^2 \right. \\ & \left. + \left(\mu + \frac{1}{2} \lambda \eta + \frac{1}{3} \chi_a^n H^2 - \frac{2}{3} \varepsilon_a^n E^2 \right) v_{\alpha_y}^2 + \left(\mu - \lambda \eta - \frac{2}{3} \chi_a^n H^2 + \frac{1}{3} \varepsilon_a^n E^2 \right) v_{\alpha_z}^2 \right]. \quad (14) \end{aligned}$$

Выражение (14) позволяет вычислить статистический интеграл

$$Z = Sp \exp \left\{ -\frac{\tilde{\mathcal{H}}_{mf}}{k_B T} \right\}. \quad (15)$$

В результате использования сферического приближения все встречающиеся в (15) интегралы удастся точно вычислить по формуле

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (16)$$

где $a > 0$. При использовании (16) нужно учитывать, что множитель Лагранжа μ должен удовлетворять следующим условиям

$$\begin{aligned} \left(\mu + \frac{1}{2} \lambda \eta + \frac{1}{3} \chi_a^n H^2 + \frac{1}{3} \varepsilon_a^n E^2 \right) > 0, \quad \left(\mu + \frac{1}{2} \lambda \eta + \frac{1}{3} \chi_a^n H^2 - \frac{2}{3} \varepsilon_a^n E^2 \right) > 0, \\ \left(\mu - \lambda \eta - \frac{2}{3} \chi_a^n H^2 + \frac{1}{3} \varepsilon_a^n E^2 \right) > 0, \quad (17) \end{aligned}$$

в результате чего получим

$$Z = \exp\left\{-\frac{N}{k_B T} \left(\frac{1}{2}\lambda\eta^2 - \mu\right)\right\} \left(\frac{\pi k_B T}{\mu + \frac{1}{2}\lambda\eta + \frac{1}{3}\chi_a^n H^2 + \frac{1}{3}\varepsilon_a^n E^2}\right)^{\frac{N}{2}} \times$$

$$\left(\frac{\pi k_B T}{\mu + \frac{1}{2}\lambda\eta + \frac{1}{3}\chi_a^n H^2 - \frac{2}{3}\varepsilon_a^n E^2}\right)^{\frac{N}{2}} \left(\frac{\pi k_B T}{\mu - \lambda\eta - \frac{2}{3}\chi_a^n H^2 + \frac{1}{3}\varepsilon_a^n E^2}\right)^{\frac{N}{2}}. \quad (18)$$

Найденный статистический интеграл позволяет определить выражение для свободной энергии

$$F = -k_B T \ln Z = N \left[\frac{1}{2}\lambda\eta^2 - \mu - \frac{3}{2}k_B T \cdot \ln(\pi k_B T) \right.$$

$$+ \frac{1}{2}k_B T \ln\left(\mu + \frac{1}{2}\lambda\eta + \frac{1}{3}\chi_a^n H^2 + \frac{1}{3}\varepsilon_a^n E^2\right)$$

$$+ \frac{1}{2}k_B T \ln\left(\mu + \frac{1}{2}\lambda\eta + \frac{1}{3}\chi_a^n H^2 - \frac{2}{3}\varepsilon_a^n E^2\right)$$

$$\left. + \frac{1}{2}k_B T \ln\left(\mu - \lambda\eta - \frac{2}{3}\chi_a^n H^2 + \frac{1}{3}\varepsilon_a^n E^2\right) \right]. \quad (19)$$

Из условий термодинамического равновесия

$$\frac{\partial F}{\partial \eta} = \frac{\partial F}{\partial \mu} = 0, \quad (20)$$

получим систему уравнений

$$\frac{2\eta}{k_B T} = \frac{1}{\mu - \lambda\eta - \frac{2}{3}\chi_a^n H^2 + \frac{1}{3}\varepsilon_a^n E^2}$$

$$- \frac{1}{2\left(\mu + \frac{1}{2}\lambda\eta + \frac{1}{3}\chi_a^n H^2 + \frac{1}{3}\varepsilon_a^n E^2\right)} - \frac{1}{2\left(\mu + \frac{1}{2}\lambda\eta + \frac{1}{3}\chi_a^n H^2 - \frac{2}{3}\varepsilon_a^n E^2\right)}, \quad (21)$$

$$\frac{2}{k_B T} = \frac{1}{\mu - \lambda\eta - \frac{2}{3}\chi_a^n H^2 + \frac{1}{3}\varepsilon_a^n E^2}$$

$$+ \frac{1}{\mu + \frac{1}{2}\lambda\eta + \frac{1}{3}\chi_a^n H^2 + \frac{1}{3}\varepsilon_a^n E^2} + \frac{1}{\mu + \frac{1}{2}\lambda\eta + \frac{1}{3}\chi_a^n H^2 - \frac{2}{3}\varepsilon_a^n E^2}, \quad (22)$$

из которой нужно исключить лагранжев множитель μ так, чтобы условия (17) оказались выполнены, в результате получим

$$\mu = \frac{3k_B T}{2(2\eta + 1)} + \lambda\eta + \frac{2}{3}\chi_a^n H^2 - \frac{1}{3}\varepsilon_a^n E^2. \quad (23)$$

После подстановки (23) в (22) и преобразования, получаем следующее уравнение ориентационного состояния, определяющее зависимость параметра порядка η от безразмерных температуры $\tau = k_B T / \lambda$, магнитного $h = \sqrt{\chi_a^n / \lambda} H$ и электрического $e = \sqrt{\varepsilon_a^n / \lambda} E$ полей

$$\begin{aligned} & 3\tau[9\tau\eta + (3\eta + 2h^2 - e^2)(4\eta - 1)(2\eta + 1)] \\ & = (3\eta + 2h^2 - 2e^2)(3\eta + 2h^2)(1 - \eta)(2\eta + 1)^2. \end{aligned} \quad (24)$$

В предельном случае отсутствия внешних полей $h = 0$ и $e = 0$ из (24) получаем уравнение

$$\eta[\tau + \eta(2\eta + 1)][3\tau + (1 - \eta)(2\eta + 1)] = 0. \quad (25)$$

Здесь нужно отметить, что (25) кроме известных решений [2]

$$\eta = 0, \quad \eta = \frac{1}{4} \left(1 \pm 3 \sqrt{1 - \frac{8}{3}\tau} \right) \quad (26)$$

содержит еще два решения для параметра порядка

$$\eta = -\frac{1}{4} (1 \pm \sqrt{1 - 8\tau}), \quad (27)$$

которые не могут быть положительными (ориентационная анизотропия типа “легкая плоскость”) и отвечают термодинамически неустойчивым состояниям нематика.

Заключение

Методом среднего поля в рамках сферического приближения, известного в теории магнетизма [2, 3], построена молекулярно-статистическая теория НЖК, помещенного в скрещенные магнитное и электрическое поля. В результате удалось точно вычислить статистический интеграл, найти свободную энергию и получить уравнение ориентационного равновесия НЖК, имеющее относительно простой алгебраический вид.

Список литературы

1. Де Жен П. Физика жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.
2. Захлевных А. Н. Физика фазовых переходов в жидких кристаллах: учебно – метод. пособие. Перм. гос. ун-т, 2007. 127 с.
3. Vertogen G., Van Der Meer B. W. A simple molecular statistical treatment of nematics // Physica. 1979. Vol. 99A. P. 237–250.

ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОКОНВЕКЦИИ СЛАБОПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ В НЕВЕСОМОСТИ В ПЕРЕМЕННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

П. В. Мыльников, В. А. Ильин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

На основе маломодовой модели изучена электроконвекция неизотермической слабопроводящей жидкости в переменном электрическом поле горизонтального слоя. Рассматривается электрокондуктивный механизм зарядообразования. Исследовано влияние умеренных частот поля на нелинейные режимы электроконвекции в невесомости. Изучены субгармонические колебания жидкости.

Ключевые слова: электроконвекция; слабопроводящая жидкость

INVESTIGATION OF ELECTROCONVECTION MODEL POORLY CONDUCTING LIQUID IN WEIGHTLESSNESS IN AN ALTERNATING ELECTRIC FIELD

P. V. Mylnikov, V. A. Il'in

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

Electroconvection of a nonisothermal poorly conducting liquid in an alternating electric field of a horizontal layer has been studied on the basis of a low-mode model. The electroconductive mechanism of charge formation is considered. The effect of field in moderate frequencies on nonlinear regimes of electroconvection in weightlessness is investigated. Subharmonic oscillations of a liquid are studied.

Keywords: electroconvection; poorly conductive liquid

Движение жидкостей в электрическом поле привлекает внимание тем, что представляет собой способ прямого преобразования энергии электрического поля в энергию движения жидкой среды [1]. В электрическом поле в жидкости могут происходить различные процессы и движения [2, 3]. С практической точки зрения знание законов действия электрического поля на конвективные течения актуально в связи с проблемой эффективного управления конвекцией, тепло- и массопереносом в различных технологических ситуациях, например, в электрогидродинамических насосах и немеханических переключателях.

Существует несколько механизмов электроконвекции в диэлектрических жидкостях [2, 3]. Неустойчивость и электроконвекция в постоянном электрическом поле горизонтального конденсатора при участии электрокондуктивного механизма зарядообразования в слабопроводящих жидкостях рассмотрена в статье [4], влияние переменного электрического поля средних частот на электроконвекцию изучено в [5]. В настоящей работе в

аналогичной постановке проведено исследование влияния переменного электрического поля средних и высоких частот на электроконвекцию слабопроводящей жидкости, находящейся в подогреваемом горизонтальном конденсаторе.

Нелинейные режимы электроконвекции были исследованы на основе маломодовой модели электроконвекции слабопроводящей жидкости [5] (точка над переменными обозначает производную по времени):

$$\begin{aligned}\dot{X} &= \text{Pr}(-X + rY + eW \cos^2 2\pi\nu t), \\ \dot{Y} &= -Y + X + XZ, \\ \dot{Z} &= -bZ - XY, \\ \dot{V} &= \text{Pr}(-dV + (rW - eY \cos^2 2\pi\nu t)/d), \\ \dot{W} &= -dW + V.\end{aligned}$$

Здесь X, Y, Z, V, W – перемасштабированные амплитуды, характеризующие различные пространственные моды функции тока, температуры и плотности заряда; Pr – число Прандтля; r, e – нормированные тепловое и электрическое числа Рэлея; b, d – геометрические параметры, зависящие от волнового числа; ν – частота электрического поля; t – время.

Параметры жидкости при исследовании случая невесомости ($g = 0$) выбраны следующие [4, 5]: $\text{Pr} = 100$; волновое число $k = 0.962$, соответствующее минимуму нейтральной кривой, даёт значения геометрических параметров: $b = 2.077$, $d = 2.56$. Система уравнений решалась методом Рунге-Кутты с постоянными начальными условиями или методом продолжения по параметру для различных значений нормированного электрического числа Рэлея e и частоты электрического поля ν . В данной работе исследование проведено для частоты поля $\nu > 4$. Полученные результаты при общих параметрах соответствуют результатам описанным в статье [5].

По результатам вычислений построена карта нелинейных режимов движения жидкости в зависимости от частоты ν и электрического параметра e (рис. 1). На рис. 1 область I – область равновесия; III – области с квазипериодическим режимом конвекции. Обнаружена область субгармонических колебаний жидкости (область II). Область IV – это область хаотических колебаний. Граница хаоса построена приближённо, поскольку вблизи неё при вычислениях было обнаружено сложное поведение. Переход к хаосу происходит через квазипериодичность или из субгармонических колебаний через перемежаемость.

При расчётах с разными частотами были обнаружены области с субгармоническим поведением. На рис. 1 приведена только одна такая область. Она соприкасается с областью равновесия. Анализ спектров Фурье колебаний в этой области показал, что частоты в ней подчиняются закономерности: $\nu_n = \frac{2n-1}{2}\nu_0$, где $n = 1, 2, \dots$. Т. е. в спектре содержится частота равная по-

ловине внешней частоты и её высшие гармоники. Это свидетельствует о субгармоническом характере конвективных течений.

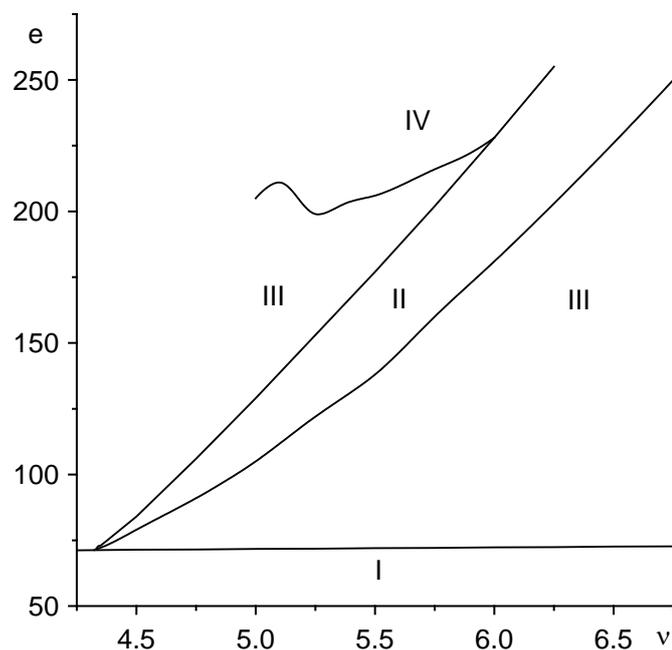


Рис. 1. Карта режимов электроконвекции

Для частоты $\nu = 5$ и $e = 115$ на рис. 2 приведён Фурье-спектр субгармонического сигнала. Из него видно, что при внешней частоте $\nu = 5$ в спектре есть субгармоника 2.5 и её нечётные гармоники: 7.5, 12.5, ...

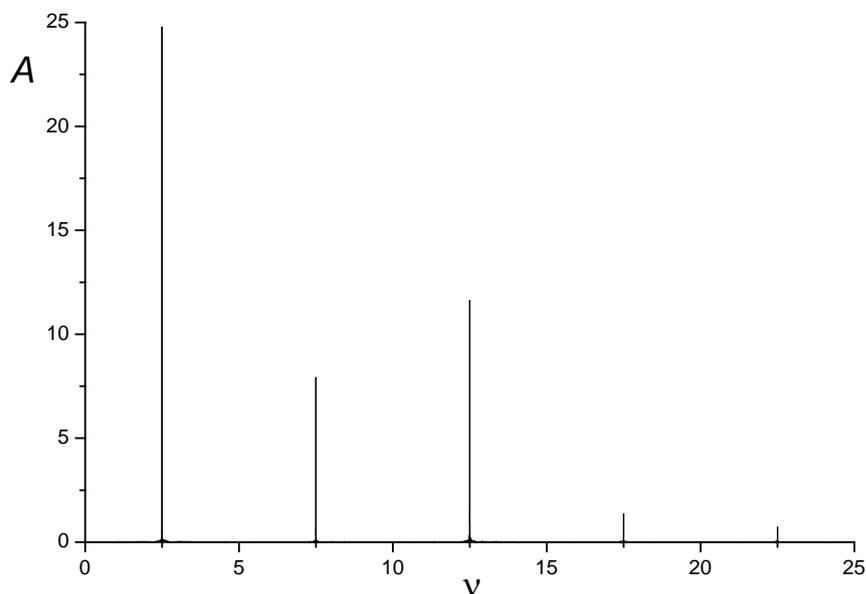


Рис. 2. Спектр Фурье при $\nu = 5$, $e = 115$

Для частоты $\nu = 5$ вычислена зависимость безразмерного теплопотока (числа Нуссельта [5]) от нормированного электрического числа Рэлея (рис. 3). При $e = 72$ возникает квазипериодический режим конвекции, при $e = 105$ квазипериодический режим колебаний сменяется субгармоническим

режимом колебаний, который существует до $e = 129$. При $e = 208$ возникает хаос через квазипериодичность [6].

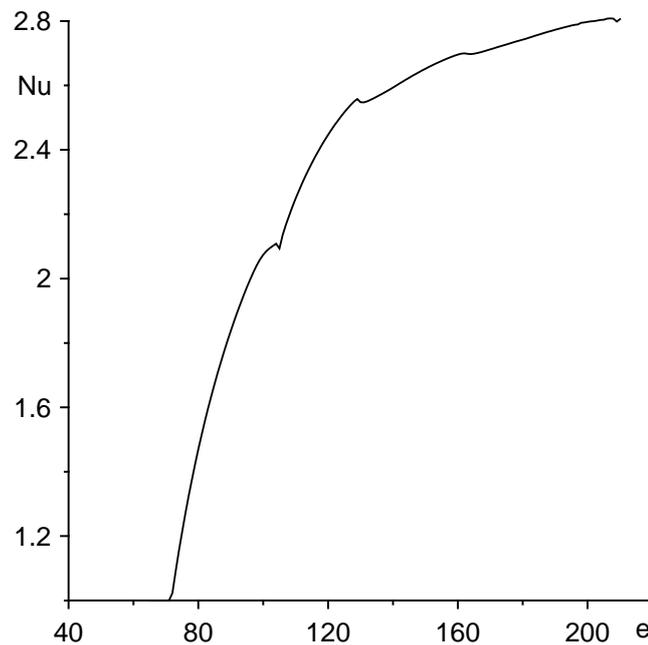


Рис. 3. Зависимость числа Нуссельта от электрического числа Рэлея

Список литературы

1. *Остроумов Г. А.* Взаимодействие электрических и гидродинамических полей: Физические основы электрогидродинамики. М.: Наука, 1979. 319 с.
2. *Болога М. К., Гросу Ф. П., Кожухарь И. А.* Электроконвекция и теплообмен. Кишинев: Штиинца, 1977. 320 с.
3. *Саранин В. А.* Устойчивость равновесия, зарядка, конвекция и взаимодействие жидких масс в электрических полях. М.; Ижевск: НИЦ РХД, 2009. 332 с.
4. *Ильин В. А.* Электроконвекция слабопроводящей жидкости в постоянном электрическом поле // Журнал технической физики. 2013. Т. 83. Вып. 1. С. 64–73.
5. *Картавых Н. Н., Смородин Б. Л., Ильин В. А.* Параметрическая электроконвекция слабопроводящей жидкости в горизонтальном плоском конденсаторе // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 148. Вып. 1 (7). С. 178–189.
6. *Берже П., Помо И., Видаль К.* Порядок в хаосе. О детерминистском подходе к турбулентности. М.: Мир, 1991.

УСТАНОВЛЕНИЕ РАВНОВЕСНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ В ШАРОВОЙ ПОЛОСТИ

Е. А. Пешков, П. В. Краузин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Независимо от начального распределения концентрации коллоидного раствора в поле силы тяжести установится равновесное распределение частиц по высоте. В данной работе аналитически получена эволюция этого переходного процесса в приближении преобладания диффузии над седиментацией для коллоидного раствора, заполняющего шаровую полость. Определено время установления равновесного распределения концентрации.

Ключевые слова: коллоидный раствор; седиментация; шаровая полость

ESTABLISHMENT OF AN EQUILIBRIUM DISTRIBUTION OF CONCENTRATION OF THE COLLOID PARTICLES IN A SPHERICAL CAVITY

E. A. Peshkov, P. V. Krauzin

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

Irrespective of a concentration initial distribution of the colloidal suspension in the gravity field, the equilibrium distribution of particles on height is established. In this paper, the evolution of this transient process is obtained analytically in the approximation of the prevalence of diffusion over sedimentation for a colloidal suspension that fills the spherical cavity. The time to establish the equilibrium concentration distribution is determined.

Keywords: colloidal suspension; sedimentation; spherical cavity

Рассмотрим однородный коллоидный раствор [1], заполняющий шаровую полость радиуса R (рис. 1), в поле тяжести Земли. Установление равновесного распределения концентрации дисперсных частиц происходит под действием двух конкурирующих механизмов: седиментация и диффузия. Седиментация приводит к оседанию частиц, а диффузия – к их равномерному распределению. Динамическому равновесию этих процессов отвечает барометрическое распределение концентрации. Определим кинетику установления равновесного состояния. При этом важно отметить, что коллоидный раствор на макроскопическом уровне будем считать неподвижным. Строго говоря, наличие наклонных границ полости обуславливает формирование градиента концентрации с ненулевой горизонтальной составляющей, что нарушает необходимое условие механического равновесия жидкости [2]. Численное моделирование

процессов переноса примеси в коллоидной смеси при наличии наклонных границ с учетом концентрационной конвекции проведено в [3].

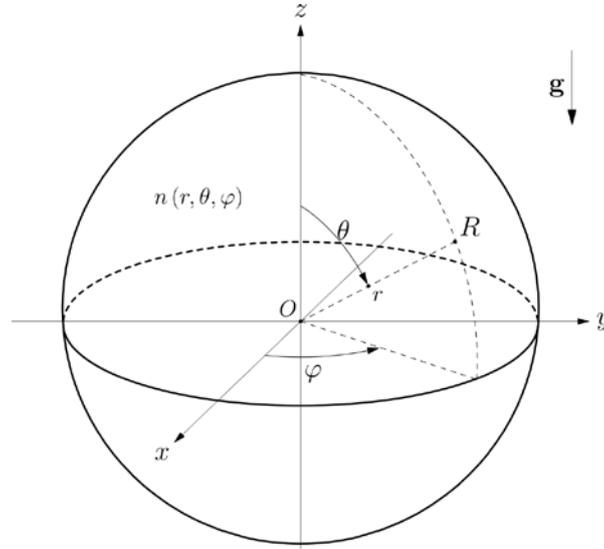


Рис. 1. Шаровая полость

Закон сохранения числа коллоидных частиц имеет вид:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div } \mathbf{j} = 0, \quad (1)$$

где n – концентрация, \mathbf{j} – плотность потока частиц, которая складывается из седиментационной и диффузионной составляющих. Для слабоконцентрированных растворов имеем:

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\text{сед}} + \mathbf{j}_{\text{диф}} = -\frac{D}{l} n \mathbf{e}_z - D \nabla n. \quad (2)$$

Здесь D – коэффициент диффузии, $\mathbf{e}_z = -\mathbf{g}/g$, \mathbf{g} – ускорение свободного падения, l – длина седиментации, характеризующая высоту, на которой концентрация примеси изменяется в e раз и определяется соотношением

$$l = \frac{k_B T}{m_* g},$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – температура, $m_* = v(\rho_p - \rho_s)$, v – объем дисперсной частицы, ρ_p , ρ_s – плотность частицы и дисперсионной жидкости соответственно.

Подставляя (2) в (1), получим уравнение для концентрации:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} - \frac{D}{l} \mathbf{e}_z \cdot \nabla n - D \Delta n &= 0, \\ t = 0: \quad n &= \bar{n}, \\ r = R: \quad \left(\frac{D}{l} n \mathbf{e}_z + D \nabla n \right) \cdot \mathbf{e}_r &= 0. \end{aligned}$$

В начальном условии \bar{n} – средняя концентрация; граничное условие записано из требования равенства нулю нормальной к стенкам полости составляющей потока – условие непроницаемости. Также приняты обозначения: r – длина радиус вектора, построенного из центра сферической полости, e_r – единичный вектор внешней нормали границы полости.

Выберем следующие масштабы: длины – радиус полости R , времени – R^2/D , концентрации – \bar{n} . При этом в задаче возникает единственный безразмерный параметр $\lambda = l/R$, который одновременно имеет несколько значений: безразмерная седиментационная длина; отношение характерных времен – седиментационное к диффузионному; безразмерная стоксовая скорость осаждения частицы; и наконец, отношение характерных энергий – потенциальной к тепловой.

Таким образом, безразмерное дифференциальное уравнение, описывающее эволюцию концентрации коллоидных частиц в сферической полости, с заданным начальным и граничным условием имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} - \frac{1}{\lambda} e_z \cdot \nabla n - \Delta n &= 0, \\ t = 0: \quad n &= 1, \\ r = 1: \quad \left(\frac{1}{\lambda} n e_z + \nabla n \right) \cdot e_r &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Данное уравнение может быть решено аналитически лишь приближенно. Рассмотрим случай $\lambda \gg 1$ – приближение большой длины седиментации, когда процесс седиментации преобладает над диффузией. Ввиду малости обратной величины $1/\lambda$, неизвестную функцию концентрации n можно представить в виде разложения в степенной ряд:

$$n = n_0 + n_1 \frac{1}{\lambda} + n_2 \frac{1}{\lambda^2} + \dots, \quad (4)$$

где n_0 – решение невозмущенной задачи (без седиментации), n_1 – решение в первом приближении и т. д.

Подставляя (4) в (3), получим уравнения для нахождения функций концентрации в нулевом и i -ом приближении ($i \geq 1$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_0}{\partial t} - \Delta n_0 &= 0, & \frac{\partial n_i}{\partial t} - \Delta n_i &= e_z \cdot \nabla n_{i-1}, \\ t = 0: \quad n_0 &= 1, & t = 0: \quad n_i &= 0, \\ r = 1: \quad \frac{\partial n_0}{\partial r} &= 0, & r = 1: \quad \frac{\partial n_i}{\partial r} &= -n_{i-1} \cos \theta. \end{aligned}$$

Перейдем к решению уравнения для n_0 . Отметим несколько особенностей: начальное распределение однородно и всюду равно 1, в

уравнении присутствует только диффузионное слагаемое. Эти два условия дают жидкости способность поддерживать свою однородность сколь угодно долго. Поэтому решением невозмущенной задачи является начальное распределение, т. е. $n_0 = 1$.

При решении уравнения для n_1 избавимся от неоднородности в граничном условии: для этого будем искать решение в виде $n_1 = n_1^{(1)} + n_1^{(2)}$, где $n_1^{(1)}$ – новая неизвестная функция, а $n_1^{(2)} = -r \cos \theta$. При этом уравнение для $n_1^{(1)}$ запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1^{(1)}}{\partial t} - \Delta n_1^{(1)} &= 0, \\ t = 0: \quad n_1^{(1)} &= r \cos \theta, \\ r = 1: \quad \frac{\partial n_1^{(1)}}{\partial r} &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

После подстановки в (5) решения в виде $n_1^{(1)}(r, \theta, t) = R(r)\Theta(\theta)T(t)$, согласно методу разделения переменных, получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial R}{\partial r} + R \left(\mu^2 - \frac{m}{r^2} \right) &= 0, & R_{s,k} &= A_{s,k} \frac{J_\nu(\mu_k r)}{\sqrt{r}}, & \nu &= \frac{\sqrt{4m+1}}{2}, \\ \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \theta^2} + \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} + m\Theta &= 0, & \Theta_s &= P_s(\cos \theta), & m &= s(s+1), \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mu^2 T &= 0, & T_k &= e^{-\mu_k^2 t}, \end{aligned}$$

где J_ν – функция Бесселя первого рода порядка ν , P_s – полином Лежандра порядка s . Спектр собственных значений μ_k определяется граничным условием и является решением трансцендентного уравнения:

$$2\mu_k \operatorname{ctg} \mu_k + \mu_k^2 - 2 = 0.$$

Применение начального условия дает ограничение на собственные значения $s = 1$, что соответствует $\nu = 3/2$. Полное решение для $n_1^{(1)}$ – это бесконечная сумма частных решений:

$$n_1^{(1)}(r, \theta, t) = \sum_{k=1}^{\infty} A_k \frac{J_{3/2}(\mu_k r)}{\sqrt{r}} e^{-\mu_k^2 t} \cos \theta.$$

Коэффициенты A_k определяются по теореме Стеклова:

$$A_k = \frac{\int_0^1 J_{3/2}(\mu_k r) r^{5/2} dr}{\int_0^1 J_{3/2}^2(\mu_k r) r dr} = \frac{J_{5/2}(\mu_k)}{\mu_k \int_0^1 J_{3/2}^2(\mu_k r) r dr}.$$

Делая обратную замену $n_1 = n_1^{(1)} - r \cos \theta$, и подставляя n_1 в (4), получим искомую функцию n в первом порядке приближения:

$$n(r, \theta, t) \approx 1 + \frac{1}{\lambda} \left(\sum_{k=1}^{\infty} A_k \frac{J_{3/2}(\mu_k r)}{\sqrt{r}} e^{-\mu_k^2 t} \cos \theta - r \cos \theta \right) \quad (6)$$

или в исходных размерных единицах: $\sqrt{}$

$$n(r, \theta, t) \approx \bar{n} \left(1 + \frac{R}{l} \left(\sum_{k=1}^{\infty} A_k J_{3/2} \left(\frac{\mu_k r}{R} \right) e^{-\frac{\mu_k^2 R^2 t}{D}} \sqrt{\frac{R}{r}} \cos \theta - \frac{r}{R} \cos \theta \right) \right).$$

Время установления равновесия определим следующим образом. Рассмотрим шаровой сегмент высотой $\delta \ll R$ (рис. 2), примыкающий к нижней части сферической полости. В эксперименте δ может быть, например, диаметр светового пучка, зондирующего оптическую неоднородность коллоидного раствора.

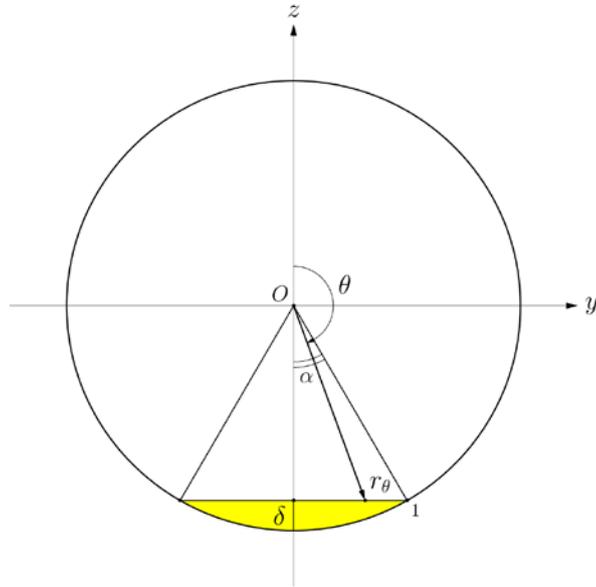


Рис. 2. К оценке времени установления равновесия

Проинтегрируем распределение (6) по объему выделенной области рис. 2, ограничиваясь только долгоживущей модой ($k = 1$) и учитывая третий порядок малости δ/R . Получим величину $N(t)$, описывающую временную зависимость числа частиц в шаровом сегменте:

$$N(t) = \frac{\sqrt{2\pi} A_1}{\lambda \mu_1^{3/2}} (\mu_1 \cos \mu_1 - \sin \mu_1) e^{-\mu_1^2 t} \delta^2 + \left(1 + \frac{1}{\lambda}\right) \pi \delta^2 + O(\delta^3). \quad (7)$$

Полное равновесие наступает при $t \rightarrow \infty$. Однако к моменту времени $t = \tau$, величина $N(\tau)$ будет отличаться от равновесного значения $N(\infty)$ со сколь угодно малой наперед заданной относительной погрешностью ε . Определим конечное время установления равновесия τ соотношением:

$$\frac{N(\infty) - N(\tau)}{N(\infty)} = \varepsilon. \quad (8)$$

Подставляя (8) в (7), получим выражения для времени τ .

$$\tau = \frac{1}{\mu_1^2} \ln \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{A_1}{\mu_1^{3/2}} \frac{1}{1 + \lambda} \frac{\sin \mu_1 - \mu_1 \cos \mu_1}{\varepsilon} \right),$$

справедливое при условии:

$$\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{A_1}{\mu_1^{3/2}} \frac{1}{1 + \lambda} (\sin \mu_1 - \mu_1 \cos \mu_1) > \varepsilon.$$

В размерном виде характерное время установления равновесия, с учетом малости λ , определяется выражением

$$\tau = \frac{R^2}{D \mu_1^2} \ln \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{A_1}{\mu_1^{3/2}} \frac{R}{l} \frac{\sin \mu_1 - \mu_1 \cos \mu_1}{\varepsilon} \right).$$

Подобная зависимость времени релаксации от линейных размеров сосуда была ранее получена в [4] для вертикального столба высотой L в приближении преобладания диффузии:

$$\tau = \frac{L^2}{D \pi^2} \ln \left(\frac{L}{l} \frac{4}{\pi^2 \varepsilon} \right).$$

Список литературы

1. Евстратова К. И., Купина Н. А. Физическая и коллоидная химия. М.: Высшая школа, 1990. 487 с.
2. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
3. Черепанов И. Н., Смородин Б. Л. Перенос примеси наночастиц в сосуде с наклонными боковыми границами // Вестник Пермского университета. Физика. 2018. № 1 (39). С. 81–88.
4. Райхер Ю. Л., Шлиомис М. И. Кинетика установления равновесного распределения концентрации в магнитной жидкости // Приборы и методы измерения физических параметров ферроколлоидов. Свердловск: УрО АН СССР. 1991. С. 27–32.

СПИРАЛЬНАЯ СТРУКТУРА ХОЛЕСТЕРИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА В ОСЦИЛЛИРУЮЩЕМ ПОЛЕ

М. А. Полушкина, Д. В. Макаров

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Теоретически изучено поведение спиральной ориентационной структуры холестерического жидкого кристалла в слабом линейно поляризованном осциллирующем магнитном поле. Получены аналитические выражения для угла поворота директора и шага спирали холестерика. Определено среднее значение шага спирали за период колебаний поля. Проанализированы изменения шага спирали со временем в зависимости от значений напряженности и частоты магнитного поля. Установлено, что спираль холестерика сжимается с увеличением частоты осциллирующего поля.

Ключевые слова: холестерический жидкий кристалл; осциллирующее магнитное поле; шаг спирали

SPIRAL STRUCTURE OF A CHOLESTERIC LIQUID CRYSTAL IN A OSCILLATING FIELD

M. A. Polushkina, D. V. Makarov

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The behavior of the spiral orientational structure of a cholesteric liquid crystal in a weak linearly polarized oscillating magnetic field is theoretically studied. Analytical expressions for the angle of the director rotation and the pitch of cholesteric helix are obtained. The average value of a helix pitch for the period of field oscillations is determined. The changes in the pitch of the helix with time depending on the strength and frequency of the magnetic field are analyzed. It was ascertained that the cholesteric helix shrinks with increasing frequency of the oscillating field.

Keywords: cholesteric liquid crystal; oscillating magnetic field; helix pitch

Характерной особенностью холестерических жидких кристаллов (ХЖК) является наличие спиральной ориентационной структуры, организованной зеркально несимметричными молекулами [1]. Спиральную структуру ХЖК можно разрушить, например, поместив его в электрическое или магнитное поля [2, 3]. Как показано в [4], комбинированное воздействие сдвигового течения и постоянного магнитного поля приводит к раскручиванию спирали холестерика. Деформации спиральной структуры ХЖК во вращающемся ортогонально оси спирали магнитном поле были недавно исследованы в работе [5].

В настоящей работе рассматривается влияние линейно поляризованного осциллирующего магнитного поля на спираль ХЖК. Аналитически исследуются изменения спиральной ориентационной структуры холестерика в

слабом магнитном поле при различных значениях его напряженности и частоты.

Исследуем динамику ориентационной структуры холестерика под действием осциллирующего магнитного поля. Уравнение движения директора ХЖК имеет следующий вид [1]:

$$\gamma_1 = \frac{dn_i}{dt} = h_i, \quad (1)$$

где γ_1 – коэффициент вращательной вязкости, h_i – молекулярное поле, действующее на директор \mathbf{n} , которое определяется следующим образом:

$$h_i = -\frac{\partial F}{\partial n_i} + \nabla_k \frac{\partial F}{\partial (\nabla_k n_i)}, \quad (2)$$

где F – объёмная плотность свободной энергии холестерика в магнитном поле, которая имеет следующий вид:

$$F = F_d + F_{mag}, \quad (3)$$

$$F_d = \frac{1}{2} (K_{11} (\operatorname{div} \mathbf{n})^2 + K_{22} (\mathbf{n} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n} + q_0)^2 + K_{33} (\mathbf{n} \times \operatorname{rot} \mathbf{n})^2), \quad (4)$$

$$F_{mag} = -\frac{\chi_a}{2} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2. \quad (5)$$

Здесь K_{11} , K_{22} , K_{33} – константы ориентационной упругости, $q_0 > 0$ – волновое число невозмущенной спиральной структуры ХЖК, $\chi_a > 0$ – анизотропия диамагнитной восприимчивости ХЖК. Слагаемое F_d (4) отвечает энергии ориентационно-упругих деформаций поля директора (потенциал Озеена-Франка), а вклад F_{mag} (5) представляет собой объёмную плотность свободной энергии взаимодействия магнитного поля \mathbf{H} с ХЖК.

Рассмотрим холестерический жидкий кристалл с осью спирали, направленной вдоль оси z декартовой системы координат, а вдоль оси x приложим осциллирующее магнитное поле

$$\mathbf{H} = (\sin(\omega t), 0, 0). \quad (6)$$

Вызываемые таким полем деформации в плоскости xOy ориентационной структуры позволяют искать поле директора в следующем виде:

$$\mathbf{n} = (\cos \varphi(z, t), \sin \varphi(z, t), 0), \quad (7)$$

где $\varphi(z, t)$ – угол отклонения директора от оси x , т.е. направления поля.

Запишем проекции уравнения движения директора (1) на оси координат, учитывая вид директора \mathbf{n} (6) и магнитного поля (7). Убедимся в том, то проекция на ось z тождественно удовлетворяется. Исключая неопределенный множитель Лагранжа из уравнений движения директора, получим следующее уравнение динамики для угла поворота директора:

$$\gamma_1 \dot{\varphi} = K_{22} \varphi'' - \frac{\chi_a H^2}{2} \sin 2\varphi \sin^2 \omega t, \quad (8)$$

где точкой обозначена производная по времени t , а штрихом – производная по координате z .

Для удобства решения уравнения (8) введем следующие безразмерные величины:

$$\begin{aligned} \zeta &= q_0 z, & \tau &= \omega t, \\ \Omega &= \frac{\gamma_1 \omega}{K_{22} q_0^2}, & h &= \frac{H}{q_0} \sqrt{\frac{\chi_a}{K_{22}}}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь ζ – безразмерная координата, τ – безразмерное время, Ω – безразмерная циклическая частота, h – безразмерная напряженность магнитного поля.

С учётом введённых параметров (9) безразмерное уравнение динамики (8) примет вид:

$$\Omega \dot{\varphi} = \varphi'' - \frac{h^2}{2} \sin 2\varphi \sin^2 \tau. \quad (10)$$

Это нелинейное неоднородное дифференциальное уравнение первого порядка по времени τ и второго порядка по координате ζ . В отсутствие магнитного поля решение уравнения (10) имеет вид:

$$\varphi_0 = \zeta. \quad (11)$$

Оно описывает структуру невозмущенной спирали ХЖК с безразмерным шагом $p_0 = 2\pi$. Найдём аналитические решения уравнения (10) для случая малых напряженностей магнитного поля ($h < h_0$); здесь h_0 – поле перехода холестерик-нематик в постоянном магнитном поле [1]. Решение уравнения (10) для угла поворота φ можно записать в виде:

$$\varphi = \varphi_0 + \varphi_1, \quad (12)$$

где $\varphi_1 \ll 1$ – добавка, обусловленная малым полем h по сравнению с критическим полем h_0 . Подставляя решение (12) в уравнение (10), получим уравнение для φ_1 :

$$\Omega \dot{\varphi}_1 = \varphi_1'' - \frac{h^2}{2} \sin 2\zeta \sin^2 \tau. \quad (13)$$

Установившееся решение ($\tau \rightarrow \infty$) уравнения (13) будет иметь вид:

$$\varphi_1 = h^2 \sin 2\zeta \left(-\frac{1}{16} + \frac{\Omega \sin 2\tau}{8(\Omega^2 + 4)} + \frac{\cos 2\tau}{4(\Omega^2 + 4)} \right). \quad (14)$$

Упростив выражение (14), для угла поворота спирали $\varphi(\zeta, \tau)$ при малых напряженностях осциллирующего поля h имеем:

$$\varphi = \zeta - \frac{h^2}{16} \sin 2\zeta \left(1 - \frac{2 \sin(2\tau + \beta)}{\sqrt{\Omega^2 + 4}} \right), \quad (15)$$

где $\beta = \arctg(2/\Omega)$.

Аналитическое выражение для шага холестерика находим, интегрируя по безразмерной координате ζ и разлагая в ряд полученное ранее выражение для φ' полагая, что в главном порядке $d\varphi \approx d\zeta$:

$$\frac{p}{p_0} = 1 + \frac{h^4}{32} \left(\frac{1}{2} - \frac{\sin(2\tau + \beta)}{\sqrt{\Omega^2 + 4}} \right)^2, \quad (16)$$

где $p_0 = 2\pi$ – шаг невозмущенной спирали холестерика. Это выражение описывает временную зависимость шага спирали холестерика при различных значениях напряженности h и частоты Ω осциллирующего магнитного поля.

В случае постоянного поля ($\Omega = 0$, $\tau = \pi/2$), приведённый шаг имеет следующий вид:

$$\frac{p}{p_0} = 1 + \frac{h^4}{32}. \quad (17)$$

что совпадает с классическим результатом, полученным де Женом [2].

Найдём средний шаг за период поворота поля:

$$\langle p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} p d\tau, \quad (18)$$

$$\frac{\langle p \rangle}{p_0} = 1 + \frac{h^4}{128} \frac{\Omega^2 + 6}{\Omega^2 + 4}. \quad (19)$$

Данное выражение описывает зависимость среднего приведённого шага спирали ХЖК $\langle p \rangle$ от частоты Ω и напряженности h осциллирующего магнитного поля.

На рис. 1 показана зависимость приведенного шага спирали холестерического жидкого кристалла от времени τ для частоты $\Omega = 0.5$ при различных значениях напряженности магнитного поля h . Сравнивая кривые 1–3 на этом рисунке, можно увидеть увеличение приведенного шага с ростом напряженности поля. Период колебаний шага равен π . При смене направления напряженности магнитного поля приведенный шаг достигает своего минимального значения, равного единице.

На рис. 2 изображена зависимость приведенного шага спирали холестерика от времени для частоты $\Omega = 10$ при трёх значениях напряженности магнитного поля h . При больших значениях частоты также наблюдается увеличение шага с ростом напряженности, но его минимальные значения для каждого значения h теперь разные.

Зависимость приведенного шага спирали холестерика от времени для напряженности магнитного поля $h = 1$ при различных значениях частоты Ω представлена на рис. 3. Из рисунка видно, как меняется минимальное значение шага для каждой из четырех кривых. Очевидно, что амплитуда колебаний шага становится меньше с увеличением частоты.

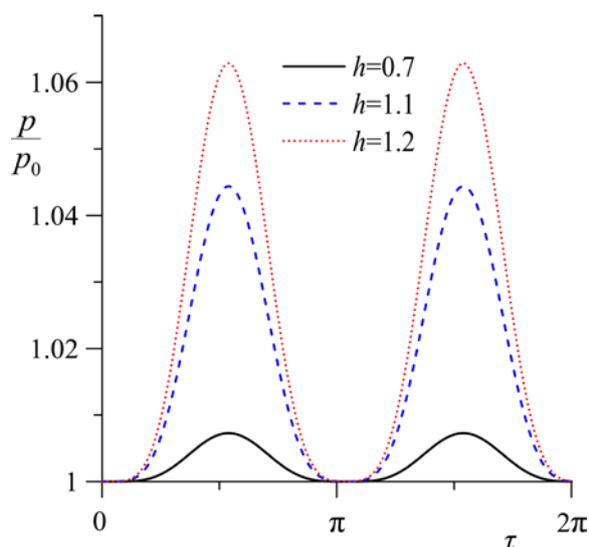


Рис. 1. Зависимость приведенного шага p/p_0 спирали ХЖК от времени τ для частоты $\Omega = 0.5$ при различных значениях напряженности поля h . Кривая 1 – $h = 1.2$, кривая 2 – $h = 1.1$, кривая 3 – $h = 0.7$

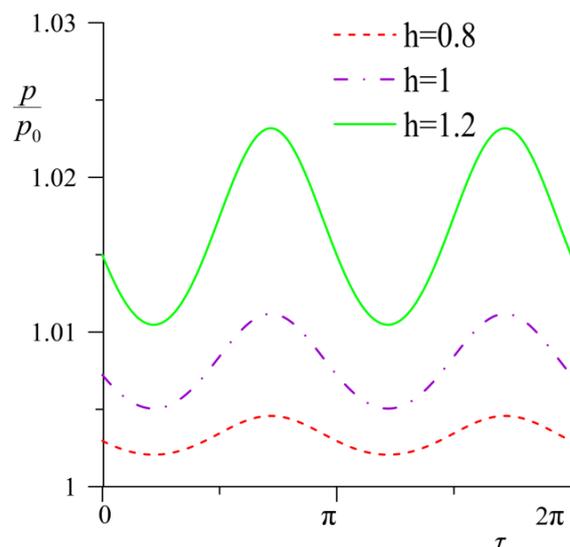


Рис. 2. Зависимость приведенного шага p/p_0 спирали ХЖК от времени τ для частоты $\Omega = 10$ при различных значениях напряженности поля h . Кривая 1 – $h = 1.2$, кривая 2 – $h = 1$, кривая 3 – $h = 0.8$

Из полученных рисунков можно сделать вывод: чтобы деформация спирали холестерика была больше, необходимо либо уменьшать частоту при постоянном поле, либо увеличивать поле при постоянной частоте.

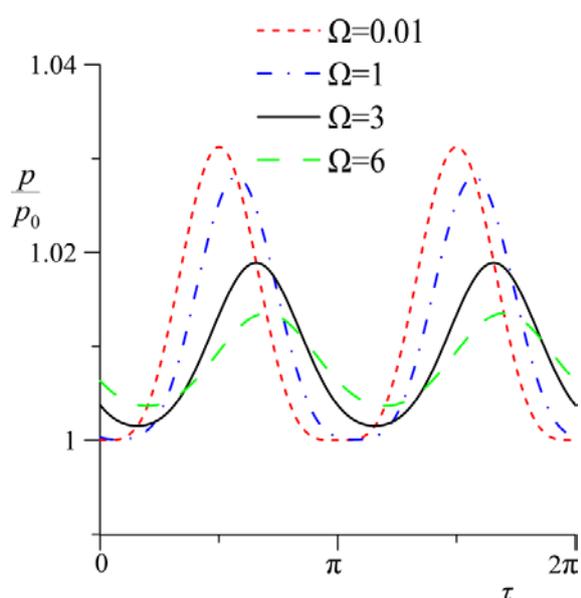


Рис. 3. Зависимость приведенного шага p/p_0 спирали ХЖК от времени τ для $h = 1$ при различных значениях частоты Ω . Кривая 1 – $\Omega = 0.01$, кривая 2 – $\Omega = 1$, кривая 3 – $\Omega = 3$, кривая 4 – $\Omega = 6$

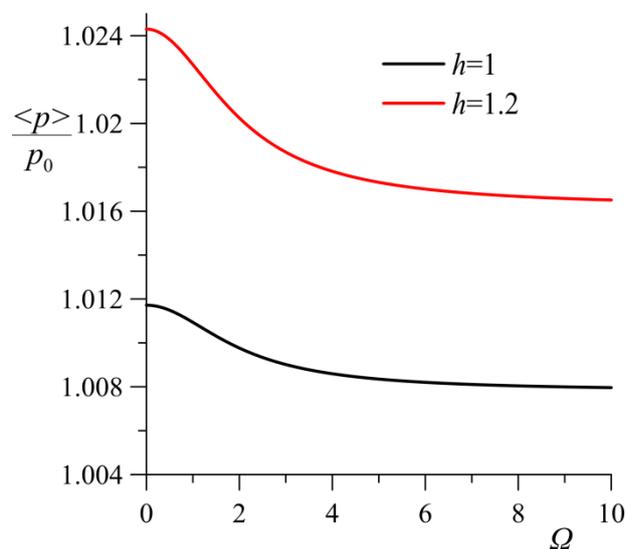


Рис. 4. Зависимость среднего шага спирали $\langle p \rangle/p_0$ спирали ХЖК от частоты Ω при различных значениях напряженности магнитного поля h . Кривая 1 – $h = 1$, кривая 2 – $h = 1.2$

Зависимость среднего шага спирали $\langle p \rangle / p_0$ холестерика от частоты при различных значениях напряженности магнитного поля h показана на рис. 4. Среднее значение шага спирали монотонно убывает с ростом угловой частоты поля Ω в обоих случаях. Различие их в том, что при большей напряженности $h = 1.2$ поля максимальное значение шага больше, чем при $h = 1$.

В работе изучено поведение спиральной структуры холестерического жидкого кристалла в малом осциллирующем магнитном поле при различных значениях его напряженности и частоты. Аналитически получены временные зависимости угла поворота поля и шага спирали. Установлено, что в области низких частот поля амплитуда колебаний шага растет, если увеличивается напряженность поля. При этом минимальные значения шага практически не меняются. Показано, что вне зависимости от значения напряженности магнитного поля значение среднего шага монотонно убывает с ростом частоты колебаний поля.

Список литературы

1. Сонин А. С. Введение в физику жидких кристаллов. М.: Мир, 1977. 400 с.
2. De Gennes P. G. Calcul de la distorsion d'une structure cholesterique par un champ magnetique // Solid State Communications. 1968. Vol. 6. P. 163–165.
3. Meyer R. B. Effects of electric and magnetic fields on the structure of cholesteric liquid crystals // Applied Physics Letters. 1968. Vol. 12. P. 281–282.
4. Zakhlevnykh A. N., Makarov D. V., Novikov A. A. Cholesteric – nematic transitions induced by a shear flow and a magnetic field // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 2017. Vol. 125. P. 679–690.
5. Makarov D. V., Novikov A. A., Zakhlevnykh A. N., Mandrykin S. D. Cholesteric-nematic transition induced by a rotating magnetic field // Journal of Molecular Liquids. 2018. Vol. 263. P. 375–381.

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СРЕДЫ НА ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ФЕРРОНЕМАТИКЕ

Д. А. Третьяков, Д. А. Петров

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Исследованы индуцированные внешними электрическим и магнитным полями ориентационные переходы в ферронематике. Учтена поляризации жидкокристаллической матрицы. Аналитически получено выражение для критического напряжения электрического перехода Фредерикса. Построены зависимости угла ориентации директора в середине слоя от электрического напряжения и напряженности магнитного поля.

Ключевые слова: ферронематик; ориентационные переходы; поляризация

THE EFFECT OF POLARIZATION OF A LIQUID CRYSTAL MEDIUM ON ORIENTATIONAL TRANSITIONS IN FERRONEMATICS

D. A. Tretyakov, D. A. Petrov

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The orientational transitions in a ferronematic induced by external electric and magnetic fields are investigated. The polarization of the liquid crystal matrix is taken into account. An expression for the critical voltage of the Fredericks electric transition is obtained analytically. The dependences of the director orientation angle in the middle of the layer on the voltage and magnetic field are plotted.

Keywords: ferronematic; orientation transitions; polarization

Рассмотрим плоский слой ферронематика (ФН) толщиной L , заключенный между двумя параллельными пластинами. Начало прямоугольной декартовой системы координат выберем в середине слоя, ось x направим параллельно границам слоя, а ось z – ортогонально им. Магнитное $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ и электрическое $\mathbf{E} = (0, 0, E(z))$ поля направим поперек слоя, как показано на рис. 1. Для описания преимущественной ориентации молекул жидкого кристалла (ЖК) воспользуемся единичным вектором \mathbf{n} – директором. Будем полагать, что направление директора фиксировано на границах слоя и совпадает с осью легкого ориентирования $\mathbf{e} = (e, 0, 0)$. Будем рассматривать случай абсолютно жесткого сцепления молекул ЖК с поверхностью примесных частиц, тем самым, направление преимущественной ориентации ансамбля феррочастиц также можно описывать с помощью директора \mathbf{n} . Предположим, что анизотропии диамагнитной восприимчивости χ_a и диэлектрической проницаемости ϵ_a ЖК являются положительными, в этом случае директор ЖК стремится ориентироваться параллельно магнитному и электрическому полям.

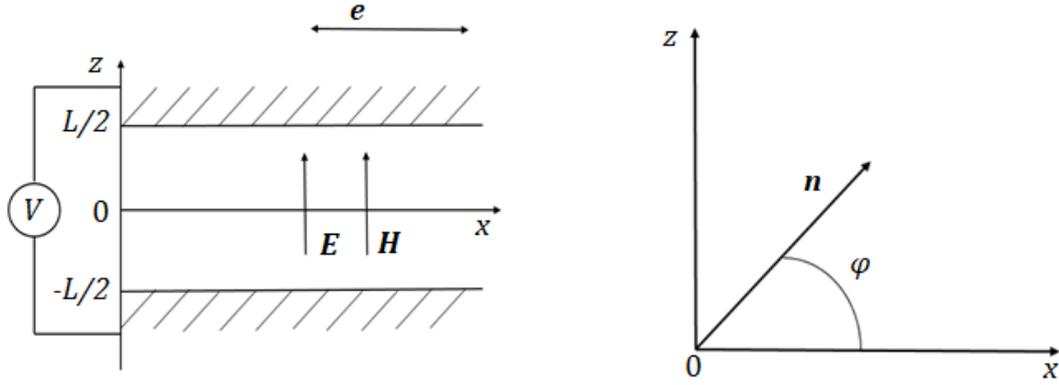


Рис. 1. Планарный слой феррофлюидика, выбор системы координат

Равновесной конфигурации ФН во внешних магнитном и электрическом полях отвечает минимум свободной энергии [1, 2]

$$F = \int F_V dV, \quad (1)$$

где $F_V = F_1 + F_2 + F_3 + F_4$ – объемная плотность свободной энергии, которая содержит следующие вклады

$$F_1 = \frac{1}{2} K_1 (\operatorname{div} \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_2 (\mathbf{n} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_3 (\mathbf{n} \times \operatorname{rot} \mathbf{n})^2, \\ F_2 = -\frac{1}{2} \mu_0 \chi_a (\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2, \quad F_3 = -\mu_0 M_s f \mathbf{n} \cdot \mathbf{H}, \quad F_4 = -\frac{1}{2} \mathbf{D} \cdot \mathbf{E}. \quad (2)$$

Здесь K_1 , K_2 и K_3 – модули ориентационной упругости ЖК (константы Франка), χ_a – анизотропия диамагнитной восприимчивости ЖК, μ_0 – магнитная проницаемость вакуума, ε_a – анизотропия диэлектрической проницаемости ЖК, f – объемная доля примесных частиц в суспензии, M_s – намагниченность насыщения материала феррочастиц, \mathbf{D} – индукция электрического поля.

Обсудим вклады в объемную плотность свободной энергии (2). Здесь F_1 представляет собой объемную плотность свободной энергии ориентационно-упругих деформаций поля директора (потенциал Франка), F_2 и F_3 – вклады в объемную плотность свободной энергии, соответственно учитывающие взаимодействия ЖК-матрицы и феррочастиц с магнитным полем. Последний вклад F_4 – объемная плотность свободной энергии взаимодействия электрического поля с нематиком.

В рассматриваемой геометрии директор \mathbf{n} удобно искать в следующем виде

$$\mathbf{n} = (\cos \varphi(z), 0, \sin \varphi(z)), \quad (3)$$

где $\varphi(z)$ – угол отклонения директора \mathbf{n} , отсчитываемый от оси легкого ориентирования $\mathbf{e} = (1, 0, 0)$ (рис. 1).

Индукция электрического поля \mathcal{D} имеет вид [1]

$$\mathcal{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_{\perp} \mathbf{E} + \varepsilon_0 \varepsilon_a (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) \mathbf{n}. \quad (4)$$

Здесь ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, ε_{\perp} – диэлектрическая проницаемость, измеренная ортогонально оптической оси ЖК.

Подставляя (3) в (4), поледне можно переписать в следующем виде

$$\mathcal{D} = \varepsilon_0 (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \sin^2 \varphi(z)) E(z). \quad (5)$$

Электрическое напряжение \mathcal{U} между ограничивающими пластинами задается выражением

$$\mathcal{U} = \int_{-L/2}^{L/2} E(z) dz = \mathcal{D} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{dz}{\varepsilon_0 (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \sin^2 \varphi)}. \quad (6)$$

Рассмотрим вклад F_4 в свободную энергию (1), отнесенный к единице площади, который преобразуем с помощью (6)

$$\int_{-L/2}^{L/2} F_4 dz = -\frac{1}{2} \int_{-L/2}^{L/2} \mathcal{D} \cdot \mathbf{E} dz = -\frac{1}{2} \mathcal{U}^2 \left[\int_{-L/2}^{L/2} \frac{dz}{\varepsilon_0 (\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \sin^2 \varphi)} dz \right]^{-1}. \quad (7)$$

Задачу удобно решать в безразмерном виде. Выберем в качестве единицы длины толщину слоя L и введем следующие безразмерные величины и параметры

$$\zeta = \frac{z}{L}, \quad h = HL \sqrt{\frac{\chi_a}{K_1}}, \quad b = M_s \bar{f} L \sqrt{\frac{\mu_0}{K_1 \chi_a}}, \quad \gamma = \frac{\varepsilon_a}{\varepsilon_{\perp}},$$

$$D = \frac{\mathcal{D}L}{\sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon_a K_1}}, \quad U = \mathcal{U} \sqrt{\frac{\varepsilon_a \varepsilon_0}{K_1}}. \quad (8)$$

Здесь $\bar{f} = Nv/V$ – средняя объемная доля феррочастиц в суспензии (N – число феррочастиц в ФН, v – объем феррочастицы, V – объем образца) ζ – безразмерная координата, D – безразмерная индукция электрического поля, U – безразмерное напряжение электрического поля, h – безразмерная напряженность магнитного поля, γ – параметр, характеризующий анизотропию диэлектрической проницаемости, а параметр b определяет какой из ориентационных механизмов преобладает в ФН [2].

Свободная энергия ФН (1) с учетом (8) в безразмерном виде примет вид

$$\mathcal{F} = \frac{FL}{K_1 S} = \int_{-1/2}^{1/2} \left(\frac{1}{2} K(\varphi) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \zeta} \right)^2 - \frac{1}{2} h^2 \sin^2 \varphi - b h \sin \varphi \right) d\zeta$$

$$-\frac{U^2}{2\gamma} \left(\int_{-1/2}^{1/2} \frac{d\zeta}{(1 + \gamma \sin^2 \varphi)} \right)^{-1}. \quad (9)$$

Здесь S – площадь пластин, ограничивающих слой ФН, и введено обозначение

$$K(\varphi) = \cos^2 \varphi + \frac{K_{11}}{K_{33}} \sin^2 \varphi. \quad (10)$$

Для определения равновесных состояний ФН в магнитном и электрическом полях воспользуемся условием равенства нулю первой вариации функционала свободной энергии (9)

$$\delta \mathcal{F} = \frac{d}{dt} \mathcal{F}(\varphi + t\theta)|_{t=0}, \quad (11)$$

где допустимые значения $\theta \in [-1/2, 1/2]$ удовлетворяют граничным условиям

$$\theta(-1/2) = \theta(1/2) = 0. \quad (12)$$

Первая вариация функционала свободной энергии (9) позволяет получить уравнение

$$K(\varphi) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \zeta^2} + \frac{1}{2} \frac{dK(\varphi)}{d\varphi} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \zeta} \right)^2 + \frac{1}{2} h^2 \sin 2\varphi - bh \cos \varphi + \frac{1}{2} \frac{U^2 \sin 2\varphi}{\left[\int_{-1/2}^{1/2} \frac{d\zeta}{(1 + \gamma \sin^2 \varphi)} \right]^2 (1 + \gamma \sin^2 \varphi)^2} = 0. \quad (13)$$

При нулевом магнитном поле ($h = 0$) в суспензии отсутствуют искажения ориентационной структуры, пока электрическое напряжение не достигнет некоторого критического значения U_c , выше которого происходит переход Фредерикса [1]. Вблизи U_c отклонение директора ЖК от оси легкого ориентирования малы $\varphi(\zeta) \ll 1$ и уравнение (13) можно линеаризовать, в результате получим

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \zeta^2} + U^2 \varphi = 0. \quad (14)$$

Из условия существования нетривиального решения (14) получим выражение для критического напряжения перехода Фредерикса

$$U_c = \pi. \quad (15)$$

Уравнение (13) удается один раз проинтегрировать, в результате чего можно получить выражение для угла ориентации директора в середине слоя φ_m :

$$\frac{1}{2} = \int_0^{\varphi_m} R(\tilde{\varphi})^{\frac{1}{2}} d\tilde{\varphi}, \quad (16)$$

а уравнение для индукции электрического поля примет вид

$$D = \frac{U}{\gamma} \left[2 \int_0^{\varphi_m} \frac{R(\tilde{\varphi})^{1/2}}{(1 + \gamma \sin^2 \tilde{\varphi})} d\tilde{\varphi} \right]^{-1}. \quad (17)$$

Здесь введены обозначения

$$R(\varphi) = \frac{K(\varphi)}{h^2(\sin^2 \varphi_m - \sin^2 \varphi) + bh(\sin \varphi_m - \sin \varphi) + D^2 \gamma^2 G(\varphi)}, \quad (18)$$

$$G(\varphi) = \left(\frac{(\sin^2 \varphi_m - \sin^2 \varphi)}{(1 + \gamma \sin^2 \varphi_m)(1 + \gamma \sin^2 \varphi)} \right). \quad (19)$$

Таким образом, система уравнений (16) и (17) позволяет определить зависимость угла ориентации директора φ_m в середине слое ФН в зависимости от магнитного поля h и электрического напряжения U .

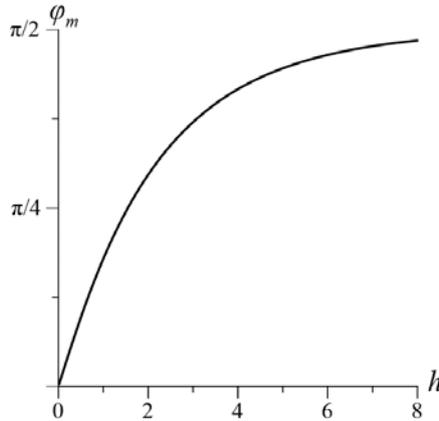


Рис. 2. Зависимость максимального угла отклонения директора φ_m от напряженности магнитного поля h при $b = 10$, $k = 1.5$ и $U = 0$

На рис. 2 представлена зависимость угла ориентации директора φ_m от магнитного поля h при $U = 0$ для $b = 10$ и $k = 1.5$. Из рисунка видно, что с включением магнитного поля происходит беспороговый переход Фредерикса в неоднородное состояние, где молекулы ЖК и феррочастицы начинают ориентироваться в направлении поля. В сильных полях директор асимптотически стремится к направлению магнитного поля $\varphi_m \rightarrow \pi/2$ из-за условия жесткого планарного сцепления молекул ЖК с поверхностью ограничивающих слой пластин.

На рис. 3 представлена зависимость угла ориентации директора φ_m от магнитного поля h соответственно при постоянном напряжении $U = 2$ и $U = 4$ для $b = 10$, $k = 1.5$ и разных значений параметра γ .

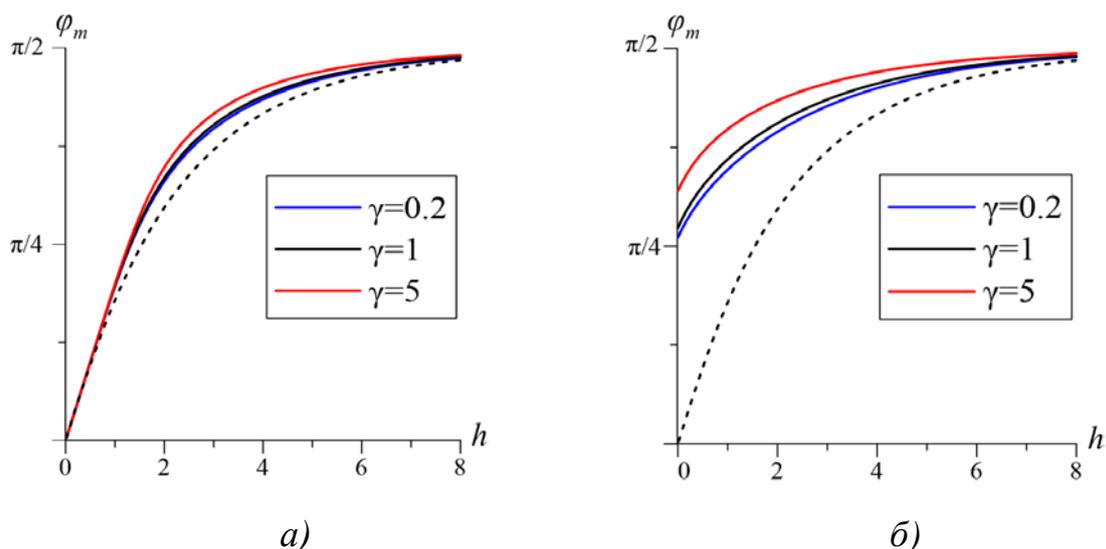


Рис. 3. Зависимость максимального угла отклонения директора φ_m от напряженности магнитного поля h для $b = 10$, $k = 1.5$ и разных значений параметра γ при а) $U = 2$ и б) $U = 4$. Пунктирная кривая отвечает $U = 0$

Из рис. 3а видно, что с включением электрического напряжения $U = 2$, не превышающего согласно (15) порогового значения $U_c = \pi$, тем же значениям магнитного поля h отвечают большие значения φ_m по сравнению со случаем $U = 0$ (пунктирная кривая). Также большим значениям параметра γ (большая анизотропия диэлектрической проницаемости) отвечает больший ориентационный отклик суспензии. На рис. 3б представлен случай, когда электрическое напряжение превышает пороговое значение $U = 4 > U_c$. В этом случае даже при $h = 0$ в суспензии уже произошел переход Фредерикса и присутствуют искажения ориентационной структуры. Включение магнитного поля приводит к дополнительному росту угла ориентации директора φ_m .

Список литературы

1. Stewart I. W. The static and dynamic continuum theory of liquid crystals. New Fetter Lane: London, 2004. 360 p.
2. Захлевных А. Н., Петров Д. А. Влияние флексоэлектрического эффекта на ориентационные переходы в ферронематических жидких кристаллах // Журнал технической физики. 2015. Т. 85. Вып. 9. С. 25–34.

ВЛИЯНИЕ БИСТАБИЛЬНОГО СЦЕПЛЕНИЯ НА МАГНИТО ОРИЕНТАЦИОННЫЙ ОТКЛИК СУСПЕНЗИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ

И. А. Чупеев, Д. А. Петров

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

В рамках континуальной теории изучены индуцируемые магнитным полем ориентационные переходы в суспензии углеродных нанотрубок на основе нематического жидкого кристалла с отрицательной анизотропией диамагнитной восприимчивости. Рассмотрена модифицированная форма энергии ориентационного взаимодействия между углеродными нанотрубками и жидкокристаллической матрицей, допускающая бистабильное сцепление. Получены аналитические выражения для определения полей переходов между различными ориентационными фазами суспензии.

Ключевые слова: жидкий кристалл; углеродные нанотрубки; бистабильность

THE INFLUENCE OF BISTABLE CLUTCH ON A MAGNETO ORIENTATION RESPONSE TO SUSPENSION OF CARBON NANOTUBES IN NEMATIC LIQUID CRYSTAL

I. A. Chupeev, D. A. Petrov

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

In the framework of the continuum theory, magnetic field-induced orientational transitions in a suspension of carbon nanotubes based on a nematic liquid crystal with negative anisotropy of diamagnetic susceptibility were studied. A modified form of the energy of the orientational interaction between carbon nanotubes and the liquid crystal matrix that leads to bistable coupling was considered. Analytical expressions for determining the transition fields between different orientational phases of suspensions were obtained.

Keywords: liquid crystal; carbon nanotubes; bistability

Рассмотрим плоский слой суспензии углеродных нанотрубок (УНТ) на основе нематического жидкого кристалла (НЖК) толщиной L , помещённый в постоянное магнитное поле. Начало системы координат выберем в середине слоя, пусть ось x параллельна границам слоя, а ось z и магнитное поле $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ направим перпендикулярно им (рис. 1).

Для описания преимущественной ориентации молекул жидкого кристалла (ЖК) и длинных осей УНТ воспользуемся соответственно единичными векторами \mathbf{n} и \mathbf{m} , которые будем называть директорами. Будем рассматривать случай жесткого планарного сцепления молекул ЖК с ограничивающими поверхностями и мягкого планарного сцепления с поверхностью УНТ. Ось легкого ориентирования на поверхности

ограничивающих слой пластин будем полагать направленной вдоль оси x системы координат, тогда в отсутствие внешних полей суспензии отвечает однородная планарная текстура. Предположим, что анизотропия диамагнитной восприимчивости ЖК отрицательная $\chi_a < 0$, а УНТ – положительна $\chi_a^p > 0$, в этом случае включение магнитного поля оказывает конкурирующее влияние на ЖК суспензию: директор УНТ стремится ориентироваться по полю, а директор ЖК – ортогонально полю.

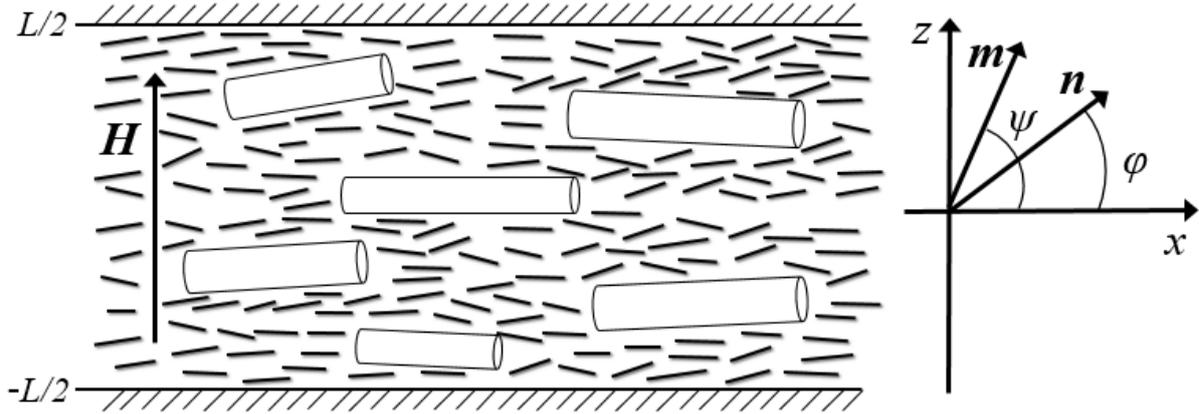


Рис. 1. Геометрия задачи

В рамках континуальной теории равновесному состоянию суспензии отвечает минимум свободной энергии [1, 2]

$$F = \int [F_1 + F_2 + F_3 + F_4] dV, \quad (1)$$

$$F_1 = \frac{1}{2} K_{11} (\text{div } \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_{22} (\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n})^2 + \frac{1}{2} K_{33} (\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n})^2,$$

$$F_2 = \frac{1}{2} |\chi_a| (\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2, \quad F_3 = -\frac{1}{2} \chi_a^p f (\mathbf{m} \cdot \mathbf{H})^2,$$

$$F_4 = \frac{W}{d} f (\mathbf{n} \times \mathbf{m})^2 [1 - \zeta (\mathbf{n} \times \mathbf{m})^2].$$

Здесь K_{11} , K_{22} и K_{33} – модули ориентационной упругости ЖК (константы Франка), f – объемная доля УНТ в суспензии, W – поверхностная плотность энергии сцепления молекул ЖК с поверхностью УНТ, d – поперечный диаметр УНТ, ζ – безразмерный параметр сцепления, учитывающий четвертый порядок разложения энергии сцепления по $(\mathbf{n} \times \mathbf{m})$ (анизотропия поверхностного сцепления примесных частиц с ЖК-матрицей).

Обсудим вклады в выражении (1). Здесь F_1 представляет собой объемную плотность свободной энергии ориентационно-упругих деформаций поля директора (потенциал Франка), F_2 и F_3 – соответственно учитывают взаимодействия магнитного поля \mathbf{H} с диамагнитными ЖК и УНТ, последний вклад F_4 – учитывает конечное (мягкое) сцепление УНТ с ЖК-матрицей. Если $\zeta = 0$ и $W > 1$ вклад F_4 обладает одним минимумом

при $\mathbf{n} \parallel \mathbf{m}$. Такая взаимная сонаправленная ориентация директоров ЖК и УНТ называется планарным сцеплением. В случае $\zeta = 1$ потенциал F_4 обладает двумя минимумами одинаковой глубины при $\mathbf{n} \parallel \mathbf{m}$ и $\mathbf{n} \perp \mathbf{m}$. Первый из них соответствует планарному сцеплению, второй – гомеотропному сцеплению УНТ и ЖК-матрицы. Таким образом, модифицированная энергия ориентационного сцепления F_4 допускает возможность бистабильных явлений, обусловленных скачкообразным изменением характера сцепления примесных частиц с матрицей [1].

В рассматриваемой геометрии векторы \mathbf{n} и \mathbf{m} удобно искать в следующем виде

$$\mathbf{n} = (\cos \varphi(z), 0, \sin \varphi(z)), \quad \mathbf{m} = (\cos \psi(z), 0, \sin \psi(z)), \quad (2)$$

где φ и ψ – углы ориентации директоров ЖК \mathbf{n} и УНТ \mathbf{m} , отсчитываемые от оси x соответственно (см. рис. 1).

Задачу удобно решать в безразмерном виде, для этого выберем в качестве единицы длины толщину слоя L и определим безразмерную координату $\tilde{z} = z/L$. В качестве единицы измерения напряженности магнитного поля выберем величину $H_q = L^{-1} \sqrt{K_{11}/\chi_a}$, тогда безразмерная напряженность поля имеет вид $h = H_q/H$. Параметр $\gamma = f\chi_a^p/\chi_a$, который определяется балансом слагаемых F_2 и F_3 в свободной энергии (1), характеризует относительный вклад механизмов влияния магнитного поля на ориентационную структуру суспензии. При $\gamma \gg 1$ появление искажений поля директора ЖК \mathbf{n} обусловлено преимущественно диамагнетизмом примесных УНТ, а при $\gamma \ll 1$ – появление искажений ориентационной структуры связано с диамагнетизмом ЖК-матрицы. Параметр $\sigma = WfL^2/(K_{11}d)$ – это безразмерная энергия сцепления УНТ с ЖК-матрицей.

После обезразмеривания и подстановки (2) в (1) свободная энергия примет вид

$$\tilde{F} = \int_{-1/2}^{1/2} \tilde{F}_V d\tilde{z}, \quad (3)$$

где \tilde{F}_V – безразмерная объёмная плотность свободной энергии

$$\tilde{F}_V = \frac{1}{2} K(\varphi) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{z}} \right)^2 + \frac{1}{2} h^2 \sin^2(\varphi) - \frac{1}{2} \gamma h^2 \sin^2 \varphi - \sigma \sin^2(\varphi - \psi) [1 - 2\zeta \sin^2(\varphi - \psi)]. \quad (4)$$

Здесь введено обозначение

$$K(\varphi) = \cos^2 \varphi + \frac{K_{11}}{K_{33}} \sin^2 \varphi. \quad (5)$$

Термодинамически устойчивые конфигурации директора \mathbf{n} и \mathbf{m} отвечают минимуму функционала (3). После минимизации (3) по углам ориентации

директоров ЖК $\varphi(\tilde{z})$ и УНТ $\psi(\tilde{z})$ получим систему уравнений ориентационного равновесия суспензии

$$\frac{1}{2} \frac{\partial K(\varphi)}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{z}} \right)^2 + K(\varphi) \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{z}^2} \right) - \frac{1}{2} h^2 \sin 2\varphi - \sigma \sin 2(\varphi - \psi) [1 - 2\zeta \sin^2(\varphi - \psi)] = 0, \quad (6)$$

$$\gamma h^2 \sin 2\psi + 2\sigma \sin 2(\varphi - \psi) [1 - 2\zeta \sin^2(\varphi - \psi)] = 0, \quad (7)$$

которая совместно с граничными условиями

$$\varphi(\tilde{z}) \Big|_{1/2} = \varphi(\tilde{z}) \Big|_{-1/2} = 0 \quad (8)$$

позволяет найти пространственные распределения углов ориентации директоров ЖК и УНТ для разных значений магнитного поля и материальных параметров суспензии.

Система уравнений (6) и (7) допускает однородные решения, одно из них $\varphi(\tilde{z}) = 0$ и $\psi(\tilde{z}) = 0$ отвечает начальному состоянию, в котором молекулы ЖК и УНТ параллельны границам слоя и ортогональны внешнему полю $\mathbf{n} \parallel \mathbf{m} \perp \mathbf{H}$. Назовем это состояние планарной фазой суспензии, т.к. она характеризуется планарным $(\mathbf{n} \parallel \mathbf{m})$ сцеплением УНТ с ЖК-матрицей. Другое однородное решение $\varphi(\tilde{z}) = 0$ и $\psi(\tilde{z}) = \pi/2$ отвечает гомеотропной фазе с директором ЖК, параллельным границам слоя, и директором УНТ, ориентированным в направлении поля $\mathbf{n} \perp \mathbf{m} \parallel \mathbf{H}$. Такая фаза характеризуется гомеотропным $(\mathbf{n} \perp \mathbf{m})$ сцеплением УНТ с ЖК-матрицей. Неоднородному решению отвечает угловая фаза, в которой угол между директорами \mathbf{n} и \mathbf{m} отличен от нуля и $\pi/2$ [2].

Под влиянием магнитного поля начальная планарная фаза суспензии перестает быть устойчивой и при достижении магнитным полем порогового значения h_c , выше которого происходит переход в угловую фазу с искаженной ориентационной структурой \mathbf{n} и \mathbf{m} . Вблизи h_c искажения ориентационной структуры малы $\varphi(\tilde{z}) \ll 1$ и $\psi(\tilde{z}) \ll 1$. Это позволяет линеаризовать уравнения (6) и (7):

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{z}^2} - h^2 \varphi - 2\sigma(\varphi - \psi) = 0, \quad (9)$$

$$\gamma h^2 \psi + 2\sigma(\varphi - \psi) = 0. \quad (10)$$

В результате решения системы уравнений (9) и (10) вместе с граничными условиями (8) и условие симметрии ориентационных искажений относительно середины слоя $(\partial \varphi / \partial \tilde{z}) \Big|_{\tilde{z}=0} = 0$, получим выражение для поля перехода в угловую фазу h_c , как функцию материальных параметров суспензии

$$\pi^2 = \frac{2\sigma\gamma h_c^2}{2\sigma - \gamma h_c^2} - h_c^2. \quad (11)$$

Теперь определим поле перехода h_r между неоднородной (угловой) фазой суспензии и однородной фазой с гомеотропным сцеплением УНТ с ЖК-матрицей. Вблизи h_r отклонения директора ЖК \mathbf{n} от оси x , а директора УНТ \mathbf{m} от направления поля \mathbf{H} малы $\varphi(\tilde{z}) \ll 1$, $\psi(\tilde{z}) = \pi/2 - \delta\psi$, где $\delta\psi(\tilde{z}) \ll 1$. Это позволяет линеаризовать систему уравнений (6) и (7), в результате получаем

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tilde{z}^2} - h^2 \varphi + 2\sigma(\varphi + \delta\psi)[1 - 2\zeta] = 0, \quad (12)$$

$$\gamma h^2 \delta\psi - 2\sigma(\varphi + \delta\psi)[1 - 2\zeta] = 0. \quad (13)$$

Из условия существования нетривиального решения системы уравнений (12) и (13) с граничными условиями (8) и $(\partial\varphi/\partial\tilde{z})|_{\tilde{z}=0} = 0$ можно получить выражение для порогового поля перехода угловая – гомеотропная фаза как функцию материальных параметров суспензии

$$\pi^2 = \frac{2\sigma\gamma h_r^2(1 - 2\zeta)}{\gamma h_r^2 - 2\sigma(1 - 2\zeta)} - h_r^2. \quad (14)$$

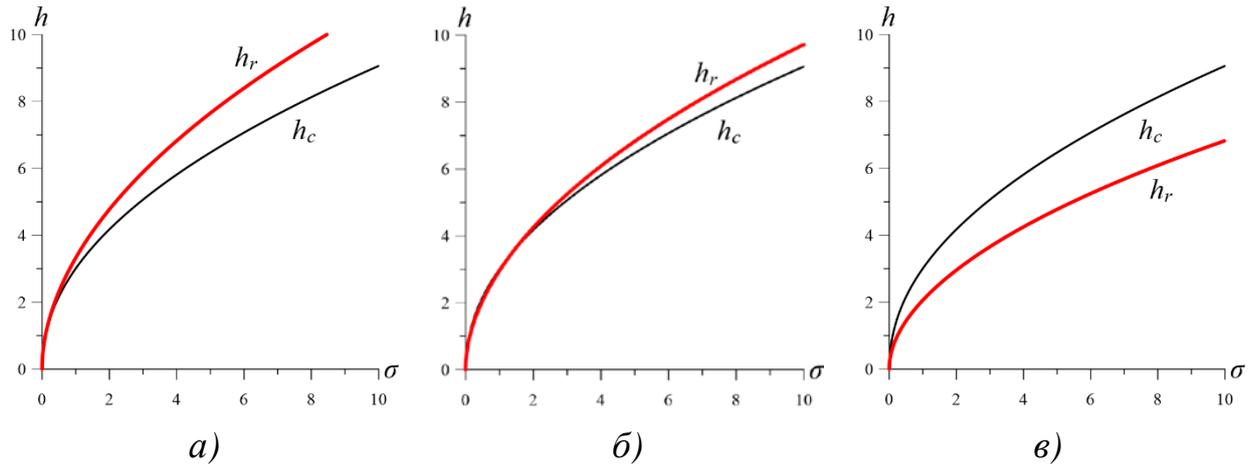


Рис. 2. Зависимости полей ориентационных переходов h_c (черная кривая) и h_r (красная кривая) от энергии сцепления УНТ с ЖК-матрицей σ для $\gamma = 0.2$: а) $\zeta = 0$; б) $\zeta = 0.05$; в) $\zeta = 0.2$

На рис. 2 представлены диаграммы ориентационных фаз суспензии в терминах безразмерного магнитного поля h и энергии сцепления УНТ с ЖК-матрицей для $\gamma = 0.2$ и различных значений параметра ζ . На рис. 2а представлен случай $\zeta = 0$, где области, находящаяся под кривой h_c , отвечает планарная фаза, область над кривой h_r соответствует гомеотропная фаза, а между кривыми h_c и h_r находится угловая фаза с неоднородным распределением \mathbf{n} и \mathbf{m} по толщине слоя. В случае $\zeta = 0.05$, который представлен на рис. 2б, происходит уменьшение поля перехода h_r , а вместе с этим сужается область существования угловой фазы. Напомним, что в уравнение (11) параметр ζ не входит, а значит величина поля h_c не меняется в зависимости от параметра ζ . На рис. 3в представлен случай

$\zeta = 0.2$, для которого кривая h_r лежит ниже кривой h_c , т.е. при достижении магнитного поля значения h_r скачком должен происходить переход из начальной планарной фазы в гомеотропную, минуя угловую фазу, которая становится термодинамически невыгодной для любых значений магнитного поля.

В заключении нужно отметить, что для фиксированных значений параметров γ и σ из системы уравнений (11) и (14) возможно определить критическое значение параметра $\zeta = \zeta_c$, при котором $h_c = h_r$ и переход из планарной в гомеотропную фазу происходит, минуя угловую фазу. Так, например, для $\gamma = 0.2$ и $\sigma = 5$ это значение составляет $\zeta_c = 0.1393$. Кроме этого для $\zeta \geq 0.5$ действительные решения уравнения (14) для h_r перестают существовать, а включение сколь угодно малого магнитного поля должно приводить к переходу в гомеотропную фазу.

Список литературы

1. *Захлевных А. Н., Петров Д. А.* Ориентационные переходы в ферромагнитных жидких кристаллах с бистабильным сцеплением коллоидных частиц с матрицей // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. 2016. Т. 150. Вып. 4. С. 793–806.
2. *Petrov D. A., Skokov P. K., Zakhlevnykh A. N.* Magnetic field induced orientational transitions in liquid crystals doped with carbon nanotubes // Beilstein Journal of Nanotechnology. 2017. Vol. 8. P. 2807–2817.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

И. В. Володин^a, А. А. Алабужев^{a,b}

^aПермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

^bИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, Королева, 1

Рассматривается эволюция затухания гравитационно-капиллярных волн и динамика поверхности раздела двух сред в поле обратно-поступательных горизонтальных линейных вибраций. Предполагается, что вязкость обеих фаз одинакова. Производится численное моделирование задач методом решёточных уравнений Больцмана (D2Q9), применяется модель HCZ.

Ключевые слова: LBM; модель HCZ, D2Q9; стабилизация профиля поверхности раздела в поле горизонтальных вибраций; гравитационно-капиллярные волны

SURFACE WAVE SIMULATUIN BY THE LATTICE BOLTZMANN METHOD

I. V. Volodin^a, A. A. Alabuzhev^{a,b}

^aPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

^bInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Koroleva St. 1, 614013, Perm

The evolution of the attenuation of gravitational-capillary waves and the dynamics of the interface between two media in the field of reciprocating horizontal linear vibrations are considered. It is assumed that the viscosity of both phases is the same. Numerical simulation of problems by the lattice Boltzmann equations (D2Q9) method is performed, the HCZ model is applied.

Keywords: LBM; HCZ model; D2Q9; stabilization of the interface profile in the field of horizontal vibrations; gravitational-capillary waves

В настоящее время для численного решения различных гидродинамических задач в большинстве случаев используется широкий класс сеточных методов. Численный подход, представленный в данной статье, отличается от наиболее распространенных тем, что не решает уравнение Навье-Стокса, а моделирует динамику системы базируясь на кинетическом уравнении Больцмана.

Кинетическое уравнение Больцмана описывает эволюцию во времени функции распределения плотности вероятности $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ в фазовом пространстве. Через функцию распределения выражаются макроскопические параметры среды, такие как плотность, скорость и энергия. Таким образом, для моделирования течений используется метод газовой динамики, рассматривающий систему на микроскопическом уровне. Обоснованием использования подходов газовой динамики в

сплошнородных задачах является тот факт, что характерное время макросистемы намного больше времени свободного пробега.

В безразмерном виде кинетическое уравнение Больцмана имеет следующий вид [1]:

$$\mathbf{v}\nabla_x f + \mathbf{F}\nabla_p f + \frac{\partial f}{\partial t} = \Gamma^{(+)} - \Gamma^{(-)}, \quad (1)$$

где \mathbf{v} – скорость жидкости, f – функция распределения, \mathbf{F} – внешняя сила, действующая на жидкость, $\Gamma^{(+)} - \Gamma^{(-)}$ – оператор столкновения, ∇_x , ∇_p – оператор дифференцирования по координатам и импульсам, соответственно.

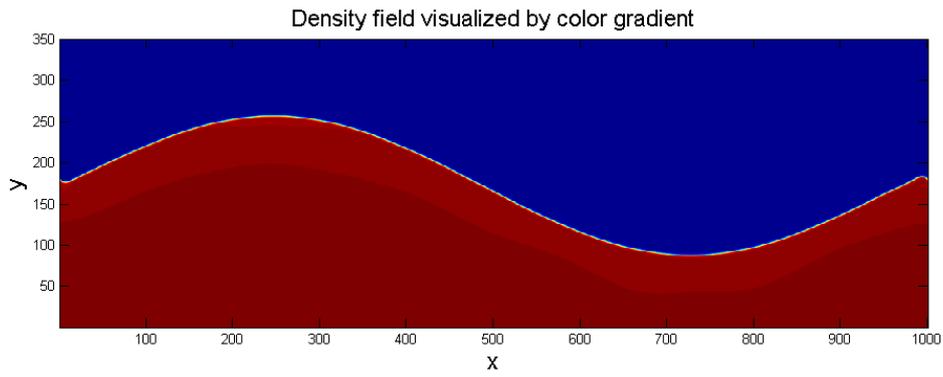
Общепринятым достоинством метода решеточных уравнений Больцмана (Lattice Boltzmann Method, LBM) является легкость создания параллельного кода, ввиду микроскопического кинетического подхода, простота программирования, так как вычислительный алгоритм включает в себя только простейшие арифметические операции. К достоинствам также относится легкость задания граничных условий, ввиду того, что используются не сеточные методы, а состояние системы описывается фактически единственной функцией. К недостаткам метода можно отнести исключительную сложность использования данного подхода в задачах с деформируемыми границами и необходимую малость числа Маха.

Для описания движения использовалась двумерная девятискоростная модель D2Q9. Все физические параметры безразмерены в единицах вязкости, единичный шаг по времени означает, что частица проходит характерную толщину вязкого слоя $L = \nu/a$, где a – скорость звука в данной точке, ν – вязкость жидкости.

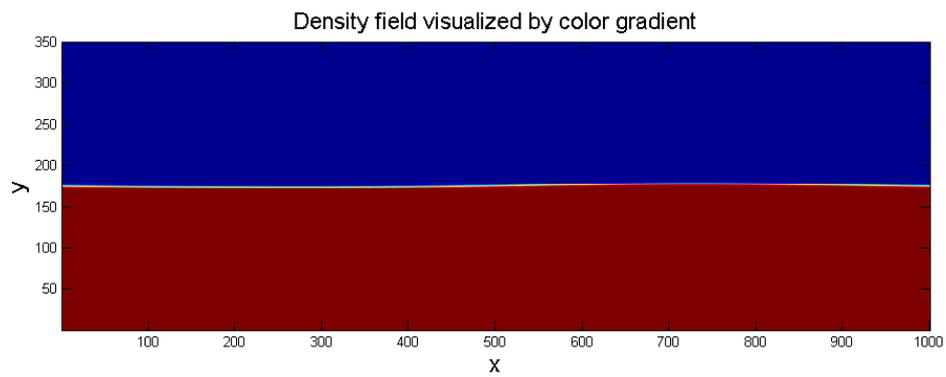
Дискретизация уравнения (1) и его дальнейшее программирование стало возможным благодаря аппроксимации Батнагара-Гросса-Крука [2] для равновесной функции распределения. Не будем останавливаться на обстоятельном описании алгоритма дискретизации выбранной модели для двухфазных систем, довольно подробно этот вопрос изложен в [3, 4].

Рассмотрим две двухфазные эволюционные задачи, смоделированные моделью НСЗ: затухание гравитационно-капиллярных волн и стабилизацию профиля стратифицированной жидкости в поле горизонтальных обратно-поступательных линейных вибраций.

В случае, когда тяжелая жидкость располагается под легкой, возможно существование гравитационно-капиллярных волн, в том случае, если поверхность раздела введена из положения равновесия. В рассматриваемой задаче: $\rho_1 = 0.12$, $\rho_2 = 0.04$, размеры решетки 1000×350 . Начальное распределение и стационарное состояние задачи приведено на рис. 1а и 1б, соответственно.



a)



б)

Рис. 1. Начальное распределение (а) и стационарное состояние (б) задачи о гравитационно-капиллярных волнах

График затухания амплитуды колебаний $a(t)$ в узле $x = 250$ приведен на рис. 2.

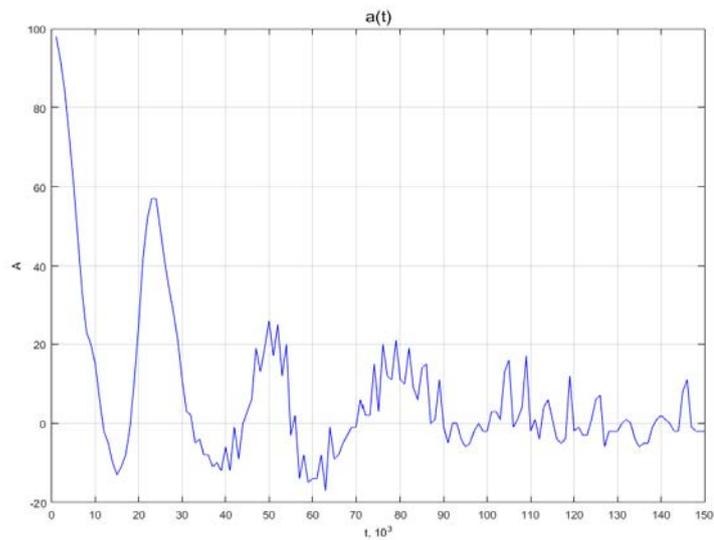


Рис. 2. Динамика затухания амплитуды колебаний гравитационно-капиллярных волн

При наличии в системе поверхностного натяжения, дисперсионное соотношение для гравитационно-капиллярных волн [5] имеет вид:

$$\omega^2 = \left(kg + \frac{\kappa * k^3}{\rho_1} \right) \tanh(kg),$$

где ω – частота затухающей волны, k – волновое число начального возмущения, g – ускорение свободного падения, κ – коэффициент поверхностного натяжения.

Подставляя в данное выражение параметры нашей задачи, получим результат, хорошо согласующийся с аналитическим предсказанием.

Рассмотрим теперь движение стратифицированной жидкости в поле горизонтальных обратно-поступательных линейных вибраций.

В системе отсчета, связанной с сосудом, вибрации приводят к перенормировке ускорения свободного падения:

$$\mathbf{g}_{ef} = \mathbf{g} + a\omega\boldsymbol{\gamma}\sin(\omega t),$$

где ω – частота гармонических колебаний, a – амплитуда колебаний, $\boldsymbol{\gamma}$ – единичный вектор в направлении оси вибраций.

Задача в такой постановке допускает вывод уравнений осредненного движения, путем разделения всех процессов на пульсационные (быстроменяющиеся) и медленные, если характерное время вибраций много меньше гидродинамического времени:

$$\omega \gg \frac{v}{L},$$

L – характерный размер задачи. В [6] показано, что в случае, когда волновое число (k) и глубина слоя (h) удовлетворяют соотношению $kh \gg 1$, наиболее опасные возмущения (k_m), которые возникают в системе в первую очередь, могут быть найдены из соотношения:

$$k_m^2 = \frac{\rho_1 - \rho_2}{\kappa} g. \quad (2)$$

Начальное распределение задачи в вышеизложенной постановке совпадает с начальным распределением предыдущей задачи (рис. 1а), $a = 0.02$, $\omega = 0.1$. Квазистационарный рельеф приведен на рис. 3.

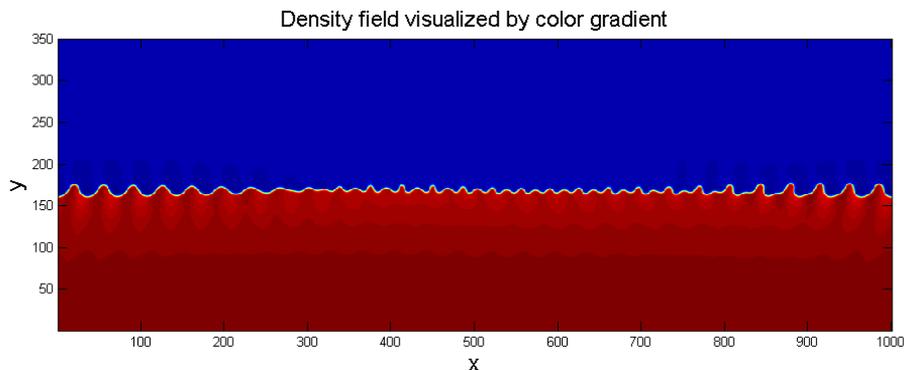


Рис. 3. Квазистационарный рельеф стратифицированной жидкости в поле обратно-поступательных линейных вибраций

Подставляя параметры задачи в (2), получим результат, согласующийся с аналитической оценкой [6].

Список литературы

1. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. 10. Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2002. 536 с.
2. *Bhatnagar P. L.; Gross E. P.; Krook M.* A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems // *Physical Review*. 1954. Vol. 94 (3). P. 511–525.
3. *Huang H., Sukop M. C., Lu X-Y.* Multiphase lattice Boltzmann methods: theory and application. Wiley-Blackwell, 2015. 373 p.
4. *Sukop M. C., Thorne D. T.* Lattice Boltzmann Modeling. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. 173 p.
5. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 736 с.
6. *Любимов Д. В., Любимова Т. П., Черепанов А. А.* Динамика поверхности раздела в вибрационных полях. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 216 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОГРАВИТАЦИОННОЙ КОНВЕКЦИИ В ДВУХСЛОЙНОЙ СИСТЕМЕ В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ ПАКЕТЕ OPENFOAM

О. В. Галицын^a, А. А. Алабужев^{a,b}

^aПермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

^bИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, Королева, 1

Исследованы возможности моделирования двухфазных неизоэтермических задач в вычислительном пакете OpenFOAM. Рассматривалась термогравитационная конвекция в двухслойной системе с оттоком газа на верхней границе при постоянном нагреве снизу. Получены поля распределения плотности, температуры и вектора скорости в разные моменты времени. Показано, что в системе существует стационарное движение.

Ключевые слова: естественная конвекция; термогравитационная конвекция; двухслойная система; двухфазная система; OpenFOAM

SIMULATION OF THERMAL-GRAVITY CONVECTION IN TWO-LAYER SYSTEM BY SOFTWARE PACKAGE OPENFOAM

O. V. Galitsyn^a, A. A. Alabuzhev^{a,b}

^aPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

^bInstitute of Continuous Media Mechanics, Korolyov St. 1, 614013, Perm

The simulation possibilities of two-phase non-isothermal problems by numerical package OpenFOAM are investigated. Thermo-gravitational convection in a two-layer system with a gas outflow at the upper boundary with constant heating from below was considered. The fields of density, temperature and velocity vector distribution are obtained at different points in time. It is shown that there is a stationary motion in the system.

Keywords: natural convection; thermal-gravity convection; two-layer system; two-phase system; OpenFOAM

Теоретическому и экспериментальному изучению проблем конвективного движения жидкости в условиях тепломассопереноса на границе раздела уделяется в настоящее время большое внимание [1, 2]. Важность результатов таких исследований состоит в их использовании при решении комплекса научных задач механики жидкости и теплофизики, возникающих при оптимизации и совершенствовании прикладных разработок в области жидкостных технологий охлаждения, систем регистрации информации, получения кристаллов с высокой степенью структурной однородности [3]. Численное моделирование такого типа задач частое явление в современном мире. Вычислительные мощности компьютеров растут вместе с уровнем развития техники, что удешевляет и

ускоряет моделирование прикладных задач. Также расширяется круг фундаментальных задач, для которых становится возможным численное моделирование. Несомненным преимуществом моделирования является тот фактор, что оно позволяет изучать малодоступные для экспериментального исследования процессы [4].

В данной работе исследуется термогравитационная конвекция в трехмерной кубической полости, размерами 15см x 15см x 10см (рис. 1). Полость заполнена двумя несмешивающимися вязкими жидкостями разной плотности. Вектор ускорения свободного падения \mathbf{g} направлен вдоль оси Y. Поверхность раздела жидкостей деформируема, коэффициент поверхностного натяжения постоянный. Размеры вычислительной равномерной сетки составляли 25x75x25 узлов.

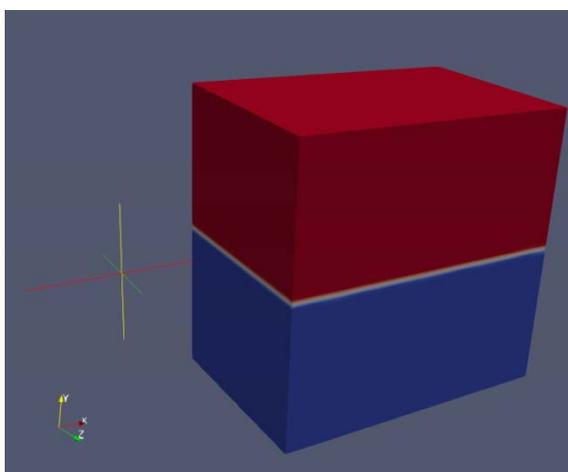


Рис. 1. Геометрия задачи

В качестве решателя для данной задачи использовался twoPhaseEulerFoam. Он основан на методе объема жидкости (volume of fluid, VOF), где за наличие той или иной среды отвечает параметр alpha (относительный объем одной из жидкостей в элементарной ячейке), чье значение задается в библиотеке setFields. В этом решателе для описания движения жидкостей используются уравнения Эйлера. Система (усредненных по ячейке) уравнений для каждой среды выглядит так:

$$\frac{\partial(a_i \mathbf{U}_i)}{\partial t} + \nabla(a_i \mathbf{U}_i * \mathbf{U}_i) + \nabla(a_i \mathbf{R}_i^{eff}) = -\frac{a_i}{\rho_i} \nabla p + a_i \mathbf{g} + \frac{\mathbf{M}_i}{\rho_i}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(a_i)}{\partial t} + \nabla(\mathbf{U}_i a_i) = 0,$$

где i обозначает среду ($i = 0$ – жидкость, $i = 1$ – газ), a_i – объемная доля среды, \mathbf{R}_i^{eff} – комбинированный тензор напряжений Рейнольдса и вязкости, \mathbf{g} – ускорение свободного падения, ρ_i – плотность среды, \mathbf{U}_i – скорость среды, p – давление, \mathbf{M}_i – усредненная компонента передачи импульса между средами. Объединив второе уравнение для двух сред, можно

получить неявное уравнение для давления. Поле температуры определялось через уравнение из кинетической теории.

Объемное уравнение неразрывности:

$$\begin{aligned} \nabla U &= 0, \\ U &= a_a U_a + a_b U_b \end{aligned} \quad (2)$$

Боковые стенки предполагались теплоизолированными, т.е. для температуры был задан тип `fixedGradient` с постоянным значением равным нулю. Подогрев осуществлялся снизу – на дне устанавливалось постоянное значение 330 К. Для верхней крышки ставилось условие постоянства температуры, которое задавалось параметром `inletOutlet` с постоянным значением 300 К. Внутри вычислительной области было задано однородное распределение температуры с начальным значением 300 К.

Для поля скорости на нижней и боковых поверхностях устанавливалось условие прилипания. На верхней стороне устанавливалось условие `pressureInletOutletVelocity`, т.е. входящий поток нулевой (`zeroGradient`), а выходящий определяется нормальной компонентой скорости. Также для флага `alpha` на верхней границе задавалось условие `inletOutlet` с постоянным значением 1, что соответствует верхней среде. Граница раздела сред вычислялась методом VOF при решении системы уравнений (1)–(2).

В качестве нижней жидкости рассматривалась вода, верхней – воздух. Получены поля температуры и вектора скорости в разные моменты времени. Отток воздуха на верхней поверхности приводит к искривлению изолиний температуры по сравнению с непроницаемой крышкой [1,5]. В результате возникает конвективное течение в виде двух валов. На рис. 2-4 приведены графики зависимости температуры и модуля вектора скорости от времени в нескольких точках.

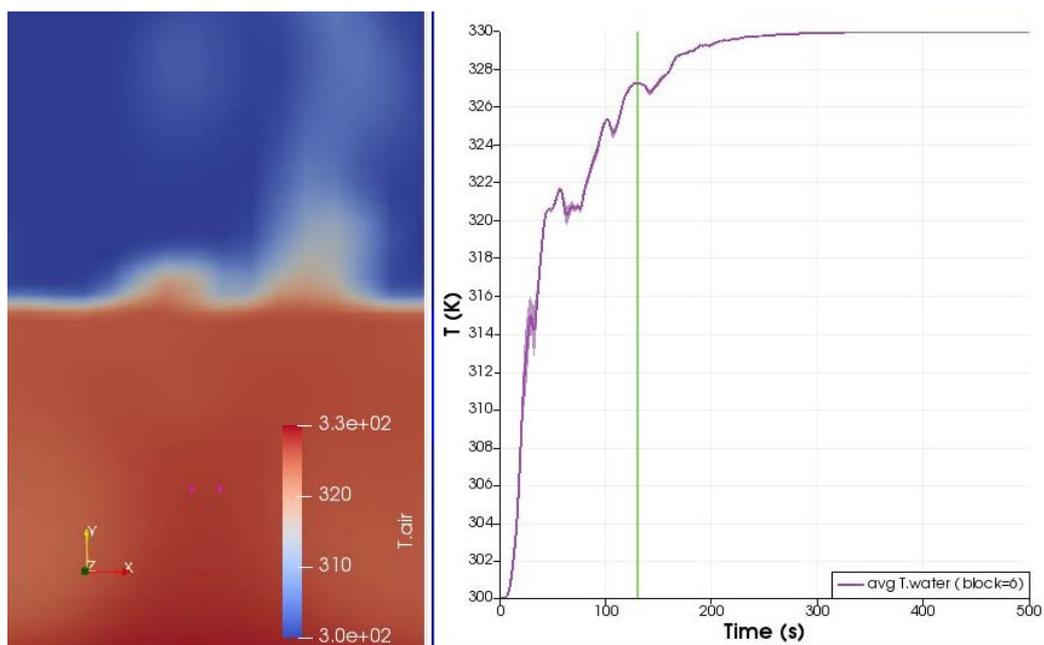


Рис. 2. График изменения температуры от времени в двух точках
Зеленая линия отвечает за текущее время

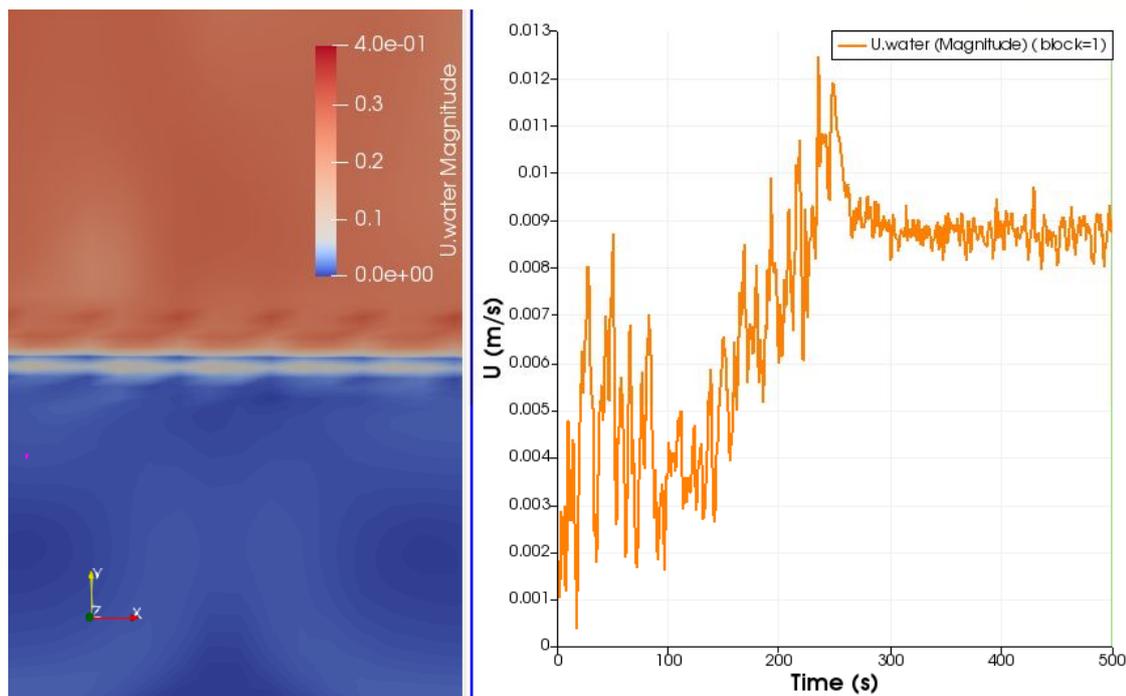


Рис. 3. График изменение модуля вектора скорости от времени в левом конвективном валу

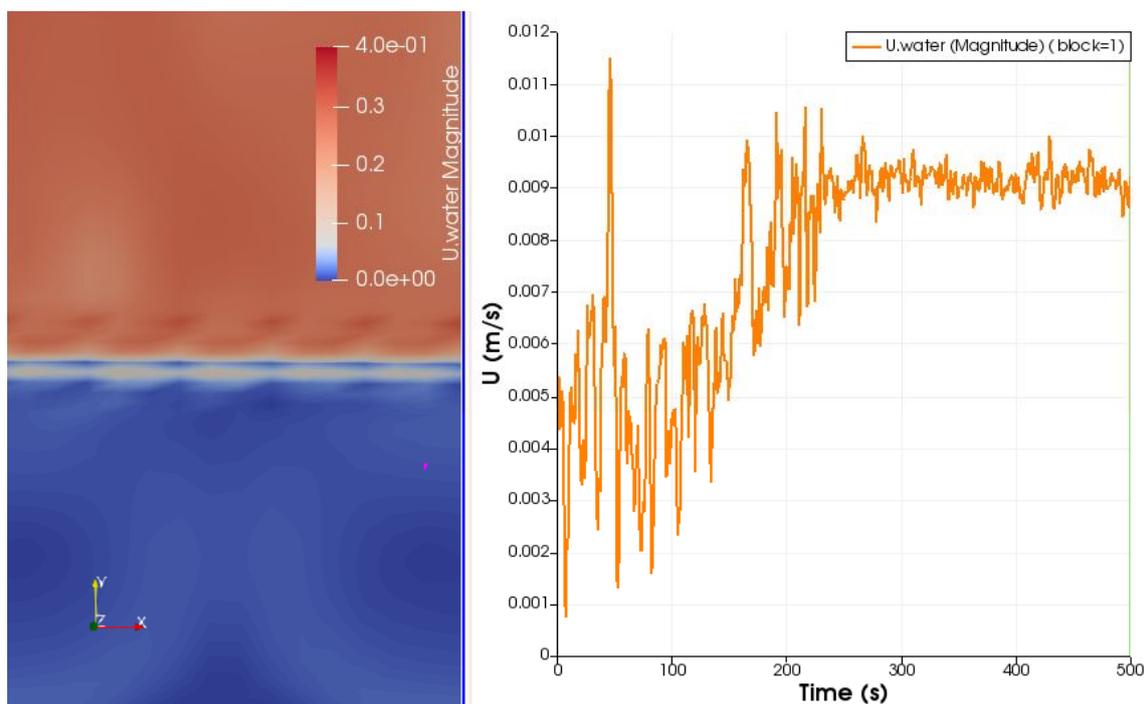


Рис. 4. График изменение модуля вектора скорости от времени в правом конвективном валу

При условиях, заданных в рассматриваемой задаче, примерно после 250-ой секунды характер поведения для полей скорости и температуры не меняется, и задача переходит к стационарному состоянию.

Список литературы

1. *Андреев В. К., Гапоненко Ю. А., Гончарова О. Н., Пухначев В. В.* Современные математические модели конвекции. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 368 с.
2. *Бекежанова В. Б., Гончарова О. Н.* Задачи испарительной конвекции (обзор) // Прикладная математика и механика. 2018. Т. 82. №. 2. С. 219–260.
3. *Гончарова О. Н.* Математические модели конвективных течений в условиях массопереноса на термокапиллярной границе раздела. // Сборник трудов Всероссийской конференции по математике с международным участием «МАК-2018». Барнаул, 2018. С. 63–65.
4. *Шапвалов В. А.* Образование и развитие мощных конвективных облаков при различных характеристиках ветра в атмосфере // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Науки о Земле. 2018. Т. 18. №. 4. С. 259–264.
5. *Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М.* Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.

ВИБРАЦИОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСЕЙ В ПРОСТЫХ КОНВЕКТИВНЫХ СИСТЕМАХ

В. А. Демин, Ю. Н. Мухайлова

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

В работе численно методом конечных разностей решена задача об эволюции распределения концентрации примеси в плоском бесконечном слое жидкости в поле тяжести и при наличии высокочастотных вибраций в случае начального равномерного одномерного источникового распределения тяжелого компонента на одной из границ. Оказалось, что при вымывании примеси с верхней границы перенос примеси в обычных условиях осуществляется за счет неустойчивости Рэля – Тейлора, а в условиях микрогравитации движущей силой является вибрационно-конвективное воздействие. Численное моделирование показало, что наиболее существенным процесс вымывания примеси в жидкость становится в случае продольных вибраций. Поперечные слою колебания подавляют осредненное течение, и перенос примеси приобретает чисто диффузионный характер.

Ключевые слова: вибрационно-концентрационная конвекция; вымывание примеси в объем; неустойчивость Рэля-Тейлора

VIBRATIONAL MECHANISMS OF ADMIXTURE TRANSFER IN SIMPLE CONVECTIVE SYSTEMS

V. A. Demin, Y. N. Mukhailova

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The problem of concentration-induced convection in an infinite plane fluid layer under the influence of gravity field and vibrations has been solved numerically by the method of finite differences. Modeling case with homogeneous one-dimensional source distribution of a heavy component on the upper solid boundary was considered. It has been found that the admixture is transferred due to the Rayleigh-Taylor instability during ablation of the impurity from upper boundary. In microgravity conditions the driving force has vibrational-convective nature. The process of admixture ablation into the fluid has been considered for arbitrary oriented vibrations. It has been shown that in dependence on the direction of the vibration axis, the process of admixture redistribution passes with various rates. Numerical simulation demonstrates that the strongest effect of admixture ablation takes place for longitudinal vibrations. On the other hand, the vibrations transversal to layer damp average flow. In this case the mass transfer has diffusive character.

Keywords: vibrational convection in fluid molecular mixtures; ablation of the admixture in a volume; Rayleigh-Taylor instability

1. Введение

В настоящее время конвективный тепло- и массоперенос в различных естественно-научных дисциплинах представляется одним из центральных и

ключевых факторов при описании различных явлений в жидкостях и газах. Конвективные течения, вызванные изменениями плотности и связанные с неоднородностью температуры, принято называть тепловой конвекцией [1], а движение жидкости, вызванное неоднородным распределением примеси называют концентрационной конвекцией.

Высокочастотные колебания полости, целиком заполненной жидкостью, при наличии температурной неоднородности могут вызывать регулярные осредненные течения. Этот результат действия вибраций принято называть явлением термовибрационной конвекции [2, 3]. Возникающее при этом конвективное движение состоит из двух компонент – колебаний с частотой вибраций и осредненного течения. Если период колебаний много меньше всех гидродинамических времен, а амплитуда смещения в некотором смысле мала, то может быть применен метод осреднения, который позволяет получить замкнутую систему дифференциальных уравнений для осредненных полей скорости, температуры и давления. В теории тепловой конвекции этот метод был впервые развит в работе [4] для изучения влияния высокочастотных вибраций на конвективную устойчивость равновесия горизонтального слоя жидкости, подогреваемого снизу. Экспериментально термовибрационная конвекция горизонтального слоя жидкости с твердыми границами при воздействии высокочастотных вибраций, наклоненных под произвольным углом к слою, была изучена в [5]. Эксперименты подтвердили справедливость теоретического подхода к описанию вибрационно-конвективных течений, в основу которого был положен метод осреднения.

В данной работе предпринята попытка изучения влияния высокочастотного вибрационно-концентрационного воздействия на систему в случае зависимости коэффициента диффузии от концентрации в статическом поле тяжести и при наличии конвективного массопереноса. По результатам прямого численного моделирования выявлены наиболее эффективные способы усиления или наоборот подавления процесса вымывания примеси с одной из твердых границ горизонтального слоя в объем.

2. Уравнения концентрационной конвекции в поле тяжести

Для анализа концентрационных явлений при наличии конвективного переноса и высокочастотных вибраций может быть применен метод осреднения. Эта процедура реализуется в отношении классических уравнений концентрационной конвекции в форме, аналогичной приближению Буссинеска. Результирующая система уравнений содержит уравнение Навье – Стокса с дополнительным вибрационным слагаемым, обобщенное уравнение переноса примеси и уравнение несжимаемости жидкости. В безразмерной форме эта система уравнений имеет вид

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + Sc^{-1}(\bar{v}\nabla)\bar{v} = -\nabla p + \Delta \bar{v} - RaC\bar{\gamma} + Ra_v(\bar{w}\nabla)(C\bar{n} - \bar{w}), \quad (1)$$

$$Sc \frac{\partial C}{\partial t} + (\bar{v} \nabla) C = \Delta C + \varepsilon \Delta C^2 + De \Delta (\bar{w} \nabla C)^2, \quad (2)$$

$$\operatorname{div} \bar{v} = 0, \quad \operatorname{rot} \bar{w} = \nabla C \times \bar{n}, \quad \operatorname{div} \bar{w} = 0. \quad (3)$$

Здесь \bar{v} , p , C – осредненные поля скорости, давления и концентрации тяжелого компонента; \bar{w} – амплитуда пульсационной компоненты скорости, \bar{n} – единичный вектор, направленный вдоль оси вибраций, $\vec{\gamma}$ – единичный вектор, ориентированный вертикально вверх. В систему уравнений (1) – (3) входят следующие безразмерные параметры:

$$Ra_v = \frac{(b\Omega\beta_c\Sigma h)^2}{2\nu D_0}, \quad Ra = \frac{g\beta_c\Sigma h^3}{\nu D_0}, \quad Sc = \frac{\nu}{D_0}, \quad \varepsilon = \frac{\alpha\Sigma}{2}, \quad De = \frac{\alpha\Sigma^3}{4h^2}(b\beta_c)^2.$$

Здесь b – амплитуда, Ω – частота колебаний; β_c – коэффициент зависимости плотности жидкости от концентрации ν – коэффициент кинематической вязкости, g – ускорение свободного падения, Σ – начальная разность концентраций на границах. Предполагается, что коэффициент диффузии зависит от концентрации по простейшему закону $D(C) = D_0(1 + \alpha C)$, где D_0 – коэффициент диффузии при малых значениях концентрации примеси, α – размерный параметр зависимости коэффициента диффузии от концентрации. Концентрационное число Рэлея Ra описывает действие силы тяжести, вибрационный аналог числа Рэлея Ra_v определяет интенсивность осредненного вибрационного воздействия, число Шмидта Sc представляет собой отношение диссипативных вкладов вязкости и диффузии, параметр ε описывает зависимость коэффициента диффузии от концентрации. Дополнительный параметр De , отвечает за нелинейный вибрационный транспорт в уравнении для концентрации.

3. Постановка задачи

Рассмотрим процесс осредненного вымывания примеси с одной из стенок бесконечного горизонтального слоя бинарной смеси толщиной h в поле тяжести за счет высокочастотного вибрационного воздействия на конвективную систему (рис. 1).

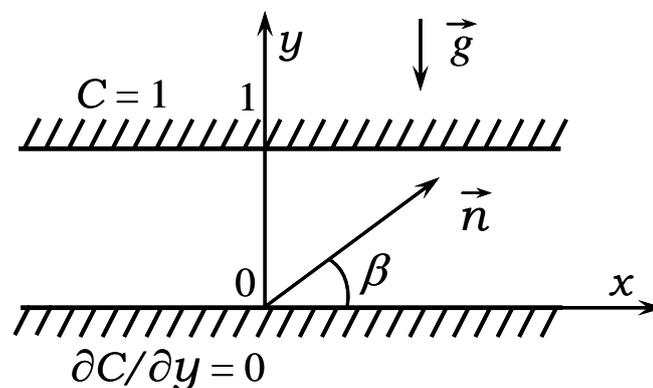


Рис. 1. Плоский слой жидкости с источником примеси на верхней границе

При наличии статического поля тяжести и вибраций конвективные течения обусловлены двумя различными механизмами – гравитационным и вибрационным. Поля скорости и концентрации удовлетворяют следующим граничным условиям:

$$\vec{v}|_{\Gamma} = 0, \quad \omega_n|_{\Gamma} = 0, \quad C(1) = 1, \quad \partial C / \partial \bar{n}|_{y=0} = 0,$$

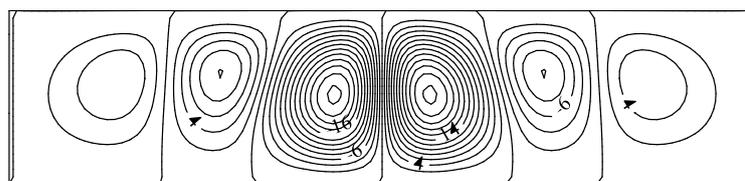
что подразумевает выполнение условия прилипания для осредненного поля скорости, условие непротекания для пульсационной компоненты скорости, условие непроницаемости для потока вещества на нижней грани. Источник примеси находится на верхней границе.

Решение уравнений осуществлялось методом конечных разностей. В ходе расчетов использовался двухполевой метод [7]. Вычислительный код был реализован на языке программирования FORTRAN-90. Производные по координатам вычислялись с помощью центральных разностей; для нахождения производных по времени использовались односторонние разности. Значения вихря на твердых границах полости находились по формулам Тома. На торцах слоя, как правило, ставилось условие периодичности решений.

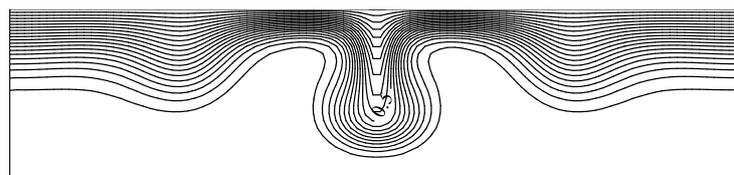
4. Результаты численных расчетов

Данная постановка задачи в некотором смысле аналогична проблеме Рэлея – Тейлора о неустойчивости поверхности раздела жидкостей с различными плотностями в поле тяжести, когда слой более плотной среды лежит в неустойчивом состоянии на слое менее плотной жидкости.

При такой постановке задачи и отмеченных граничных условиях была проанализирована эволюция полей функции тока и концентрации. Значения безразмерных параметров в этой серии расчетов принимались равными: $Ra_v = 1500$, $\beta = 0^\circ$, $\varepsilon = 0.2$, $Sc = 1000$, $Ra = 28000$, длина полости $L = 4.19$.



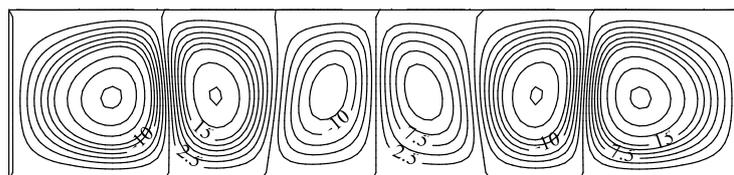
a)



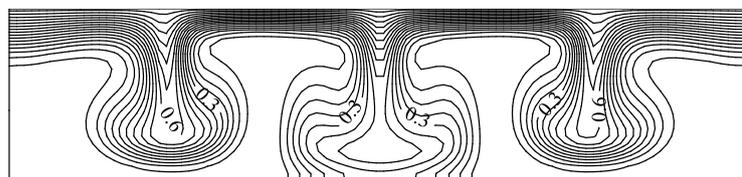
б)

Рис. 2. Изолинии функции тока (а) и распределение примеси (б) в слое в момент времени $t = 28$

Интенсивность движения отслеживалась по зависимости максимума функции тока от времени. Изолинии функции тока, представленные на рис. 2а, выявляют образование трех пар вихрей, вращающихся в противоположные стороны. Данное течение наиболее интенсивно в середине слоя. Сформировавшаяся пара вихрей деформирует поле примеси в середине слоя, образуя концентрационную каплю (рис. 2б). Далее происходит обвал концентрационного пятна в центральной части полости.

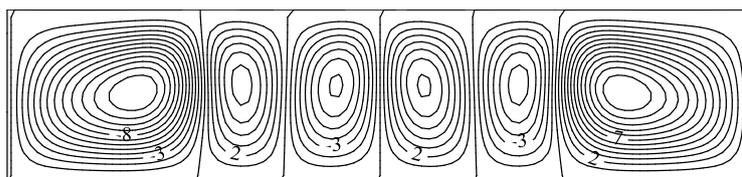


а)

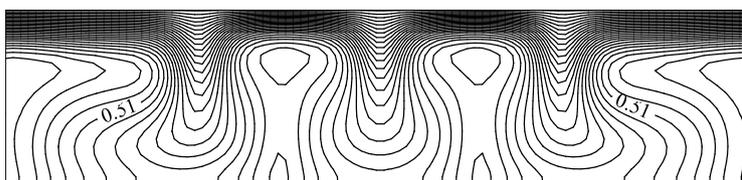


б)

Рис. 3. Изолинии функции тока (а) и распределение примеси (б) в слое в момент времени $t = 35$



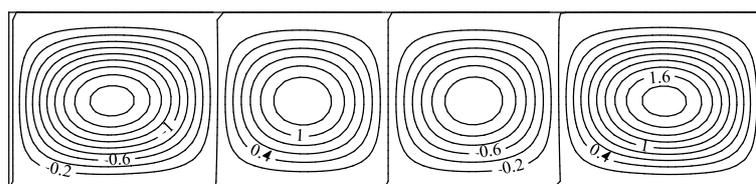
а)



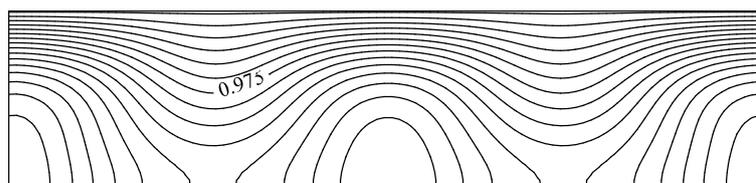
б)

Рис. 4. Изолинии функции тока (а) и распределение примеси (б) в слое в момент времени $t = 100$

В момент времени $t = 35$ (рис. 3а, 3б) начинается развитие боковых концентрационных капель. В результате максимум интенсивности движения перемещается в области с их локализацией. Представленные на рис. 4а, 4б, 5а, 5б поля функции тока и концентрации в разные моменты времени показывают развитие и эволюцию концентрационных капель. Образовавшиеся капли равномерно распределяются по объему полости, и при достижении $t = 880$ наступает насыщение слоя примесью. Расчет поля скорости показывает, что в жидкости имеют место пики интенсивности движения, ускоряющие процесс насыщения слоя примесью.



а)

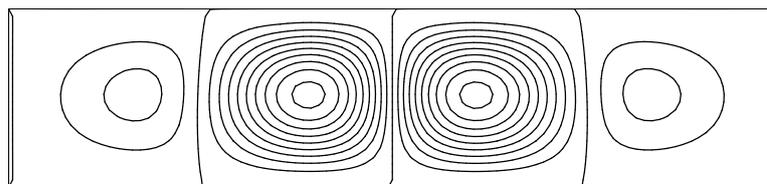


б)

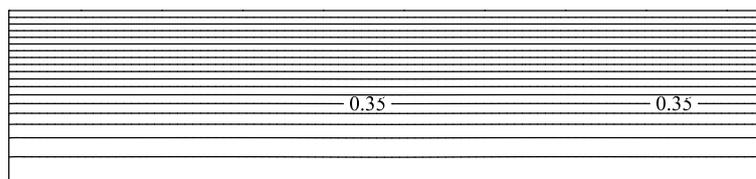
Рис. 5. Изолинии функции тока (а) и распределение примеси (б) в слое в момент времени $t = 500$

Возникающие два пика соответствуют обвалу центрального и боковых концентрационных капель. Данный перенос примеси осуществляется за счет неустойчивости Рэля – Тейлора. Расчеты показывают, что изменение угла наклона оси вибраций практически не влияет на характер движения, поскольку в условиях реальной гравитации вибрационно-конвективное воздействие на систему проявляется слабо.

Рассмотрим горизонтальный слой жидкости в условиях микрогравитации ($Ra = 500$). Пронаблюдаем за течением при изменении угла наклона оси вибраций, т.к. интенсивность концентрационно-гравитационного и вибрационно-концентрационного механизмов становится сопоставимой. На рис. 6а, 6б и 7а, 7б представлены изолинии полей функции тока и концентрации в момент времени $t = 120$ при $Ra_v = 1500$, $\varepsilon = 0.2$, $Sc = 1000$, $Ra = 500$, $L = 4.19$ для двух углов наклона оси вибраций. При вибрациях, наклоненных под углом $\beta = 45^\circ$, симметрия изолиний функции тока нарушается, однако концентрационное поле остается прежним.

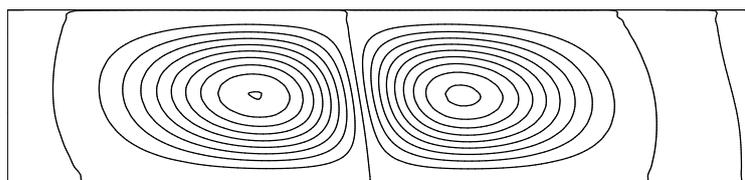


a)

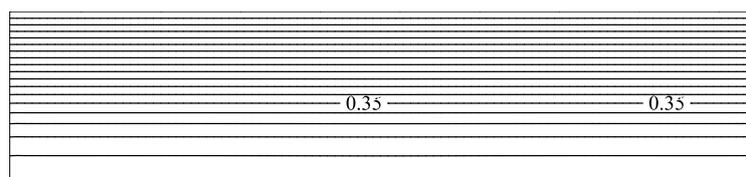


б)

Рис. 6. Изолинии функции тока (а) и распределение концентрации примеси (б) при $\beta = 0^\circ$



a)



б)

Рис. 7. Изолинии функции тока (а) и распределение концентрации примеси (б) при $\beta = 45^\circ$

Зависимости максимума функции тока от времени при различных углах наклона оси вибрации показывают, что движение имеет низкую интенсивность, и фактически является осредненным ползущим течением. В представленном случае движущей силой является вибрационно-конвективное воздействие, механизм транспорта примеси Рэлея – Тейлора дает сопоставимый вклад. Увеличение угла наклона вибраций еще больше снижает интенсивность движения. Вибрации, наклоненные под углом

$\beta = 90^\circ$, фактически полностью подавляют конвективное движение, перенос примеси становится диффузионным.

5. Заключение

Численно рассмотрена задача о вибрационно-концентрационном конвективном воздействии на плоский слой жидкости в статическом поле тяжести при учете зависимости коэффициента диффузии от концентрации. По результатам расчетов получены поля скоростей и концентрации и зависимости максимума функции тока от времени. При вымывании примеси с верхней границы перенос примеси осуществляется преимущественно за счет неустойчивости Рэлея – Тейлора. В условиях микрогравитации движущей силой является вибрационно-конвективное воздействие. Оказалось, что одним из наиболее эффективных способов усиления или, наоборот, подавления процесса вымывания примеси является изменение угла наклона оси вибраций по отношению к слою. Показано, что наиболее интенсивное вымывание примеси с твердой границы слоя происходит при касательных вибрациях.

Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. 6. Гидродинамика. М.: Физматлит, 2001. 736 с.
2. Gershuni G. Z., Lyubimov D. V. Thermal vibrational convection. Wiley&Sons, 1998. 358 p.
3. Гершуни Г. З., Жуховицкий Е. М. О свободной тепловой конвекции в вибрационном поле в условиях невесомости // Доклады Академии наук СССР. 1979. Т. 249. № 3. С. 580–584.
4. Зеньковская С. М., Симоненко И. Б. О влиянии вибрации высокой частоты на возникновение конвекции // Известия Академии наук СССР. Механика жидкости и газа. 1966. № 5. С. 51–55.
5. Заварыкин М. П., Зорин С. В., Путин Г. Ф. Экспериментальное исследование вибрационной конвекции // Доклады Академии наук СССР. 1985. Т. 281. № 4. С. 815–816.
6. Тарунин Е. Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции. Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1990. 228 с.

СОБСТВЕННЫЕ КОЛЕБАНИЯ ПОЛУСФЕРИЧЕСКОЙ КАПЛИ ВЯЗКОЙ ЖИДКОСТИ С ЗАКРЕПЛЕННОЙ ЛИНИЕЙ КОНТАКТА

В. С. Колупаев

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Рассматриваются собственные колебания капли жидкости на подложке. В равновесном состоянии капля имеет полусферическую форму. Линия контакта закреплена. Капля окружена невесомым газом, влияние которого не учитывается. Найдены значения частот собственных колебаний невязкой капли и поправка к частоте, связанная с наличием малой вязкости.

Ключевые слова: капля на подложке; полусферическая капля; собственные колебания; вязкий пограничный слой

NATURAL OSCILLATIONS OF A HEMISPHERICAL DROP OF A VISCOUS FLUID WITH A PINNED CONTACT LINE

V. S. Kolupaev

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The natural oscillations of a liquid drop on a substrate are considered. In equilibrium the drop has a hemispherical shape. The contact line is fixed. The drop is surrounded by a weightless gas, whose influence is not taken into account. The values of natural frequencies of an inviscid droplet and a correction to the frequency associated with the presence of low viscosity are found.

Keywords: drop on substrate; hemispherical drop; natural oscillations; viscosity boundary layer

Вибрации, с одной стороны, могут являться средством управления каплями, пузырьками и пр., но с другой стороны, являться нежелательным воздействием в различных технологических процессах. При высокочастотных вибрациях влияние вязкости важно только в тонком пограничном слое вблизи твердой поверхности [1]. Течение вне этого слоя можно рассматривать как невязкое.

Другой важной проблемой является изменение краевого угла и движение линии контакта трех сред [2]. Одним из наиболее простых условий, описывающих динамику контактной линии, является эффективное граничное условие Хокинга [3]:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \Lambda \mathbf{k} \nabla \xi, \quad (1)$$

где ξ – отклонение поверхности от равновесного положения, Λ – параметр Хокинга, \mathbf{k} – единичный вектор нормали к твердой поверхности. Отметим, что условие (1) приведено для прямого равновесного краевого угла, но аналогичное условие можно написать и для произвольного значения равновес-

ного краевого угла [4]. Кроме того, условия фиксированной контактной линии и постоянного краевого угла являются частными случаями граничного условия (1): $\partial\xi/\partial t = 0$ и $\mathbf{k}\nabla\xi = 0$, соответственно. Условие (1) и его модификации использовались в различных задачах [5–15].

В данной работе исследуются собственные колебания капли вязкой жидкости с плотностью ρ_i^* на подложке (рис. 1). В равновесном состоянии капля имеет форму полусферы радиуса R^* с прямым краевым углом. Линия контакта закреплена, краевой угол может изменяться. Капля окружена невесомым газом, влиянием которого пренебрегаем. Вязкость будем учитывать только в вязком тонком пограничном слое вблизи твердой поверхности. Течение внутри ядра капли будем рассматривать как невязкое. Поверхность капли может деформироваться. В целом, задача похожа на работы [5-7]. Однако в дальнейшем планируется рассмотреть случай неоднородной подложки с подвижной линией контакта по аналогии с работами с цилиндрической каплей [12, 13]. В работе [16] рассматривалась динамика двумерной (цилиндрической) капли с закрепленной линией контакта, в [17] – колебания вязкого капиллярного моста. Колебания сжимаемых полусферических капель (пузырьков) рассматривались в работах [7, 18].

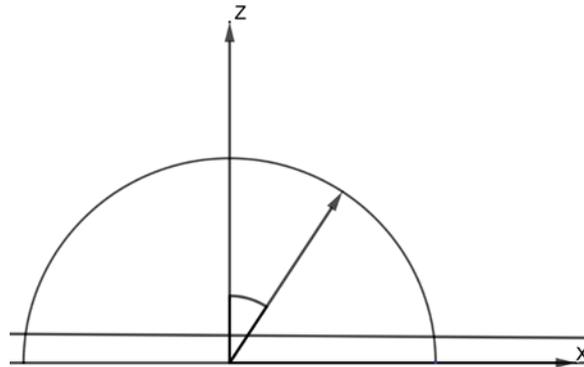


Рис. 1. Геометрия задачи

В силу симметрии задачи, перейдем в сферическую систему координат (r, α, ϑ) , начало отсчета которой совпадает с центром сферы в равновесии. Выберем в качестве единиц измерения времени $\sqrt{\rho_i^* R^{*3}/\sigma^*}$, радиальной координаты R^* , отклонения поверхности A^* , скорости $A^* \sqrt{\sigma^*/(\rho_i^* R^{*3})}$, плотности ρ_i^* , давления $A^* \sigma^*/R^{*2}$, где σ^* – коэффициент поверхностного натяжения. В безразмерном виде краевая задача будет иметь вид:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \varepsilon (\mathbf{v}\nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \delta^2 \Delta \mathbf{v}, \quad \text{div} \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

$$r = 1: \quad \frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla F = 0, \quad -\varepsilon p + \varepsilon \delta^2 \overline{\mu n n} = -\text{div} \mathbf{n}, \quad (3)$$

$$F = r - 1 - \varepsilon \xi, \quad \mathbf{n} = \frac{\nabla F}{|\nabla F|},$$

$$\vartheta = \frac{\pi}{2}: \quad \mathbf{v} = 0, \quad (4)$$

$$r = 1, \quad \vartheta = \frac{\pi}{2}: \quad \xi = 0, \quad (5)$$

где \mathbf{v} – вектор скорости жидкости, p – давление, ν_i^* – коэффициент кинематической вязкости жидкости.

Краевая задача (2)–(5) содержит три безразмерных параметра:

$$\varepsilon = \frac{A^*}{R^*} \text{ – амплитуда колебаний,}$$

$$\delta^2 = \nu_i^* \sqrt{\frac{\rho_i^* R^*}{\sigma^*}} \text{ – толщина вязкого пограничного слоя,}$$

$$\omega = \omega^* \sqrt{\frac{\rho_i^* R^{*3}}{\sigma^*}} \text{ – частота колебаний.}$$

Будем считать амплитуду колебаний и толщину вязкого пограничного слоя малыми, т.е. $\varepsilon \ll 1$, $\delta \ll 1$. Рассмотрим течение невязкой жидкости в ядре капли и вязкой жидкости в тонком пограничном слое на твердой подложке. Для удобства запишем отдельно краевые задачи о движении жидкости в невязкой области капли и вязком пограничном слое.

Движение в ядре капли будем считать потенциальным, т.е. $\mathbf{v} = \nabla \varphi$. Линеаризованная задача (2)–(5) в этом случае примет вид

$$p = -\frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad \Delta \varphi = 0, \quad (6)$$

$$r = 1: \quad \frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad p = -(2 + \Delta_{\alpha, \vartheta}) \xi, \quad (7)$$

$$\Delta_{\alpha, \vartheta} = \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right),$$

$$\vartheta = \frac{\pi}{2}: \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \vartheta} = 0 \quad (8)$$

$$r = 1, \quad \vartheta = \frac{\pi}{2}: \quad \xi = 0. \quad (9)$$

Решение задачи (6)–(9) будем искать в виде ряда Фурье по собственным функциям оператора Лапласа:

$$\varphi = \operatorname{Re} \left(i \omega \Psi(r, \alpha, \vartheta) e^{i \omega t} \right), \quad \Psi(r, \alpha, \vartheta) = \sum_{m, n=0}^{\infty} A_{mn} r^n P_n^{(m)}(\cos \vartheta) e^{im\alpha}, \quad (10)$$

где ω – частота собственных колебаний, $P_n^{(m)}$ – обобщенные полиномы Лежандра. Из условия непротекания (8) следует, что $m + n = 2l$, $l \in \mathbb{N}$.

Решение для функции отклонения поверхности ξ рассмотрим отдельно для нескольких азимутальных чисел m . В общем случае, для функции ξ получаем из (6)-(10) следующие уравнения:

$$(2 + \Delta_{\alpha, \vartheta}) \xi = -\operatorname{Re} \left(\omega^2 \sum_{m,n=0}^{\infty} A_{mn} P_n^{(m)}(\cos \vartheta) e^{im\alpha} e^{i\omega t} \right) \quad (11)$$

$$\xi = \operatorname{Re} \left(i\omega \sum_{m,n=0}^{\infty} n A_{mn} P_n^{(m)}(\cos \vartheta) e^{im\alpha} e^{i\omega t} \right) \quad (12)$$

Для осесимметричных колебаний $m = 0$ решение ищем в виде

$$\xi = \operatorname{Re} \left(\sum_{n=0}^{\infty} C_{0n} P_{2n}(\cos \vartheta) e^{i\omega t} + d_0 \cos \vartheta e^{i\omega t} \right), \quad (13)$$

$$C_{0n} = \frac{\omega^2 f_n d_0}{\Omega_{0n}^2 - \omega^2}, \quad \cos \vartheta = \sum_{n=0}^{\infty} f_n P_{2n}(\cos \vartheta).$$

Здесь $\Omega_{0n}^2 = 2n(2n+1)(2n-1)$ – частота собственных колебаний капли со свободно скользящей линией контакта, т.е. с постоянным краевым углом.

Подставляя решение (13) в (11), получим уравнение для нахождения частот собственных колебаний

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Omega_{0n}^2 f_n P_{2n}(0)}{\Omega_{0n}^2 - \omega^2} = 0 \quad (14)$$

Полученное уравнение совпадает с аналогичными в работах [5,6].

Для трансляционных колебаний $m = 1$ уравнения (11)–(12) примут вид

$$(1 - y^2) \xi_1'' - 2y \xi_1' + \left(2 - \frac{1}{1 - y^2} \right) \xi_1 = -\omega^2 A_{10} P_1^{(1)}(y), \quad (15)$$

где $y = \cos \vartheta$, $\xi_1 = \xi_1(y)$. Общее решение этого уравнения можно представить как

$$\xi_1 = d_1 \sqrt{1 - y^2} + \frac{1}{3} \omega^2 A_{10} \left(\ln(1 + y) \sqrt{1 - y^2} - \sqrt{\frac{1 - y}{1 + y}} \right). \quad (16)$$

В результате, общее решение $\xi(\alpha, \vartheta, t)$ для трансляционных колебаний с учетом (16) запишем в следующем виде:

$$\xi = \operatorname{Re} \left(\left(\sum_{n=1}^{\infty} C_{1n} P_{2n+1}^{(1)}(y) + d_1 P_1^{(1)}(y) + \omega^2 A_{10} F(y) \right) e^{i\alpha} e^{i\omega t} \right), \quad (17)$$

$$F(y) = \frac{1}{3} \left(\ln(1 + y) \sqrt{1 - y^2} - \sqrt{\frac{1 - y}{1 + y}} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n P_{2n+1}^{(1)}(y).$$

Подставляя решение (17) в систему (11)-(12), получим уравнение для нахождения частот трансляционной моды собственных колебаний:

$$\omega^3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{H_n P_{2n+1}^{(1)}(0)}{\Omega_{1n}^2 - \omega^2} - \omega \left(H_0 + \frac{1}{3} \right) + \frac{1}{\omega} = 0, \quad (18)$$

где $\Omega_{1n}^2 = 2n(2n+1)(2n+3)$. Аналогичное уравнение было получено в [5].

Рассмотрим теперь азимутальные колебания. Для квадрупольной моды $m = 2$ решение будем искать в виде

$$\xi = \text{Re} \left(\left(\sum_{n=0}^{\infty} C_{2n} P_{2n+2}^{(2)}(y) + d_2 (y+2) \frac{1-y}{1+y} \right) e^{2i\alpha} e^{i\omega t} \right), \quad (19)$$

$$(y+2) \frac{1-y}{1+y} = \sum_{n=0}^{\infty} M_n P_{2n+2}^{(2)}(y).$$

Уравнение для нахождения частот в этом случае имеет следующий вид

$$2 + \omega^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{M_n P_{2n+2}^{(2)}(0)}{\Omega_{2n}^2 - \omega^2} = 0, \quad \Omega_{2n}^2 = (2n+1)(2n+2)(2n+4). \quad (20)$$

Для азимутальной моды $m = 3$ получается подобное решение для функции отклонения и уравнение для нахождения частот

$$\xi = \text{Re} \left(\left(\sum_{n=0}^{\infty} C_{3n} P_{2n+3}^{(3)}(y) + d_3 (y+3) \left(\frac{1-y}{1+y} \right)^{\frac{3}{2}} \right) e^{2i\alpha} e^{i\omega t} \right), \quad (21)$$

$$(y+3) \left(\frac{1-y}{1+y} \right)^{\frac{3}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} N_n P_{2n+3}^{(3)}(y),$$

$$3 + \omega^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{N_n P_{2n+3}^{(3)}(0)}{\Omega_{3n}^2 - \omega^2} = 0, \quad \Omega_{3n}^2 = (2n+2)(2n+3)(2n+5).$$

Ниже представлена таблица значений частот собственных колебаний капли жидкости на подложке с закрепленной линией контакта.

Табл. 1. Частоты собственных колебаний

n/m	0	1	2	3
1	4.59	2.22	4.85	7.86
2	10.97	7.45	10.82	14.50
3	18.69	14.21	18.17	22.41
4	27.60	22.19	26.66	31.41
5	37.57	31.24	36.16	41.37

Кроме частот собственных колебаний были получены вязкие поправки к этим частотам, связанные с наличием диссипации в тонком пограничном слое.

Список литературы

1. Лойцянский Л. Г. Ламинарный пограничный слой. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1962. 479 с.

2. *de Жен П. Ж.* Смачивание: статика и динамика // Успехи физических наук. 1987. Т. 151. № 4. С. 619–681.
3. *Hocking L. M.* The damping of capillary-gravity waves at a rigid boundary // Journal of Fluid Mechanics. 1987. Vol. 179. P. 253–266.
4. *Алабужев А. А., Любимов Д. В.* Влияние динамики контактной линии на колебания сжатой капли // Прикладная механика и техническая физика. 2012. Т. 53. № 1. С. 1–12.
5. *Любимов Д. В., Любимова Т. П., Шкляев С. В.* Неосесимметричные колебания полусферической капли // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2004. № 6. С. 8–20.
6. *Lyubimov D. V., Lyubimova T P., Shklyayev S. V.* Behavior of a drop on an oscillating solid plate // Physics of Fluids. 2006. Vol. 18. 012101.
7. *Shklyayev S., Straube A. V.* Linear oscillations of a hemispherical bubble on a solid substrate // Physics of Fluids. 2008. Vol. 20. 052102.
8. *Алабужев А. А., Любимов Д. В.* Влияние динамики контактной линии на собственные колебания цилиндрической капли // Прикладная механика и техническая физика. 2007. Т. 48. № 5. С. 78–86.
9. *Алабужев А. А.* Поведение цилиндрического пузырька под действием вибраций // Вычислительная механика сплошных сред. 2014. Т. 7. № 2. С. 151–161.
10. *Алабужев А. А.* Продольные колебания цилиндрической капли в ограниченном объеме жидкости // Вычислительная механика сплошных сред. 2016. Т. 9. № 3. С. 316–330.
11. *Алабужев А. А.* Трансляционные колебания цилиндрической капли в ограниченном объеме жидкости // Вычислительная механика сплошных сред. 2016. Т.9. № 4. С. 453–465.
12. *Alabuzhev A. A., Kashina M. A.* The dynamics of oblate drop between heterogeneous plates under alternating electric field // Microgravity Science and Technology. 2018. Vol. 30 (1–2). P. 11–17.
13. *Alabuzhev A. A.* Influence of heterogeneous plates on the axisymmetrical oscillations of a cylindrical drop // Microgravity Science and Technology. 2018. Vol. 30 (1–2). P. 25–32.
14. *Алабужев А. А., Кашина М. А.* Влияние различия свойств поверхностей на осесимметричные колебания сжатой капли в переменном электрическом поле // Известия вузов. Радиофизика. 2018. Т. 61. № 8–9. С. 662–676.
15. *Kashina M. A., Alabuzhev A. A.* The influence of difference in the surface properties on the axisymmetric vibrations of an oblate drop in an AC field // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1163. 012017.
16. *Картавых Н. Н., Шкляев С. В.* О параметрическом резонансе полуцилиндрической капли на осциллирующей твердой подложке // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2007. Вып. 1(6). С. 23–28.
17. *Демин В. А.* К вопросу о свободных колебаниях капиллярного моста // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2008. № 4. С. 28–37.
18. *Иванцов А. О.* Акустические колебания полусферической капли // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2012. Вып. 3(21). С. 16–23.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОТОННОГО ОБМЕНА В КРИСТАЛЛЕ НИОБАТА ЛИТИЯ

Э. В. Пермякова, А. Е. Самойлова

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Работа посвящена теоретическому моделированию процесса протонирования кристалла при создании канального оптического волновода. Рассмотрены две модели диффузии протонов в кристалле: линейная и нелинейная, в которой учитывается замещение протонами ионов лития в кристаллической решетке. Сопоставление профилей концентрации протонов, полученных в рамках двух моделей, позволяет судить об условиях создания разных типов волноводов: ступенчатого или градиентного.

Ключевые слова: протонный обмен; диффузия; моделирование

MODELING OF THE PROTON EXCHANGE IN LITHIUM NIOBATE

E. V. Permyakova, A. E. Samoilova

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

We investigate theoretically the proton exchange process during the channel waveguides fabrication. Both linear and nonlinear models of proton diffusion are applied. Nonlinear model describes the ion exchange between protons and lithium inside the crystal. We obtain different profiles of proton concentration for different conditions of proton exchange, which are possible result in different types of waveguides: step-index or graded-index one.

Keywords: proton exchange; diffusion; modeling

Введение

Протонный обмен в кристалле ниобата лития (LiNbO_3) является одним из этапов создания канального оптического волновода. Удивительно, что до сих пор инженеры вынуждены искать новый режим формирования волновода для кристаллов разных производителей. Причем этот поиск ведется исключительно экспериментальными методами, без опоры на теорию и учета свойств материалов. Построение адекватных моделей физических процессов, сопровождающих формирование волноводов, поможет улучшить технологический процесс на реальном производстве.

Схема формирования канального оптического волновода основана на создании в кристалле зоны с повышенным содержанием ионов водорода (протонов) – протонировании кристалла. Пластина кристалла ниобата лития толщиной 1 мм погружается при температуре около 200 °С в расплав бензойной кислоты $\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$. В приповерхностном слое кристалла происходит протонный обмен, в ходе которого ионы лития в кристалле частично

замещаются ионами водорода (протонами) из кислоты, в соответствии с химической реакцией (см. рис. 1(а))



В результате такого изменения структуры кристалла создается область с повышенным показателем преломления, т.е. формируется каналный оптический волновод. Спустя два часа от начала протонного обмена предполагается, что создан волновод глубиной 1 мкм [1]. Самой важной характеристикой волновода является распределение показателя преломления внутри него. При этом не существует прямых методов измерения показателя преломления в волноводе. Однако известна корреляция между показателем преломления и концентрацией протонов внутри кристалла [2]. Поэтому изучение диффузии протонов в кристалле позволит судить о распределении показателя преломления внутри кристалла [3].

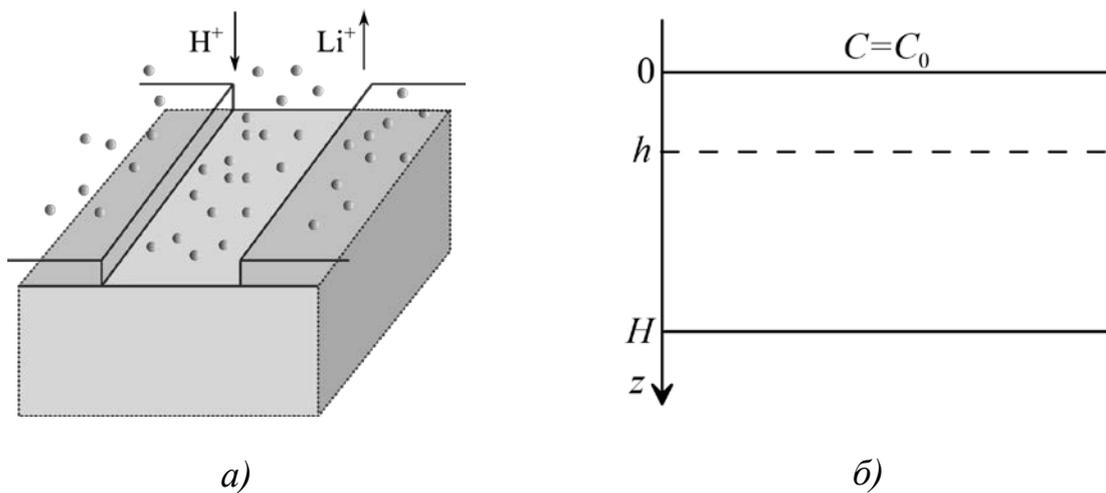


Рис. 1. Создание области для волновода методом фотолитографии (а) [1].
Геометрия задачи (б)

Данная работа посвящена теоретическому моделированию кинетики протонного обмена в кристалле ниобата лития. Ограничимся рассмотрением одномерного случая: ось z направим вертикально вниз с началом отсчета на поверхности кристалла посередине области травления, см. рис. 1(б). Предполагается, что до начала протонного обмена концентрация протонов внутри кристалла была равна нулю. Затем на поверхности кристалла при $z=0$ создается ненулевая концентрация протонов C_0 , которую мы будем считать постоянной по времени. Согласно закону Фика изменение концентрации протонов внутри кристалла будет происходить пропорционально градиенту потока вещества

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right),$$

где D – коэффициент диффузии. Рассматривается однородный изотропный кристалл.

Далее в настоящей работе рассматриваются две модели диффузии протонов в кристалле: линейная и нелинейная, в которой учитывается взаимодиффузия протонов лития. Во всех вычислениях, представленных ниже, значение коэффициента диффузии протонов выбрано равным $0,081$ мкм²/ч [3]. В реальных экспериментах эта величина может меняться в зависимости от температуры, состояния конкретного кристалла, свойств бензойной кислоты.

Линейная модель диффузии

На первом этапе рассматривается самая простая модель диффузии, в которой поток протонов в кристалле обусловлен только градиентом их концентрации.

Задача для однокомпонентной диффузии протонов в кристалле имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}, \quad C(z, 0) = 0, \quad C(H, t) = 1, \quad \frac{\partial C}{\partial z}(0, t) = 0, \quad (2)$$

где концентрация $C(z, t)$ нормирована на величину концентрации на поверхности кристалла C_0 . Решение данной задачи известно [4]:

$$C(z, t) = 1 - \frac{4}{\pi} \sum_n \frac{1}{(2n+1)} \sin\left(\frac{2n+1}{2} \pi \frac{z}{H}\right) e^{-\frac{(2n+1)^2 \pi^2 D t}{4H^2}}. \quad (3)$$

Отметим, что в реальном технологическом процессе в кристалле толщиной 1 мм формируется волновод толщиной 1 мкм. Поэтому можно ограничиться рассмотрением диффузии в слое, толщина которого много меньше толщины кристалла H , т.е. рассматривать полубесконечную область вдоль оси z .

Решение задачи о диффузии в полубесконечной области имеет вид:

$$C(z, t) = \frac{z}{2\sqrt{\pi D}} \int_0^t \frac{e^{-\frac{z^2}{4D(t-\tau)}} d\tau}{(t-\tau)^{3/2}}. \quad (4)$$

На рис. 2 приведены результаты вычисления функции $C(z, t)$ по формулам (3) и (4) (штриховые и сплошные линии, соответственно). Результат для полубесконечной области ожидаемо лучше описывает процесс диффузии на маленьких пространственных и временных масштабах.

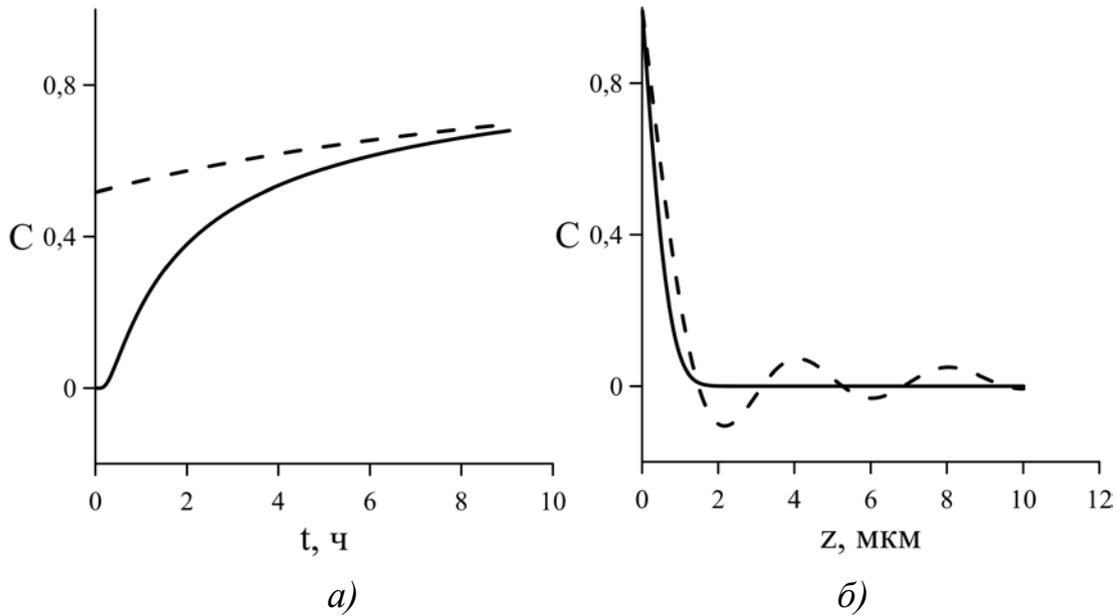


Рис. 2. Концентрация протонов внутри кристалла LiNbO_3 при $D_H=0.081$ мкм²/ч. (а) Зависимость концентрации при $z=0.5$ мкм от времени. (б) Профили концентрации при $t=1$ ч.

Нелинейная модель диффузии

Из уравнения (1) видно, что для более точного описания протонного обмена необходимо рассматривать взаимодиффузию двух компонент: протонов и ионов лития. При этом поток ионов будет вызван не только градиентом их концентрации, но так же и локальной разностью потенциалов, вызванной неодинаковостью коэффициентов самодиффузии D_{H^+} и D_{Li^+} . Если изначально ионы водорода диффундируют с другой скоростью, чем ионы лития, то возникает локальная ненулевая разность потенциалов. Причем эта разность потенциалов будет подгонять более медленные ионы, способствуя таким образом поддержанию электронейтральности системы.

В рамках данной модели уравнение диффузии будет нелинейным:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{D_{H^+}}{1 - \alpha C} \frac{\partial C}{\partial z} \right), \quad (5)$$

где $\alpha = 1 - D_{H^+}/D_{Li^+}$. Очевидно, что при $\alpha = 0$ данная модель переходит в линейную, результаты для которой представлены выше.

Уравнение (5) дополняется теми же начальным и граничными условиями, что в задаче (2). Получающаяся нелинейная задача решалась численно методом сеток с использованием явно- неявной схемы.

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} = \frac{1}{h} \left(D_{i+1}^n \frac{C_{i+1}^{n+1} - C_i^{n+1}}{h} - D_{i-1}^n \frac{C_i^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{h} \right),$$

$$D_{\frac{i+1}{2}}^n = \frac{D_i^n + D_{i+1}^n}{2}, \quad D_{\frac{i-1}{2}}^n = \frac{D_i^n + D_{i-1}^n}{2}.$$

Результаты вычислений концентрации протонов внутри кристалла представлены на рис. 3. Из данного рисунка видно, что увеличение коэффициента самодиффузии ионов лития по сравнению с коэффициентом самодиффузии протонов приводит к тому, что на фиксированном срезе кристалла быстрее происходит насыщение протонами.

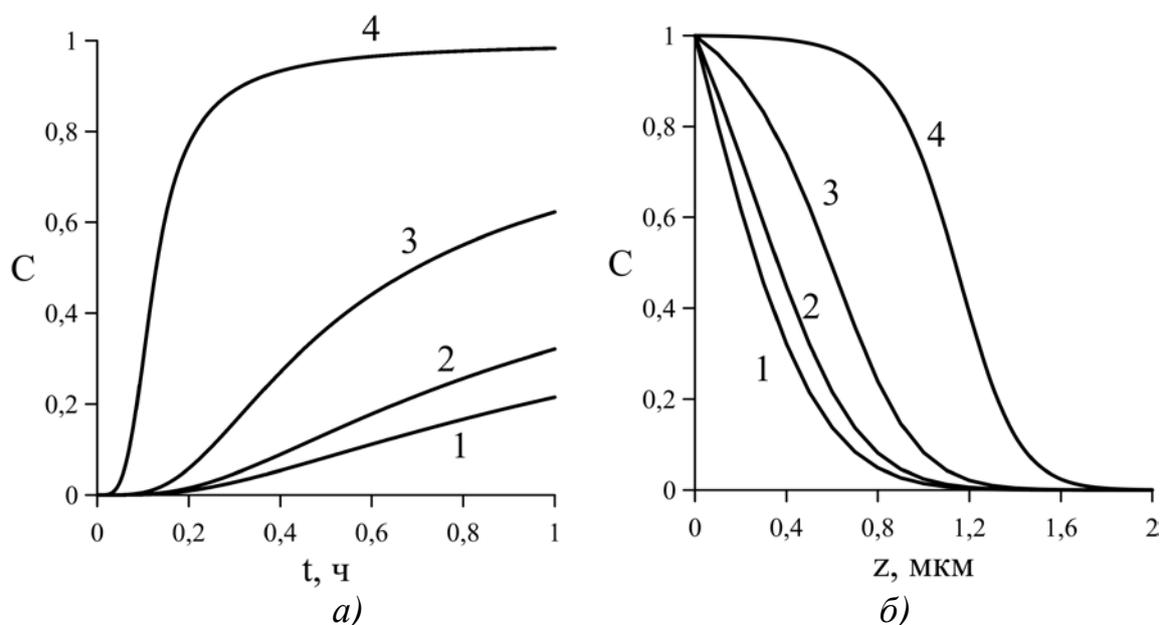


Рис. 3. Концентрация протонов внутри кристалла LiNbO_3 при $D_{\text{H}}=0.081 \text{ мкм}^2/\text{ч}$. $\alpha=0, 0.5, 0.9, 0.999$ (кривые 1 – 4, соответственно). (а) Зависимость концентрации при $z=0.5 \text{ мкм}$ от времени. (б) Профили концентрации при $t=1 \text{ ч}$.

Выводы

С помощью результатов численного моделирования были получены графики зависимости концентрации протонов от координат (при $t=1 \text{ ч}$) и времени (при $z=0.5 \text{ мкм}$). Как можно заметить, скорость протонирования кристалла зависит от коэффициентов самодиффузии ионов водорода (D_{H^+}) и лития (D_{Li^+}). При равенстве коэффициентов ($D_{\text{H}^+} = D_{\text{Li}^+}$) $\alpha = 0$ и модель задачи становится линейной (2).

Скорость протонного обмена заметно растет при $\alpha \rightarrow 1$, то есть $D_{\text{Li}^+} \gg D_{\text{H}^+}$ и $D_{\text{H}^+} / D_{\text{Li}^+} \rightarrow 0$. В линейной модели замещение ионов лития протонами протекает медленнее всего.

Сопоставление профилей концентрации протонов при разных значениях α показывает, что за одно и то же время протонного обмена, можно получить разные профили показателя преломления. Вероятно, условия про-

тонного обмена, при которых $\alpha \rightarrow 1$, приводят к созданию ступенчатого волновода. А при $\alpha < 1$ создается градиентный волновод.

Наиболее актуальной задачей в дальнейшем является сравнение результатов теоретического моделирования с экспериментом. Подставив значения коэффициентов D_{H^+} и D_{Li^+} , характерных для конкретного эксперимента, мы получим профили концентрации, которые можно сопоставить с профилями показателя преломления. Однако стоит отметить, что наша модель не учитывает существенную анизотропию диффузионных свойств кристалла, обусловленную особенностями его структуры. Известно, что приповерхностный слой (толщиной 15–20 мкм) отполированного кристалла может значительно отличаться от остального объема. Предполагается, что в этом слое повышено содержание дефектов, а именно существует более плотная сетка дислокаций [1]. При этом дислокации меняют кинетику ионов: ион продвигается намного быстрее вдоль линии дислокации, чем внутри решетки. Диффузия протонов в кристалле с сеткой дислокаций является предметом нашего дальнейшего исследования.

Список литературы

1. Пономарев Р. С. Структурная модель дрейфовых явлений в интегрально-оптических схемах на основе $H_xLi_{1-x}NbO_3$ канальных волноводов: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07. Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, 2014. 149 с.
2. Jackel J. L., Rice C. E., Veselka J. J. Proton exchange for high-index waveguides in $LiNbO_3$ // Applied Physics Letters. 1982. Vol. 41(7). P. 607–608.
3. Vohra S. T., Mickelson A. R., Asher S. E. Diffusion characteristics and waveguiding properties of proton-exchanged and annealed $LiNbO_3$ channel waveguides // Journal of Applied Physics. 1989. Vol. 66(11). P. 5161–5174.
4. Полянин А. Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики. М.: Наука, 2001. 575 с.

МАГНИТОРЕЗОНАНСНЫЙ ОТКЛИК КРИСТАЛЛОВ С КОСВЕННЫМ ОБМЕННЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Я. Ю. Струнина, К. Б. Циберкин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Изучено поведение пары ядерных магнитных моментов со спином $1/2$ во внешнем магнитном поле при наличии между ними двух типов взаимодействия: дипольного и косвенного обменного. Выполнено сравнение спектров поглощения ядерного магнитного резонанса, полученных в классическом и квантовом описании.

Ключевые слова: ЯМР; косвенное обменное взаимодействие; магнитные моменты

MAGNETORESONANCE RESPONSE OF CRYSTALS WITH AN INDIRECT EXCHANGE INTERACTION

Y. Y. Strunina, K. B. Tsiberkin

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The behavior of pair of magnetic moments with $1/2$ -spin in an external magnetic field is considered in the presence of dipole and indirect exchange interaction. The absorption spectra of nuclear magnetic resonance obtained in the classical and quantum descriptions are compared.

Keywords: NMR; indirect exchange interaction; magnetic moments

1. Введение

Метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР), разработанный в середине XX века, широко используется для изучения свойств различных веществ. Он основан на поглощении энергии электромагнитного поля помещенным в него веществом, содержащим ядра с ненулевым механическим и магнитным моментом. На каждый отдельный магнитный момент в веществе воздействует не только внешнее поле, но и локальные поля соседних атомов. Эффективные поля, действующие на ядерные магнитные моменты, зависят от структуры и свойств вещества, и по спектру ЯМР можно получить подробную информацию о его строении [1, 2].

В данной работе рассматривается динамика двух примесных атомов с ненулевым спином, адсорбированных на поверхности графена. Они взаимодействуют посредством дипольных полей и косвенного обменного взаимодействия [3]. Основной целью работы является сопоставление резонансных спектров, вычисленных в квантовом и классическом подходах, а также анализ влияния интенсивности дипольного и обменного взаимодействий на спектры.

2. Классическое описание поведения магнитных моментов во внешнем магнитном поле

Рассмотрим два примесных атома на поверхности графена, помещенного во внешнее постоянное магнитное поле, которые находятся на расстоянии r друг от друга. В классическом подходе движение магнитных моментов с высокой точностью описывается уравнением Блоха (1):

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}}{dt} = g\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}. \quad (1)$$

где g – гиромагнитное отношение; полное поле \mathbf{B} , действующее на момент $\boldsymbol{\mu}_i$, равно сумме внешнего магнитного поля \mathbf{B}_0 , дипольного поля \mathbf{B}_j , создаваемого соседним магнитным моментом и эффективного поля $\mathbf{B}_{ex,i}$, связанного с косвенным обменным взаимодействием:

$$\mathbf{B}_j^\alpha = -D_{ij}^{\alpha\beta} \mu_j^\beta, \quad D_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{r_{ij}^3} - \frac{3r_{12}^\alpha r_{12}^\beta}{r_{ij}^5}, \quad \mathbf{B}_{ex,i}^\alpha = J \mu_j^\alpha, \quad (2)$$

индексы i, j нумеруют магнитные моменты, а индексы α, β – их компоненты. Параметр косвенного обменного взаимодействия J определяется уровнем корреляций между магнитными моментами и электронами проводимости. По данным численного моделирования и экспериментов, его характерное значение не превышает 10^{-3} эВ. Особенностью такого взаимодействия является его знакопеременный характер и убывание с расстоянием по закону $1/r^3$, в отличие от прямого обменного взаимодействия [3]. В настоящей работе для J принято фиксированное положительное значение. Типичная интенсивность диполь-дипольного взаимодействия не превосходит 10^{-5} эВ [1, 2].

Предполагается, что оба магнитных момента равны по модулю μ , поэтому удобно для их описания ввести единичные векторы \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 , сонаправленные с векторами моментов. Исследуются три различные ориентации пары магнитных моментов относительно внешнего поля.

1. Внешнее поле параллельно радиус-вектору между магнитными моментами. Система уравнений Блоха для проекций векторов \mathbf{e}_i :

$$\begin{cases} \frac{de_x^i}{d\tau} = e_y^i - p_d(2e_y^i e_z^j + e_z^i e_y^j) + \lambda(e_y^i e_z^j - e_z^i e_y^j), \\ \frac{de_y^i}{d\tau} = -e_x^i + p_d(e_z^i e_x^j + 2e_x^i e_z^j) + \lambda(e_z^i e_x^j - e_x^i e_z^j), \\ \frac{de_z^i}{d\tau} = p_d(e_x^i e_y^j - e_y^i e_x^j) + \lambda(e_x^i e_y^j - e_y^i e_x^j), \end{cases} \quad (3)$$

где введены безразмерные параметры: $p_d = \mu / B_0 r^3$ для диполь-дипольного взаимодействия и $\lambda = \mu J / B_0$ для косвенного обменного взаимодействия, и

безразмерное время $\tau = gB_0t$, а номера магнитных моментов принимают значения $i = 1, j = 2$ и $i = 2, j = 1$.

Численное решение полученной системы дифференциальных уравнений проводится методом *lsode* [4], анализируются Фурье-спектры временных зависимостей компонент магнитных моментов. Проиллюстрировано влияние интенсивности диполь-дипольного взаимодействия на спектры при фиксированной величине косвенного обменного взаимодействия. При усилении взаимодействия происходит увеличение расщепления спектральных линий (рис. 1).

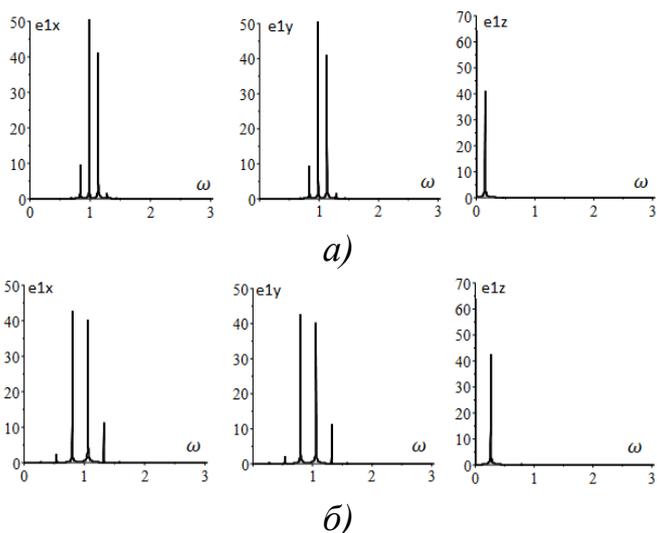


Рис. 1. Спектры проекций магнитных моментов в параллельном поле при $\lambda = 0.1$ и а) $p_d = 0.01$, б) $p_d = 0.1$

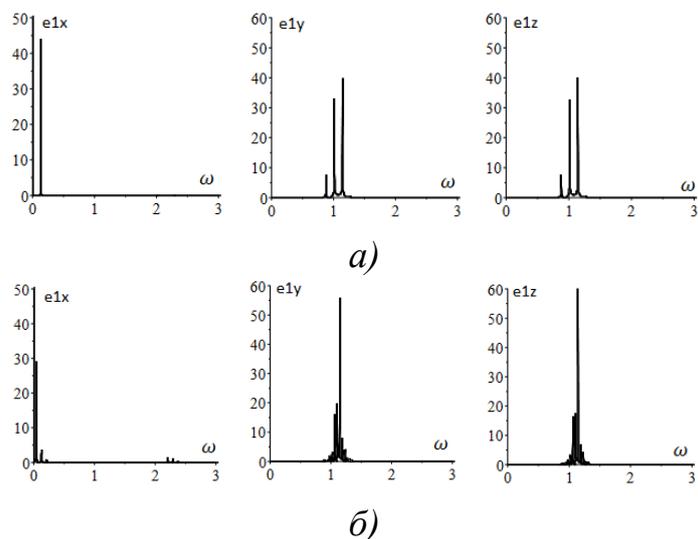


Рис. 2. Спектры проекций магнитных моментов в перпендикулярном поле при $\lambda = 0.1$ и а) $p_d = 0.01$, б) $p_d = 0.08$

2. Внешнее магнитное поле направлено перпендикулярно радиус-вектору между магнитными моментами. Система уравнений для проекций магнитных моментов принимает вид:

$$\begin{cases} \frac{de_x^i}{d\tau} = -p_d(2e_y^i e_z^j + e_z^i e_y^j) + \lambda(e_y^i e_z^j - e_z^i e_y^j), \\ \frac{de_y^i}{d\tau} = e_z^i + p_d(e_z^i e_x^j + 2e_x^i e_z^j) + \lambda(e_z^i e_x^j - e_x^i e_z^j), \\ \frac{de_z^i}{d\tau} = -e_y^i + p_d(e_x^i e_y^j - e_y^i e_x^j) + \lambda(e_x^i e_y^j - e_y^i e_x^j), \end{cases} \quad (4)$$

Фурье-спектры компонент магнитных моментов при постоянном обменном взаимодействии и различном дипольном показаны на рис. 2.

3. Внешнее магнитное поле направлено под углом $\arccos(1/\sqrt{3}) \approx 54.7^\circ$ к радиус-вектору между магнитными моментами. При такой ориентации магнитного поля существенная часть дипольного взаимодействия «отключается», что сильно влияет на динамику магнитных моментов и структуру спектров [1, 2].

Система безразмерных уравнений для проекций магнитных моментов в этом случае становится следующей:

$$\begin{cases} \frac{de_x^i}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{3}}e_y^i - p_d(2e_y^i e_z^j + e_z^i e_y^j) + \lambda(e_y^i e_z^j - e_z^i e_y^j), \\ \frac{de_y^i}{d\tau} = \sqrt{\frac{2}{3}}e_z^i - \frac{1}{\sqrt{3}}e_x^i + p_d(e_z^i e_x^j + 2e_x^i e_z^j) + \lambda(e_z^i e_x^j - e_x^i e_z^j), \\ \frac{de_z^i}{d\tau} = -\sqrt{\frac{2}{3}}e_y^i + p_d(e_x^i e_y^j - e_y^i e_x^j) + \lambda(e_x^i e_y^j - e_y^i e_x^j). \end{cases} \quad (5)$$

В этом случае усиление диполь-дипольного взаимодействия очень слабо влияет на спектры магнитных моментов (рис. 3).

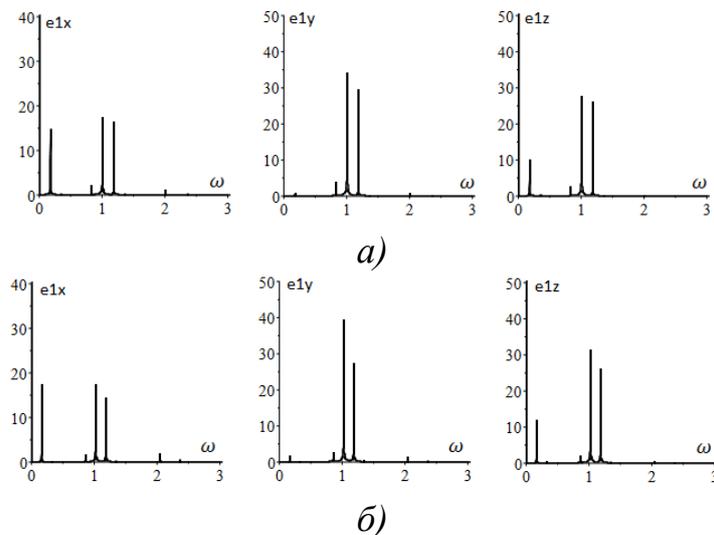


Рис. 3. Спектры проекций магнитных моментов в поле под углом 54.7° при $\lambda = 0.1$ и а) $p_d = 0.05$, б) $p_d = 0.1$

3. Квантовое описание задачи о двух ядерных магнитных моментах во внешнем магнитном поле

Выполним анализ структуры энергетических уровней и возможных частот в спектрах поглощения системы двух взаимодействующих спинов на основе квантово-механического подхода.

Пусть два неподвижных спина величиной $1/2$ находятся в постоянном магнитном поле с индукцией H_0 . Гамильтониан такой системы включает три компоненты [1]. Операторы спина, зеемановской энергии и обменного взаимодействия выглядят следующим образом:

$$S_1^\alpha = \sigma_\alpha \otimes I, \quad S_2^\alpha = I \otimes \sigma_\alpha, \quad (6)$$

$$H^{(0)} + H^{(ex)} = -gB_0 \frac{\hbar}{2} (S_1^z + S_2^z) + J \frac{\hbar^2}{4} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2,$$

где I – единичная матрица 2×2 , σ_α – матрицы Паули, знак \otimes обозначает тензорное произведение Кронекера. Компоненты гамильтониана являются матрицами размерности 4×4 .

Гамильтониан дипольного взаимодействия двух спинов в сферической системе координат, полярная ось которой задана внешним полем [2]:

$$H^{(dd)} = \frac{\hbar^2 g^2}{r^3} (A + B + C + D + E + F),$$

$$A = (1 - 3 \cos^2 \theta) S_1^z S_2^z, \quad B = -\frac{1}{4} (1 - 3 \cos^2 \theta) (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+), \quad (7)$$

$$C = -\frac{3}{2} (S_1^+ S_2^z + S_1^z S_2^+) \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}, \quad D = -\frac{3}{2} (S_1^- S_2^z + S_1^z S_2^-) \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi},$$

$$E = -\frac{3}{4} S_1^+ S_2^+ \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}, \quad F = -\frac{3}{4} S_1^- S_2^- \sin^2 \theta e^{2i\varphi},$$

θ – угол между направлениями внешнего магнитного поля и спинами, φ – азимутальный угол, который для пары спинов можно положить равным 0, произведения компонент операторов спина S_1 и S_2 в (7) даются обычным матричным умножением. Рассмотрены те же три случая направления внешнего поля, как и при классическом описании системы.

1. $\theta = 0$. В этом случае уровни энергии и возможные частоты переходов между ними равны

$$E_n = \left\{ 1 + \frac{\lambda}{4} - p_d, \frac{\lambda}{4} + 2p_d, -\frac{3\lambda}{4}, -1 + \frac{\lambda}{4} - p_d \right\},$$

$$\omega = \{ \lambda + 2p_d, 1 - 3p_d, 1 + 3p_d, 1 + \lambda - p_d, 1 - \lambda + p_d, 2 \}.$$

За переходы вблизи частот 0 и 2 отвечают слагаемые C , D , E и F в (7), которые не коммутируют с зеемановским гамильтонианом (6). При $\theta = 0$ эти слагаемые исчезают, и переходы вблизи частот 0 и 2 запрещены [2]. Классическое описание дает ряд пиков вокруг $\omega = 0$ и $\omega = 1$.

2. $\theta = \pi/2$:

$$E_n = \left\{ 1 + \frac{\lambda}{4} + \frac{p_d}{2}, \frac{\lambda}{4} - p_d, -\frac{3\lambda}{4}, -1 + \frac{\lambda}{4} + \frac{p_d}{2} \right\},$$

$$\omega = \left\{ \lambda - p_d, 1 - \frac{3}{2}p_d, 1 + \frac{3}{2}p_d, 1 + \lambda + \frac{p_d}{2}, 1 - \lambda - \frac{p_d}{2}, 2 \right\}.$$

Здесь слагаемые E и F в (7) не равны нулю, и перемешивание состояний приводит к появлению переходов с частотами 0 и 2, запрещенными для чистых состояний; их вероятность $\sim p_d^2$. В классических спектрах имеются линии вблизи частот 0, 1 и слабые пики около 2.

3. $\theta \approx 54.7^\circ$:

$$E_n = \left\{ 1 + \frac{\lambda}{4} - p_d, \frac{\lambda}{4}, -\frac{3\lambda}{4}, -1 + \frac{\lambda}{4} - p_d \right\},$$

$$\omega = \{ \lambda, 1 - p_d, 1 + p_d, 1 + \lambda - p_d, 1 - \lambda + p_d, 2 \}.$$

Как и в предыдущем случае, некоммутирующие с зеемановским гамильтонианом слагаемые в дипольном взаимодействии допускают переходы с частотами 0 и 2, что реализуется и в классическом подходе.

4. Заключение

Добавление локальных полей, создаваемых взаимодействием магнитных моментов, к внешнему полю приводит к появлению дополнительных частот в спектре ядерного магнитного резонанса. Квантовый подход дает одиночные уровни энергии и соответствующие им частоты. В классическом подходе энергии непрерывны, поэтому линий в спектре получается больше, и отдельные линии, возникающие в классическом подходе, отсутствуют при квантовомеханическом описании. Однако в обоих подходах линии спектра сосредоточены вблизи частот 0, 1 и 2. Классический подход позволяет более наглядно отобразить влияние взаимного расположения внешнего поля и магнитных моментов на спектр диполь-дипольного взаимодействия.

Список литературы

1. *Абрагам А.* Ядерный магнетизм. М.: Издательство иностранной литературы, 1963. 551 с.
2. *Сликтер Ч.* Основы теории магнитного резонанса. М.: Мир, 1981. 448 с.
3. *Rudenko A. N., Keil F. J., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I.* Exchange interactions and frustrated magnetism in single-side hydrogenated and fluorinated graphene // *Physical Review B.* 2013. Vol. 88. 081405(R).
4. *Radhakrishnan K., Hindmarsh A. C.* Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations // Cleveland: NASA, 1993. 108 p.

СТАБИЛИЗАЦИЯ ПРЯМОГО ЧИСЛЕННОГО СЧЕТА ПРИ КОНЕЧНОМ ОБРЫВАНИИ РАЗЛОЖЕНИЙ ПО КРУГОВЫМ КУМУЛЯНТАМ

И. В. Тюлькина^{a,b}, Д. С. Голдобин^{a,b}, А. Пиковский^c

^aПермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

^bИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, Королева, 1

^cУниверситет Потсдама, 14476, Германия, Гольм, Карл–Либкнехт, 24/25

В данной работе изучается численная неустойчивость прямого счета при обрывании цепочки уравнений для «круговых кумулянтах». Также рассматривается подход к ее подавлению. Подход проверен на примере ансамблей иерархически связанных осцилляторов, в которых может возникать состояние химеры. Метод стабилизации может быть эффективно применен без значительного влияния на настоящую динамику системы в конечной окрестности многообразия Отта–Антонсена для прямого численного счета с не более чем 20 кумулянтами; с увеличением их количества стабилизация становится более проблематичной.

Ключевые слова: круговые кумулянты; многообразие Отта–Антонсена; численная неустойчивость

STABILIZATION OF DIRECT NUMERICAL SIMULATION FOR FINITE TRUNCATIONS OF CIRCULAR CUMULANT EXPANSIONS

I. V. Tyulkina^{a,b}, D. S. Goldobin^{a,b}, A. Pikovsky^c

^aPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

^bInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Korolyov St. 1, 614013, Perm

^cUniversity of Potsdam, Karl-Liebkecht Str. 24/25, 14476 Golm, Germany

In this paper we study a numerical instability of direct simulations with truncated equation chains in the “circular cumulant” representation. We also consider an approach to its suppression. The approach is tested with populations of hierarchically coupled oscillators, where a chimera state occurs. The stabilization technique can be efficiently applied without significant effect on the natural system dynamics within a finite vicinity of the Ott–Antonsen manifold for direct numerical simulations with up to 20 cumulants; with an increase in their number, stabilization becomes more problematic.

Keywords: circular cumulants; Ott–Antonsen manifold; numerical instability

При исследованиях общих закономерностей сложного поведения нелинейных систем особое внимание привлекают коллективные явления в ансамблях связанных элементов. Например, случаи популяций автоколебательных систем со слабой взаимной связью. Динамика таких популяций представляет интерес для многих приложений в физике, химии и биологии [1–4]. Для описания коллективных явлений в популяциях часто применима

модель Курамото [5], принадлежащая к специфическому типу систем — системам Отта–Антонсена [6]:

$$\varphi_k = \omega(t) + \text{Im}(2h(t)e^{-i\varphi_k}), \quad k = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где $\omega(t)$ и $h(t)$ — произвольные действительная и комплексная функции времени. Теория справедлива в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$. Отт и Антонсен заметили, что уравнения такого вида допускают весьма простое решение [6]. Однако это решение не применимо к случаю, когда в систему вводится внутренний шум. Для данной ситуации к уравнению (1) нужно добавить ещё одно слагаемое:

$$\varphi_k = \omega(t) + \text{Im}(2h(t)e^{-i\varphi_k}) + \sigma \xi_k(t), \quad k = 1, \dots, N,$$

где ξ_k — независимые белые гауссовы шумы: $\langle \xi_k(t) \xi_m(t') \rangle = 2\delta_{km} \delta(t-t')$, $\langle \xi_k(t) \rangle = 0$. Для систем такого типа был предложен формализм «круговых кумулянтов» и показаны его преимущества [7].

В данной работе будет описан подход к подавлению численной неустойчивости при обрывании цепочки уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{a}}_n = n(i\Omega - \gamma)\mathbf{a}_n + h\delta_{1n} - nh^*(n\mathbf{a}_{n+1} + \sum_{m=1}^{\infty} \mathbf{a}_{n-m+1}\mathbf{a}_m) - \\ - \sigma^2(n^2\mathbf{a}_n + n\sum_{m=0}^{n-2} \mathbf{a}_{n-1-m}\mathbf{a}_{m+1}). \end{aligned} \quad (2)$$

Введем в исходные уравнения дополнительное слагаемое, которое могло бы позволить стабилизировать численный счет без существенного искажения решений:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{a}}_n = n(i\Omega - \gamma)\mathbf{a}_n + h\delta_{1n} - nh^*(n\mathbf{a}_{n+1} + \sum_{m=1}^{\infty} \mathbf{a}_{n-m+1}\mathbf{a}_m) - \\ - \sigma^2(n^2\mathbf{a}_n + n\sum_{m=0}^{n-2} \mathbf{a}_{n-1-m}\mathbf{a}_{m+1}) - G(\gamma + \sigma^2)(n-1)(n-2)2^n \mathbf{a}_n. \end{aligned} \quad (3)$$

Вид стабилизирующего слагаемого выбран из следующих соображений:

- G -слагаемое вносит в систему диссипацию, которой в исходной системе нет при $\sigma = \gamma = 0$. Для того чтобы стабилизирующее слагаемое не вызвало качественных изменений динамики, оно уменьшается по мере уменьшения σ и γ .
- Поскольку стабилизирующее слагаемое должно быть существенно именно для старших кумулянтов, т.е. расти с n существенно быстрее, чем $\sigma^2 n^2 \mathbf{a}_n$ -слагаемое, выбран вид $\sim n^2 s^n \mathbf{a}_n$. Так как счет с одним первым или первыми двумя кумулянтами всегда устойчив, целесообразно заменить n^2 -множитель на $(n-1)(n-2)$. Анализ показал, что оптимальным является выбор $s=2$.

Рассмотрим в качестве примера динамику двух симметричных связанных ансамблей осцилляторов [8]:

$$\begin{aligned}\dot{\varphi}_k &= \omega_k + \frac{\mu}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\varphi_j - \varphi_k - \alpha) + \frac{\nu}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\psi_j - \varphi_k - \alpha) + \sigma \xi_k(t), \\ \dot{\psi}_k &= \omega_k + \frac{\mu}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\psi_j - \psi_k - \alpha) + \frac{\nu}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\varphi_j - \psi_k - \alpha) + \sigma \zeta_k(t).\end{aligned}\quad (4)$$

Здесь φ и ψ — фазы осцилляторов в ансамблях размера N , μ и $\nu = 1 - \mu$ — параметры связи внутри ансамбля и с другим ансамблем соответственно, α — фазовый сдвиг связи.

В [9] был получен частный случай — двухгрупповое решение. В данном решении все нечетные кумулянты, кроме первого, обращаются в ноль, а все четные выражаются через второй, поэтому при численном счете неустойчивость не возникает. Этот случай позволяет проверить, насколько сильно влияет введение искусственной диссипации на систему.

Для каждого из этих ансамблей можно записать цепочку уравнений (3) с κ_n для $\{\varphi_k\}$ и \mathfrak{a}_n для $\{\psi_k\}$:

$$\begin{aligned}\dot{\mathfrak{a}}_n &= n(i\Omega - \gamma)\mathfrak{a}_n + h\delta_{1n} - nh^*(n\mathfrak{a}_{n+1} + \sum_{m=1}^{\infty} \mathfrak{a}_{n-m+1}\mathfrak{a}_m) - \\ &\quad - \sigma^2(n^2\mathfrak{a}_n + n\sum_{m=0}^{n-2} \mathfrak{a}_{n-1-m}\mathfrak{a}_{m+1}) - G(\gamma + \sigma^2)(n-1)(n-2)2^n \mathfrak{a}_n, \\ \dot{\kappa}_n &= n(i\Omega - \gamma)\kappa_n + h\delta_{1n} - nh^*(n\kappa_{n+1} + \sum_{m=1}^{\infty} \kappa_{n-m+1}\kappa_m) - \\ &\quad - \sigma^2(n^2\kappa_n + n\sum_{m=0}^{n-2} \kappa_{n-1-m}\kappa_{m+1}) - G(\gamma + \sigma^2)(n-1)(n-2)2^n \kappa_n.\end{aligned}$$

Состояние первой подсистемы является одногрупповым, а второй — двухгрупповым. Доли осцилляторов в группах q_1 и q_2 одинаковы: $q_1 = q_2 = 0.5$. Траектория системы представлена на рис. 1.

Начальное состояние второго ансамбля задаем суммой распределений Отта–Антонсена, но с разным значением комплексного параметра порядка:

$$\mathfrak{a}_1 = (R \pm \delta R)e^{i(\phi \pm \delta\phi)},$$

где $|R \pm \delta R|$ — абсолютное значение параметра порядка для соответствующей группы, а $|\phi \pm \delta\phi|$ — центральная фаза для соответствующей группы.

Коэффициент G выбирается на основе результатов численного расчета, представленных на рис. 2. На графике построены кривые критического значения G , выше которых численный счет устойчив. Выбор значений G , умеренно превышающих критическое значение, позволяет получить более точную траекторию системы. Для численного счета, результаты которого представлены на рисунках 1 и 4, выбрано $G = 0.01$, $\mathfrak{a}_1 = (0.8 \pm 0.1)e^{i(0.3 \pm 0.15)}$.

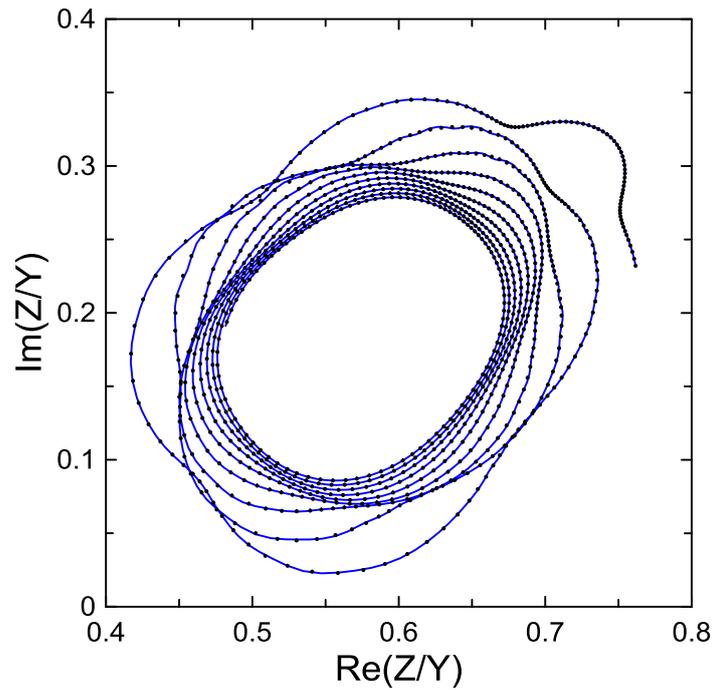


Рис. 1. Траектория системы при $\mu = 0.65$, $\alpha = \pi / 2 - 0.15$, $\gamma = 0.001$. Символы: результат точного интегрирования; кривая: результат численного интегрирования уравнений (4). Используется 15 первых кумулянтов

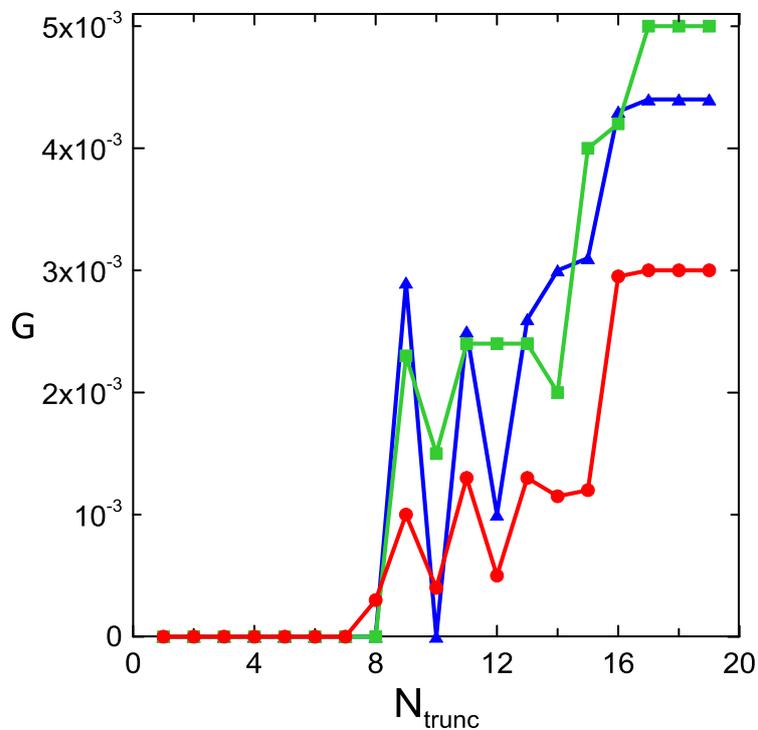


Рис. 2. Зависимость критического значения коэффициента G от количества кумулянтов N_{trunc} при $\gamma = 0.001$. Синие треугольники: $\sigma = 0$, $q_1 = q_2 = 0.5$; красные круги: $\sigma = 0.01$, $q_1 = q_2 = 0.5$; зеленые квадраты: $\sigma = 0$, $q_1 = 0.4$, $q_2 = 0.6$

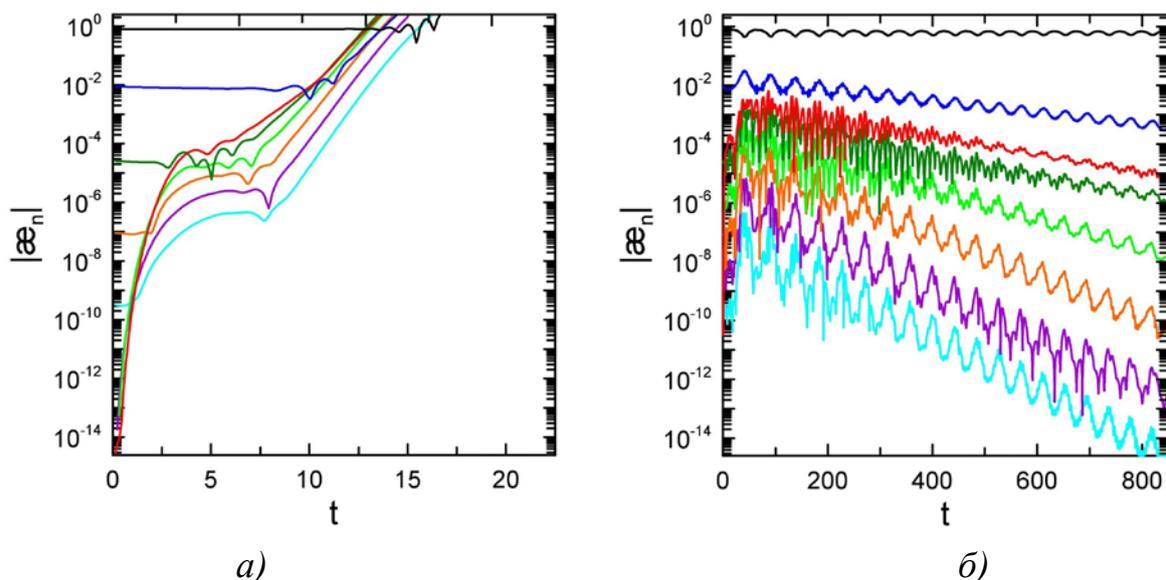


Рис. 3. Зависимости кумулянтов ε_n от времени t (сверху вниз по порядку от ε_1 до ε_8): а) G выбирается ниже границы устойчивости метода (рис. 2); б) G выбирается выше границы устойчивости метода

На рис. 3 представлены зависимости кумулянтов ε_n от времени t для подкритических и надкритических значений параметра G . Когда G выбирается ниже границы, решение теряет регулярность и расходится за конечное время. Выше границы формируется регулярное решение, быстрые флуктуации кумулянтов со временем затухают. Можно видеть формирование иерархии малости кумулянтов, предсказанной теоретически в [7].

Рассмотрим случай с шумом $\sigma = 0.01$. Во второй подсистеме осцилляторы так же равномерно распределены между двумя группами, т.е. $q_1 = q_2 = 0.5$. Критическое значение коэффициента G для случая с шумом (красные круги на рис. 2) находится ниже, чем для случая без шума (синие треугольники). На рис. 4а приведены примеры траекторий системы. Можно заметить, что траектория при пограничном значении G хоть и существенно возмущена флуктуациями, со временем не расходится с траекторией, рассчитанной при больших значениях G , когда вычислительные флуктуации подавлены.

Рассмотрим случай, когда $\sigma = 0$ и во второй подсистеме осцилляторы неравномерно распределены между двумя группами, т.е. $q_1 = 0.4$, $q_2 = 0.6$. Из рис. 2 можно заметить, характерные критические значения G для симметричных и асимметричных распределений между двумя группами близки. Система с шумом требует меньших значений коэффициента G , т.к. шум оказывает стабилизирующее действие.

Из приведенного графика границы устойчивости численного счета можно сделать вывод, что при используемых начальных условиях стабилизирующее слагаемое не требуется, если для численного счета использовать менее 8 кумулянтов. Если использовать для счета большее число кумулянтов, то требуется вводить стабилизирующее слагаемое.

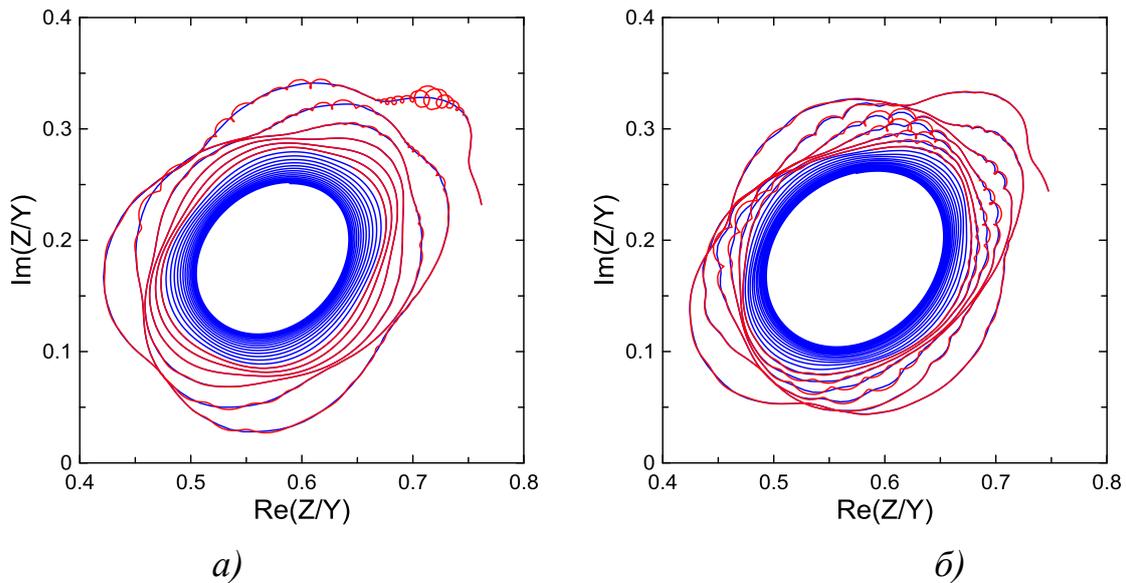


Рис. 4. Траектория системы для разных значений G . Синяя кривая: $G=0.01$; для красной кривой G выбирается на границе устойчивости. Используется 15 кумулянтов. а) $\sigma=0.01$, $q_1=q_2=0.5$; б) $\sigma=0$, $q_1=0.4$, $q_2=0.6$

В работе рассмотрен подход к подавлению численной неустойчивости прямого счета при обрывании цепочек уравнений динамики круговых кумулянтов (2). Вводился дополнительный диссипативный член для кумулянтов высокого порядка (см. уравнение (3)). Были рассмотрены три случая разных начальных условий для системы иерархически связанных ансамблей (4). Стабилизация может быть достигнута без существенного влияния на настоящую динамику системы при счете не более чем с 20 кумулянтами. Стабилизация эффективно работает в небольшой, но конечной окрестности многообразия Отта–Антонсена.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 19-42-04120.

Список литературы

1. Голдобин Д. С., Тюлькина И. В., Клименко Л. С., Пиковский А. К описанию коллективной динамики в ансамблях реальных осцилляторов // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2018. Вып. 3(41). С. 5–7.
2. Pikoſky A. Robust synchronization of spin-torque oscillators with an LCR load // Physical Review E. 2013. Vol. 88. 032812.
3. Kawamura Y., Nakaо H. Collective phase description of oscillatory convection // Chaos. 2013. Vol. 23. 043129.
4. Turtle J., Buono P. L., Palacios A., Dabrowski C., In V., Longhini P. Synchronization of spin torque nano-oscillators // Physical Review B. 2017. Vol. 95. 144412.
5. Kuramoto Y. International Symposium on Mathematical Problems in Theoretical Physics / Lecture Notes in Physics / ed. H. Araki. New York: Springer, 1975. Vol. 39. P. 420–422.

6. *Ott E., Antonsen T. M.* Low dimensional behavior of large systems of globally coupled oscillators // *Chaos*. 2008. Vol. 18. 037113.
7. *Tyulkina I. V., Goldobin D. S., Klimenko L. S., Pikovsky A.* Dynamics of Noisy Oscillator Populations beyond the Ott–Antonsen Ansatz // *Physical Review Letters*. 2018. Vol. 120. 264101.
8. *Abrams D. M., Mirollo R., Strogatz S. H., Wiley D. A.* Solvable Model for Chimera States of Coupled Oscillators // *Physical Review Letters*. 2008. Vol. 101. 084103.
9. *Тюлькина И. В., Голдобин Д. С., Клименко Л. С., Пиковский А.* Двухгрупповые решения для динамики ансамблей фазовых систем типа Отта–Антонсена // *Известия Вузов. Радиофизика*. 2018. Т. 61. №8–9. С. 718–728.

ПЕРЕХОД К СУБДИФФУЗИОННОМУ ТРАНСПОРТУ В СЛОЖНЫХ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТОКАХ

М. Р. Хабин^a, Б. С. Марышев^{a,b}

^aПермский государственный национальный исследовательский университет
614990, Пермь, ул. Букирева, 15

^bИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, Королева, 1

Исследуются особенности транспорта примеси в сложном завихренном потоке. Разработан метод определения типа наблюдающегося транспортного процесса, основанный на оценке среднего времени прохождения частицами заданного расстояния в потоке. Показано и продемонстрировано полное соответствие ость разработанного метода классическому, основанному на оценке коэффициента диффузии. Рассмотрен транспорт примеси в вихревом потоке, заданным внешней вынуждающей силой. Получены критические значения параметров системы при которых происходит переход от нормального закона диффузии к субдиффузионному транспорту.

Ключевые слова: диффузия; транспортные процессы; вязкая жидкость

THE TRANSITION TO SUBDIFFUSIVE TRANSPORT INTO THE COMPLEX HYDRODYNAMIC FLOWS

M. R. Khabin^a, B. S. Maryshev^{a,b}

^aPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

^bInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Korolyov St. 1, 614013, Perm

The features of impurity transport in a complex flow are investigated. A method for determining the type of the observed transport has been developed. This method is based on an estimation of the average time for a particle travel to a given distance. The complete correspondence of the developed method to the classical, based on the estimation of the diffusivity is shown and demonstrated. The transport of impurities in a vortex flow given by an external driving force is considered. The critical values of the system parameters are obtained for which the type of transport process is changed from the normal diffusion to subdiffusion.

Key words: diffusion; transport; viscous liquid

Введение

Наличие потока, обладающего сложной пространственной структурой, влияет на транспорт примеси, который описывается тензором диффузии [1]:

$$D_{ij} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \left\langle (x_i(t) - \langle x_i \rangle(t)) (x_j(t) - \langle x_j \rangle(t)) \right\rangle, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

Если собственные значения тензора D_{ij} конечные величины, то процесс называется нормальной диффузией, если хоть одно из них обращается в ноль, то процесс называется субдиффузией, в случае, если обращается в бесконечность – супердиффузией. Согласно центральной предельной теореме в изотропном случае $D_{ij} = D\delta_{ij}$, где $D = \sigma^2 / 2T$. В этом случае $T = \sigma^2 / 2D$ является средним временем, за которое частица смещается на расстояние $\sigma \sim l$. В зависимости от значения T транспорт будет нормальный, если T конечно, супердиффузионный при $T \rightarrow 0$ и субдиффузионный при $T \rightarrow \infty$. Поскольку течение усложнено вихревыми потоками частицы задерживаются, из чего следует ожидать наличие субдиффузионного транспорта, т. е. $T = \int_0^{\infty} tw(t)dt \rightarrow \infty$, где $w(t)$ – распределение частиц по временам за которые они проходят расстояние $\sigma \sim l$.

Произведем оценку интеграла на верхнем пределе, предполагая $\lim_{t \rightarrow \infty} w(t) \sim t^{-\lambda}$, тогда:

$$\int t^{1-\lambda} dt = \frac{1}{1-\lambda} t^{2-\lambda} \Big|_{t \rightarrow \infty} \rightarrow \begin{cases} \infty, \lambda < 2 \\ 0, \lambda > 2 \end{cases},$$

в зависимости от λ имеем следующее оценки среднего времени $T \rightarrow \infty$ при $\lambda < 2$ и $T \rightarrow const$ при $\lambda > 2$. Введем замену $2 - \lambda = \gamma \Rightarrow T \sim t^\gamma$ тогда при $\gamma < 0$ наблюдается нормальная диффузия, $\gamma = 0$ точка, перехода к субдиффузии, при $\gamma > 0$ наблюдается субдиффузия.

Постановка задачи

На бесконечной плоскости рассматривается течение вязкой жидкости, обусловленное внешней силой $\vec{F} = (f \sin y, f \sin x)$, где f амплитуда силы, (x, y) – декартовы координаты, α, β средние значения потока жидкости в горизонтальном и вертикальном направлениях соответственно, P – давление, ν – кинетическая вязкость. Математическая формулировка описанной задачи может быть записана в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{V} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} = -\frac{\nabla P}{\rho_0} + \nu \nabla^2 \vec{V} + \vec{F}(\vec{x}, t),$$

$$\vec{F} = (f \sin y, f \sin x), \quad \text{div} \vec{V} = 0, \quad (1)$$

$$V_x|_{x,y=0} = V_x|_{x,y=2\pi}, \quad V_y|_{x,y=0} = V_y|_{x,y=2\pi},$$

где $\vec{V} = (V_x, V_y)$ вектор скорости потока. Решение задачи (1) может быть записано в форме:

$$\begin{aligned} V_x &= \alpha - \frac{f}{\sqrt{\beta^2 + v^2}} \cos\left(y + \arctg \frac{v}{\beta}\right), \\ V_y &= \beta + \frac{f}{\sqrt{\alpha^2 + v^2}} \cos\left(x + \arctg \frac{v}{\alpha}\right). \end{aligned} \quad (2)$$

Исходя из решения уравнения единственным характерным размером задачи, является период решения (2) т.е. $l = 2\pi$. При анализе решения (2) на наличие замкнутых траекторий в работе [2] показано, что при амплитудах внешней силы $f > f_{cr}$ существуют замкнутые траектории т.е. наблюдается вихревое течение жидкости

$$f_{cr} = \sqrt{\alpha^2 \beta^2 + v^2 \max(\alpha^2, \beta^2)}. \quad (3)$$

Исследуется зависимость времени T прохождения частицей характерного расстояния $l = 2\pi$ от количества частиц N при изменении параметров f, α, β, v , так чтобы наблюдался переход через критическое значение. Для этого построим семейство кривых $\gamma(\alpha, \beta, v, f)$.

Методология

Транспортный процесс исследуется путем оценки среднего времени прохождения частицами заданного расстояния l . Таким образом решая систему уравнений

$$\begin{aligned} x_i(t + \tau) &= x_i(t) + V(x_i, y_i)\tau, \\ y_i(t + \tau) &= y_i(t) + V(x_i, y_i)\tau. \end{aligned} \quad (4)$$

Рассчитывается траектория частиц методом молекулярной динамики, что позволяет оценить среднее время по формуле $T = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N t_i$, где t_i время прохождения частицей характерного расстояния, из условия $l = \sqrt{x_i^2(t_i) + y_i^2(t_i)}$.

Результаты

При переходе параметра f через критическое значение в потоке образуются вихри (рис. 1).

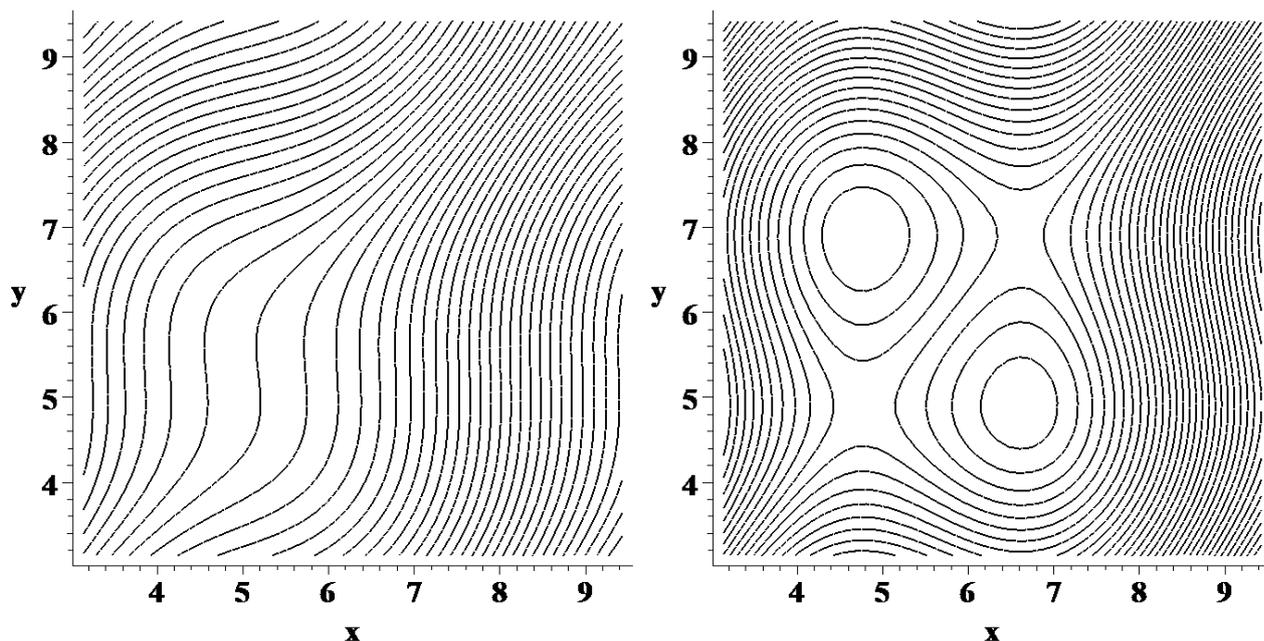


Рис. 1. Изолинии тока для параметров течения $\alpha=0,3$ $\beta=0,5$ $f=0,3$: слева при $\nu=0,8$ значение силы $f_{cr}=0,43$ справа при $\nu=0,2$ значение силы $f_{cr}=0,18$

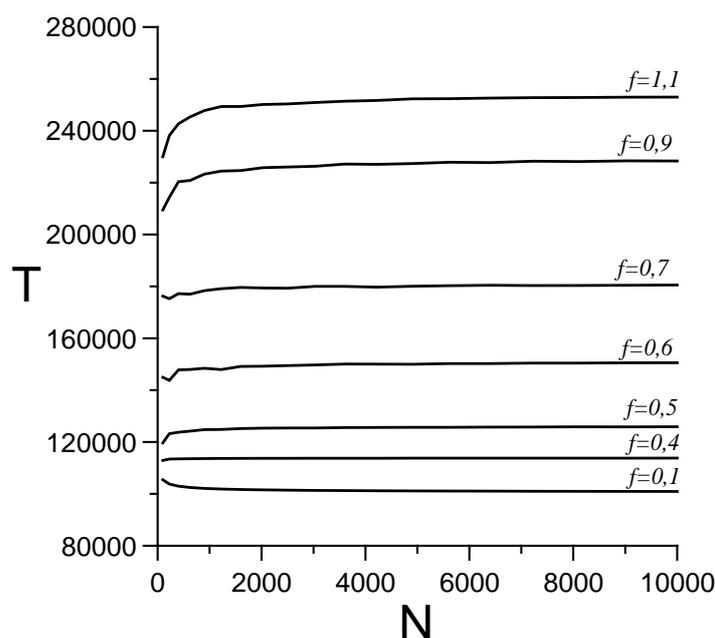


Рис.2. График зависимости числа частиц N от среднего времени T , $\alpha=0,8$; $\beta=0,3$; $\nu=0,5$; $f_{cr} \approx 0,47$

Поскольку вихрь «удерживает» частицы то при изменении параметра f наблюдаются следующие зависимости T от числа частиц погруженных в жидкость. При значениях параметра меньше критического характерное время с увеличением числа частиц уменьшается, вблизи критического значения слабо изменяется, при значениях больше критического характерное время растет (рис. 2).

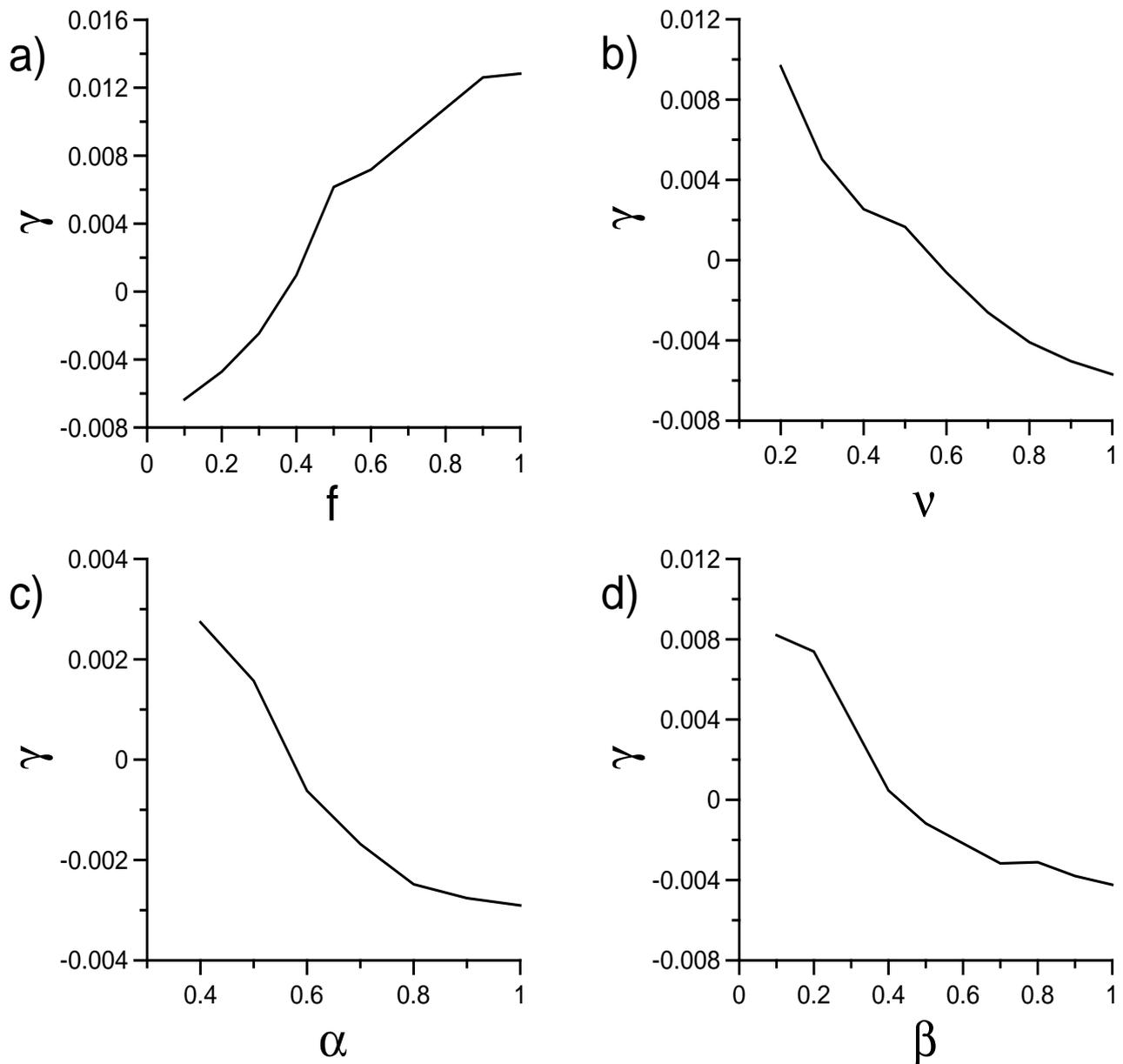


Рис. 3. а) зависимость γ от амплитуды силы (f) при $\alpha = 0,8; \beta = 0,3; \nu = 0,5$; б) зависимость γ от кинематической вязкости (ν) при $\alpha = 0,3; \beta = 0,5; f = 0,3$; в) зависимость γ от потока в горизонтальном направлении (α) при $\beta = 0,3; \nu = 0,5; f = 0,3$; д) зависимость γ от потока в вертикальном направлении (β) при $\alpha = 0,4; f = 0,3; \nu = 0,5$

Различные кривые (рис. 2) могут быть аппроксимированы степенной зависимостью $T \sim N^\chi$, при этом в предположении эргодичности системы $\chi = \gamma$. Таким образом, мы имеем критерий перехода к субдиффузионному транспорту.

Зависимости величины γ от параметров системы представлены на рис. 3. На рис. 3а показана зависимость γ от амплитуды внешней силы. Поскольку образование вихрей обусловлено увеличением вынуждающей

силы, чем больше её амплитуда, тем проще образовать вихревой поток в жидкости, в результате наблюдается переход от нормальной диффузии к субдиффузии. На рис. 3b показана зависимость γ от вязкости. При ее увеличении, увеличивается сопротивление и для образования вихря нужны большие значения внешней силы. В результате на графике наблюдается переход от субдиффузии к нормальному транспорту. На рис. 3c и 3d показана зависимость γ от α и β т.е. средних потоков жидкости в вертикальном и горизонтальном направлениях. С увеличением их интенсивности, образовавшиеся вихревые потоки сносит, восстанавливается однородное течение, что приводит к переходу от субдиффузии к нормальной диффузии.

Заключение

Исследован транспорт пассивной примеси в сложном потоке вязкой жидкости. Методами молекулярной динамики произведена оценка среднего времени смещения частиц на заданное расстояние. Исследована зависимость среднего времени от параметров течения. Показано, что при достижении параметрами некоторых критических значений транспорт примеси становится субдиффузионным. Такой эффект связан с возникновением вихревого течения в потоке вязкой жидкости. Построены карты существования различных режимов транспорта в пространстве параметров системы, оценены критические значения параметров.

Список литературы

1. Zaks M. A., Nepomnyashchy A. Subdiffusive and superdiffusive transport in plane steady viscous flows // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2018. 201717225.
2. Einstein A. Investigations on the Theory of the Brownian Movement // Annalen der Physik. 1905. Vol. 17. P. 549–560.

ИССЛЕДОВАНИЕ СЕДИМЕНТАЦИИ КОНЦЕНТРИРОВАННОЙ МАГНИТНОЙ ЖИДКОСТИ ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ

Е. Н. Буркова, А. Е. Фролова

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Работа посвящена исследованию седиментации дисперсных частиц концентрированной магнитной жидкости в пакете COMSOL Multiphysics. Выполнено сравнение актуальных уравнений магнитодиффузии во внешнем магнитном поле.

Ключевые слова: магнитофорез; диффузия частиц; межчастичные взаимодействия

STUDY OF SEDIMENTATION OF CONCENTRATED MAGNETIC FLUID IN EXTERNAL FIELDS

E. N. Burkova, A. E. Frolova

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The work is devoted to the study of the sedimentation of dispersed particles of a concentrated magnetic fluid in the COMSOL Multiphysics package. A comparison of two magnetodiffusion equations in an external magnetic field is performed.

Keywords: magnetophoresis; particle diffusion; interparticle interactions

Постановка задачи

Рассмотрим вытянутый цилиндр квадратного в плоскости $\{xz\}$ сечения размерами $a \times a$, заполненный изначально однородной концентрированной магнитной жидкостью. Границы полости непроницаемы для вещества. Температура неизменна $T = const$. Начало координат находится в центре полости (рис. 1). Полость помещается во внешние однородные гравитационное и магнитное поля, направленные вдоль оси z . В результате возникает магнитофорез (дрейф частиц в неоднородном магнитном поле) и седиментация (дрейф частиц под действием силы тяжести), а в последствии и диффузия дисперсных частиц. Это приводит к возникновению неоднородного распределения концентрации магнитной жидкости.

В настоящей работе в пакете COMSOL Multiphysics® численно исследуется влияние гравитационного и магнитного полей, сравниваются наиболее актуальные уравнения магнитодиффузии.

Математическая модель

Задача о перераспределении дисперсной фазы решается в двумерной постановке. Полость с магнитной жидкостью высотой a окружена сферическим воздушным слоем радиусом равным десяти размерам полости $10a$. На границе задается слой бесконечных элементов шириной $0.5a$ [1], обеспе-

чивающий затухание размагничивающего поля магнитной жидкости. Начало координат помещается в центр расчетной области.

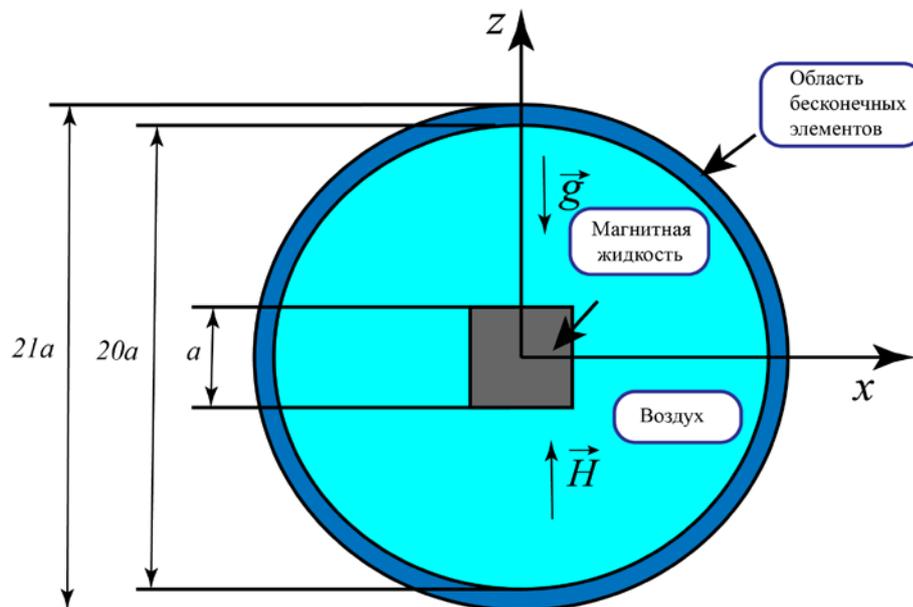


Рис. 1. Схематичное изображение расчетной области

Постоянное внешнее магнитное поле направлено по оси z , характеризуется безразмерным параметром Ланжевена $\xi_{0z} = \mu_0 m H / (k T)$ (m – магнитный момент коллоидной частицы, $\mu_0 = 4 \pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м, k – постоянная Больцмана, T – температура, H – напряженность магнитного поля) и задается через магнитный потенциал во всей расчетной области

$$u|_1 = -\xi_{0z} \cdot z.$$

Магнитное поле в магнитной жидкости рассчитывается по согласно уравнению Пуассона

$$\nabla(-\nabla u + \mathbf{M}) = 0, \quad (1)$$

и характеризуется параметром Ланжевена

$$\xi = -\nabla u.$$

На границе тел накладывается условие непрерывности нормальной компоненты магнитной индукции $\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M})$ и тангенциальных компонент напряженности. Намагниченность воздуха принималась за постоянную величину.

Намагниченность магнитной жидкости M , входящая в уравнение (1), вычисляется в рамках модифицированной модели эффективного поля второго порядка [2]. Используемая модель учитывает влияние межчастичных взаимодействий в концентрированной магнитной жидкости и справедлива в достаточно широком диапазоне параметров

$$M = 24\lambda\varphi L(\xi_e), \quad (2)$$

$$\xi_e = \xi + 8\lambda\varphi L(\xi), \quad (3)$$

где $L(\xi) = \text{cth}(\xi) - 1/\xi$ – функция Ланжевена, ξ_e – эффективное поле, действующее на частицу, $\lambda = \mu_0 m^2 / 4\pi d^3 kT$ – параметр магнитодипольных взаимодействий (отношение энергии диполь-дипольных взаимодействий при контакте двух частиц к энергии теплового движения), φ – объемная доля частиц, d – диаметр частицы с защитной оболочкой.

Процесс перераспределения дисперсных частиц в концентрированной магнитной жидкости во внешних магнитном и гравитационном полях описывается уравнением магнитодиффузии. В настоящей работе исследование седиментации проведено на основании двух уравнений магнитодиффузии предложенных в работах [3] и [4]. Уравнение предложенное в работе [3] получено для ансамбля сферических однодоменных наночастиц и хорошо описывает численные данные в ограниченной области концентраций частиц и энергий диполь-дипольного взаимодействия $\lambda \leq 3$. Кроме того, в работах [5, 6] было показано, что от этой идеализации необходимо отказаться при описании концентрационных распределений в реальных магнитных жидкостях

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\text{div} \left\{ D_0 K(\varphi) \left[\varphi L(\xi_e) \nabla(\xi_e) + \varphi G_\gamma \mathbf{e} - \left[1 + \frac{2\varphi(4-\varphi)}{(1-\varphi)^4} - \varphi \frac{\partial^2(\varphi^2 G)}{\partial \varphi^2} \right] \nabla \varphi \right] \right\}, \quad (4)$$

$$G(\lambda, \varphi) = \frac{4}{3} \lambda^2 \frac{(1+0.04\lambda^2)}{(1+0.308\lambda^2\varphi)} \frac{(1+1.28972\varphi+0.72543\varphi^2)}{(1+0.83333\lambda\varphi)}.$$

Здесь $K(\varphi) = b/b_0$, b и b_0 – подвижности частиц в магнитной жидкости и жидкости-носителя, соответственно, $D_0 = b_0 kT$ – эйнштейновское значение коэффициента диффузии, \mathbf{e} – единичный вектор, направленный вдоль ускорения свободного падения, $G_\gamma = \Delta\rho V_s g h / k T$ – обратная высота барометрического распределения в безразмерных координатах (g – ускорение свободного падения, $\Delta\rho$ – разность плотностей твердого ядра частицы и несущей жидкости, V_s – объём твердого ядра), $G(\lambda, \varphi)$ – относительный вклад магнитодипольных взаимодействий в плотность свободной энергии. Первое слагаемое в (4) отвечает за магнитофорез, второе – за седиментацию, третье за диффузию, четвертое – за стерические взаимодействия и последнее – за эффективное притяжение частиц, связанное с магнитодипольными взаимодействиями. Эффективный параметр Ланжевена ξ_e , определяющий интенсивность магнитофореза, задается уравнением (3).

В работе [4] на основе анализа численных данных, полученных методами молекулярной динамики, предложено уточненное выражение для изотропной частиц коэффициента градиентной диффузии магнитных наночастиц

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\operatorname{div} \left\{ D_0 (1 - \varphi)^{6.55} \left\{ \varphi L(\xi_e) \nabla(\xi_e) + \varphi G_\gamma \mathbf{e} - \left[1 + \frac{2\varphi(4 - \varphi)}{(1 - \varphi)^4} - (e^{A(\lambda)\varphi} - e^{B(\lambda)\varphi}) \right] \nabla \varphi \right\} \right\}. \quad (5)$$

Здесь $A(\lambda) = 1.3\lambda$, $B(\lambda) = 1.3\lambda - 3\lambda^2 + 0.1\lambda^4 - 0.018\lambda^6$ — коэффициенты. Уравнение (5) позволило несколько расширить область применимости теории [3] до $\lambda \leq 4$. Однако оно получено для ансамбля частиц в отсутствии внешнего магнитного поля.

Численное моделирование

Краевая нестационарная задача диффузии решается в пакете Comsol Multiphysics[®]. На каждом итерационном шаге проводится расчет концентрационного поля, уточнение магнитного поля и намагниченности дисперсных частиц.

При решении сопряженной задачи для связанной системы уравнений (1–5) применялся метод конечных элементов на нерегулярной сетке с треугольными элементами. Плотность сетки в полости с магнитной жидкостью на порядок выше, чем в области воздушной оболочки (рис. 2). Для снижения величины градиентов, углы полости с магнитной жидкостью скруглены.

Для решения системы уравнений используется стандартный сопряженный нелинейный решатель, применяющий метод Ньютона-Рафсона [7]. Проверка сходимости выполнена путем исследования изменения стандартного отклонения стационарного распределения концентрации частиц, которое характеризует степень расслоения жидкости, от числа степеней свободы (рис. 3) на основании уравнения магнитодиффузии (5).

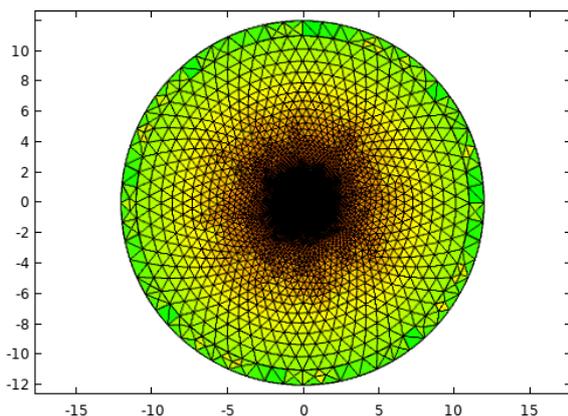


Рис. 2. Расчетная сетка

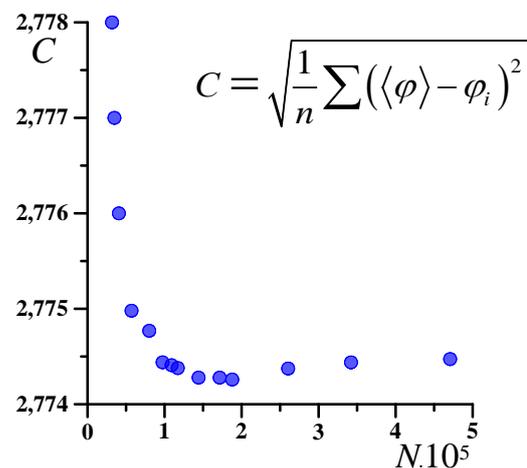


Рис. 3. Зависимость стандартного отклонения от числа степеней свободы $\lambda = 2$, $\xi_0 = 6$, $G_\gamma = 1$, $\langle \varphi \rangle = 0.1$

Увеличение числа степеней свободы до $N = 10^5$ приводит к уменьшению стандартного отклонения. Дальнейшее увеличение N приводит к накопле-

нию оценочной ошибки решения и постепенному увеличению стандартного отклонения. Поэтому для расчетов выбрано значение $N = 1,5 \cdot 10^5$.

Результаты

Исследование седиментации в квадратной полости проведено на основании двух уравнений магнитодиффузии (4) и (5). Стационарные распределения объемной доли дисперсных части магнитной жидкости, полученные для двух уравнений магнитодиффузии представлены на рис. 4.

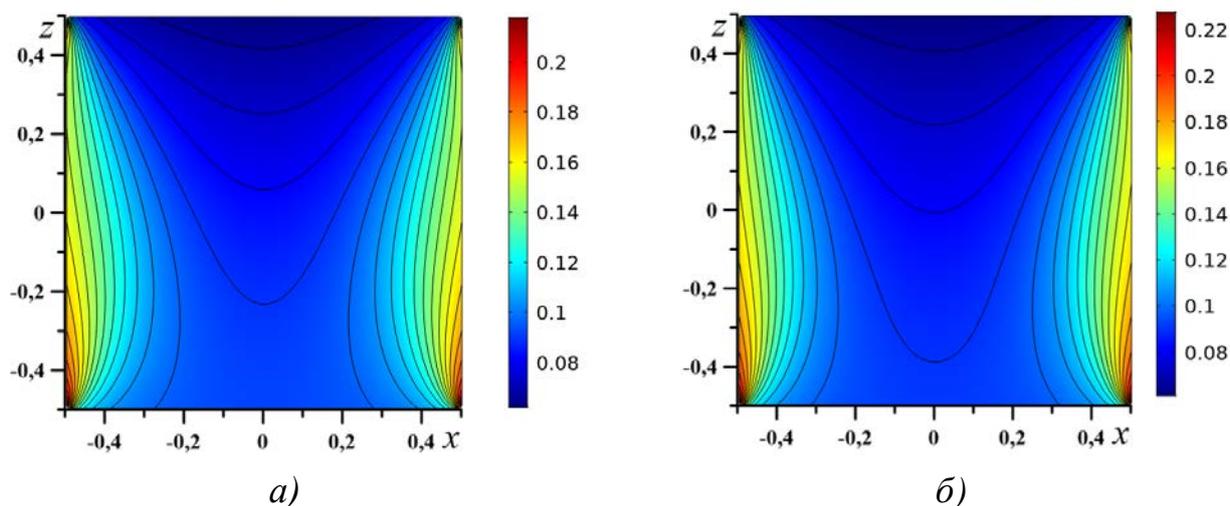


Рис. 4. Стационарные распределения объемной доли дисперсных частиц, рассчитанные на основании уравнений магнитодиффузии а) – (4) и б) – (5).
 $\lambda = 2$, $\xi_0 = 6$, $G_\gamma = 1$, $\langle \varphi \rangle = 0.1$

Результаты обеих моделей качественно повторяют друг друга, тем не менее более сильная сегрегация наблюдается на рис. 4 б, соответствующий уравнению (5). Для демонстрации расхождения на рис. 5 а представлены профили стационарного распределения объемной доли дисперсных частиц в центральной части полости. Наибольшее расхождение в предсказаниях двух теорий наблюдается в пристеночных областях. Стандартные отклонения при выбранных параметрах системы не превышает 10%.

На рис. 5б показано изменение стандартного отклонения при увеличении внешнего магнитного поля. Кривые расслоения жидкости ведут себя немонотонно в обоих случаях: вплоть до значения безразмерной напряженности внешнего магнитного поля $\xi_0 = 3$, расслоение медленно убывает, а дальнейшее усиление внешнего магнитного поля приводит к быстрому увеличению степени сегрегации. Результаты, предсказанные теорией (5) дают несколько завышенные результаты по сравнению с уравнением (4) на всем участке кривой, а при увеличении параметра ξ расхождение увеличивается. Причина такого поведения кроется в магнитодипольных взаимодействиях дисперсных частиц, которое увеличивается по мере роста магнитного поля.

Возникающие расхождения теорий следует проверить на результатах натурального эксперимента при низких значениях концентрации, в том случае, когда теория (4) дает хорошее согласование с экспериментом [5].

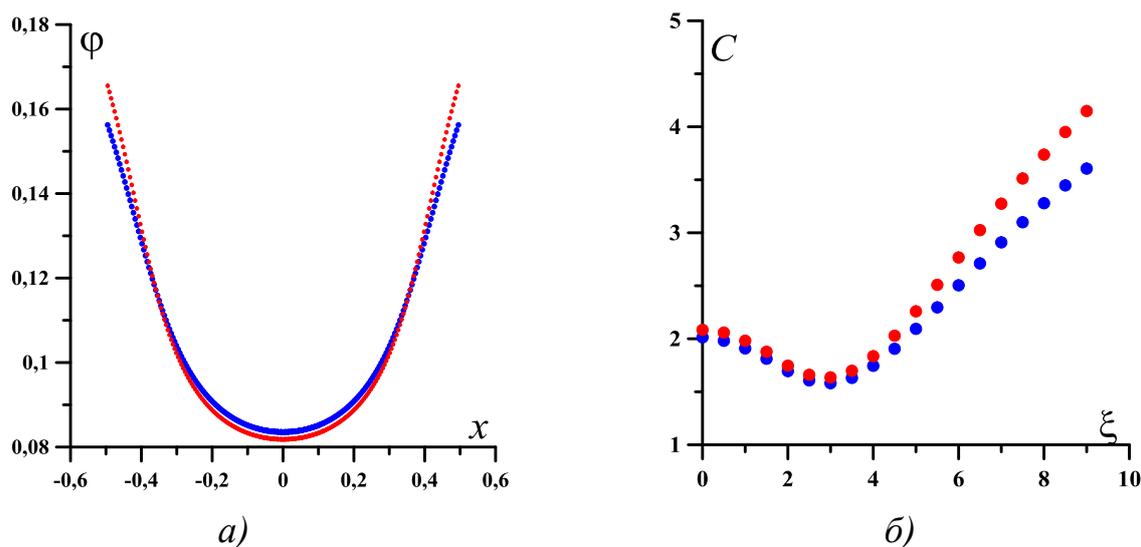


Рис. 5. а) Профили объемной доли дисперсных частиц при $z = 0$; б) зависимости стандартного отклонения от внешнего магнитного поля, рассчитанные на основании двух уравнений магнитодиффузии ● – (4), ● – (5).
 $\lambda = 2, \xi_0 = 6, G_\gamma = 1, \langle \varphi \rangle = 0.1, \lambda = 2, G_\gamma = 1, \langle \varphi \rangle = 0.1$

Список литературы

1. Bauer-Gottwein P. et al. Hydrogeophysical exploration of three-dimensional salinity anomalies with the time-domain electromagnetic method (TDEM) // Journal of Hydrology. 2010. Vol. 380 (3–4). P. 318–329.
2. Ivanov A. O., Kuznetsova O. B. Magnetic properties of dense ferrofluids: an influence of interparticle correlations // Physical Review E. 2001. Vol. 64 (4). P. 041405.
3. Pshenichnikov A. F., Elfimova E. A., Ivanov A. O. Magnetophoresis, sedimentation, and diffusion of particles in concentrated magnetic fluids // Journal of Chemical Physics. 2011. Vol. 134 (18). P. 184508.
4. Kuznetsov A. A., Pshenichnikov A. F. Sedimentation equilibrium of magnetic nanoparticles with strong dipole-dipole interactions // Physical Review E. 2017. Vol. 95 (3). P. 032609.
5. Pshenichnikov A. F., Ivanov A. S. Magnetophoresis of particles and aggregates in concentrated magnetic fluids // Physical Review E. 2012. Vol. 86 (5). P. 051401.
6. Elfimova E. A. et al. Sedimentation equilibria in polydisperse ferrofluids: critical comparisons between experiment, theory, and computer simulation // Soft matter. 2016. Vol. 12 (18). P. 4103–4112.
7. Fernández M. Á., Moubachir M. A Newton method using exact Jacobians for solving fluid–structure coupling // Computers & Structures. 2005. Vol. 83 (2–3). P. 127–142.
8. Такетому С., Тукадзуми С. Магнитные жидкости. М.: Мир, 1993. 272 с.

ДВУХСЛОЙНАЯ СИСТЕМА ЖИДКОСТЕЙ В ВЕРТИКАЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

К. А. Хохрякова^a, Е. В. Колесниченко^b

^aИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, Королева, 1

^bПермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Работа посвящена экспериментальному исследованию устойчивости горизонтального слоя магнитной жидкости, расположенного на жидкой подложке из перфтороктана в ортогональном к поверхности переменном магнитном поле. Длина бегущей по поверхности слоя феррожидкости волны обратно пропорциональна частоте колебаний магнитного поля. При определенной частоте колебаний напряженности магнитного поля волна становится стоячей. Получены зависимости критических значений амплитуды напряженности от частоты вынужденных колебаний переменного магнитного поля для слоя феррожидкости различной начальной толщины.

TWO-LAYER LIQUID SYSTEM IN VERTICAL MAGNETIC FIELD

C. A. Khokhryakova^a, E. V. Kolesnichenko^b

^aInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Korolyov St. 1, 614013, Perm

^bPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The work is devoted to an experimental study of the stability of a magnetic fluid horizontal layer located on a liquid perfluorooctane substrate in an alternating magnetic field orthogonal to the surface. The length of the ferrofluid wave traveling along the surface is inversely proportional to the frequency of the magnetic field oscillations. The wave mode changes at a certain frequency of the magnetic field oscillation to a standing one. The critical values of the field intensity amplitude depending on the frequency of an alternating magnetic field for a ferrofluid layer of various initial thicknesses were obtained.

Введение

На свободной поверхности жидкого слоя конечной глубины распространяются гравитационно-капиллярные волны, а в магнитных жидкостях – при наличии магнитного поля – еще и магнитокапиллярные. Волны на свободной поверхности магнитной жидкости возникают из-за того, что давление в любой точке жидкости пропорционально напряженности в ней. Если магнитное поле будет периодически меняться во времени, то и на свободной поверхности магнитной жидкости будет возбуждаться периодическое движение. Это движение приобретает резонансный характер при совпадении характеристик возбуждаемой магнитным полем поверхностной волны с временными и пространственными характеристиками вынуждающей силы. Наличие у слоя

магнитной жидкости свободной (и межфазной) поверхности обуславливает влияние пространственных характеристик системы, таких как диаметр кюветы и толщина слоя жидкости, на резонансную частоту.

Наличие еще одного механизма генерации волн на поверхности жидкости как инструмент управления поверхностью может оказаться хорошим средством для моделирования в лабораторных условиях различных волновых процессов в жидкостях, происходящих под действием гравитационных или иных ускорений. Использование жидкой подложки для слоя магнитной жидкости открывает перспективы, связанные с изучением различных типов неустойчивости равновесия и течения жидкостей в системах со свободной/межфазной поверхностью [1]. Наличие у слоя феррожидкости двух деформируемых границ, во-первых, резко снижает величину критической напряженности магнитного поля, при которой слой разрушается, превращаясь в упорядоченную систему капель или многоугольных фигур, эволюционирующих по мере изменения интенсивности, частоты и направления магнитного поля [2]. Во-вторых, сложение возмущений от обеих деформируемых поверхностей ведет к интерференции двух возникающих рельефов, что, в свою очередь, обуславливает появление новой колебательной моды, и как следствие возникновение автоколебаний в системе [3].

Методика эксперимента

Двухслойная система жидкостей создавалась в стеклянной кювете в виде короткого широкого вертикального цилиндра. Толщина слоя и подложки определялись по массе заливаемых в кювету жидкостей. Толщина жидкой подложки в несколько раз превышала толщину слоя феррожидкости во избежание касания последней дна кюветы под действием магнитного поля. В ходе опыта кювета помещалась на горизонтальную площадку в центре системы двух коаксиально вложенных друг в друга катушек Гельмгольца, каждая из которых представляла собой две соосные кольцевые обмотки, расположенные параллельно друг другу на расстоянии, равном среднему радиусу обмоток. Для организации осцилляций слоя феррожидкости использовалось линейно-поляризованное переменное магнитное поле вида $H(t) = H_0 \cos \omega t$. Для этого обмотки катушек Гельмгольца подключались к генератору сигналов специальной формы через усилитель постоянного тока. Изображение слоя феррожидкости регистрировалось цифровыми видеокамерами со стороны его свободной и межфазной поверхностей. Визуализация рельефа поверхности слоя выполнялась при помощи кругового светодиодного источника света.

В эксперименте использована магнитная жидкость в виде коллоида магнетита в керосине, стабилизированного олеиновой кислотой (плотностью $\rho = 1.4 \text{ г/см}^3$, поверхностным натяжением $\sigma = 24.3 \text{ мН/м}$, намагниченностью насыщения $M_s = 50 \text{ кА/м}$, начальной магнитной восприимчивостью $\chi_0 = 5.2$). В качестве жидкой подложки был выбран

перфтороктан (плотностью $\rho = 1.7 \text{ g/cm}^3$, поверхностным натяжением $\sigma = 13.6 \text{ dyne/cm}$). Опыты выполнены при температуре жидкостей и окружающей среды $(23 \pm 1)^\circ\text{C}$.

Результаты эксперимента

Ранее в работе [2] было показано, что устойчивая двухслойная система «феррожидкость – перфтороктан» становится неустойчивой при некоторой критической напряженности H_c постоянного во времени и пространстве (т.е. однородного) вертикального магнитного поля.

Как известно, давление в любой точке магнитной жидкости пропорционально напряженности магнитного поля в ней [5]. При периодическом изменении напряженности поля свободная поверхность магнитной жидкости, как поверхность постоянного давления, будет представлять из себя систему холмов и впадин, соответствующих максимуму и минимуму магнитного поля. Изменение магнитного поля во времени вызывает соответствующие изменения поверхности в виде бегущих или стоячих волн.

Задача в данной постановке является динамической. При включении осциллирующего поля вследствие действия пондеромоторной периодически меняющейся силы происходит отклик слоя магнитной жидкости, выражающийся в периодических колебаниях поверхности. На свободной поверхности слоя феррожидкости возникает осесимметричная волна с максимальной амплитудой в центре кюветы (рис. 1). При определенной частоте колебаний ν и амплитуде напряженности магнитного поля H_0 волна становится стоячей, причем частота, при которой она формируется, уменьшается с ростом толщины жидкой подложки. При этом длина образовавшейся стоячей волны уменьшается с ростом частоты осцилляций напряженности магнитного поля.

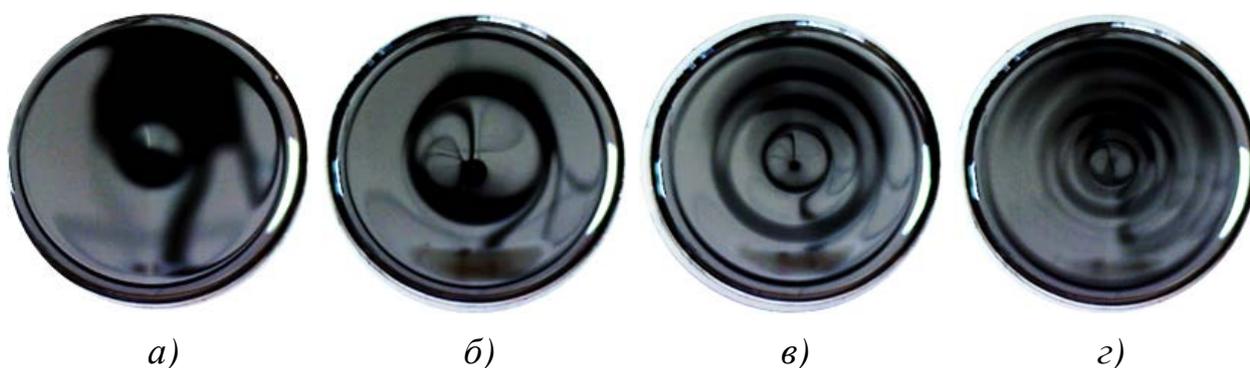


Рис. 1. Волны на свободной поверхности слоя феррожидкости на жидкой подложке при амплитуде напряженности магнитного поля $H_0 = 0.9 H_c$ и частоте ν , Гц: а) 1; б) 4; в) 7; г) 8. Диаметр кюветы $D = 59,4 \text{ мм}$

Для случая стационарного однородного поля была получена зависимость критической напряженности магнитного поля H_c , при которой

происходит распад слоя на упорядоченную систему капель, для нескольких типов феррожидкостей различной толщины (от 1 до 5 мм) в кюветах различного диаметра (рис. 2). Величина критической напряженности, приводящей к разрушению сплошного слоя, увеличивается с ростом его толщины. Возрастание магнитной восприимчивости феррожидкости ведет к снижению величины критической напряженности поля. В то же время значение H_c очень слабо зависит от диаметра кюветы, что позволяет проводить сопоставление со случаем полубесконечного слоя.

В случае вертикально осциллирующего поля было обнаружено, что при некоторых значениях управляющих параметров: амплитуды напряженности поля H_0 и частоты ν – двухслойная система переходит из режима стоячих волн в состояние неустойчивости, сопровождающееся нарушением сплошности слоя феррожидкости (рис. 3.). Исследование в переменном магнитном поле было проведено для толщин феррожидкости $h = 2,5–3,5$ мм, соответствующих критерию устойчивости двухслойной системы жидкостей в отсутствие внешних воздействий [1]. Выделенная на рис. 4 область соответствует диапазону значений амплитуды переменного магнитного поля H_0 равной H_c стационарного поля для выбранных толщин слоя феррожидкости (рис. 2).

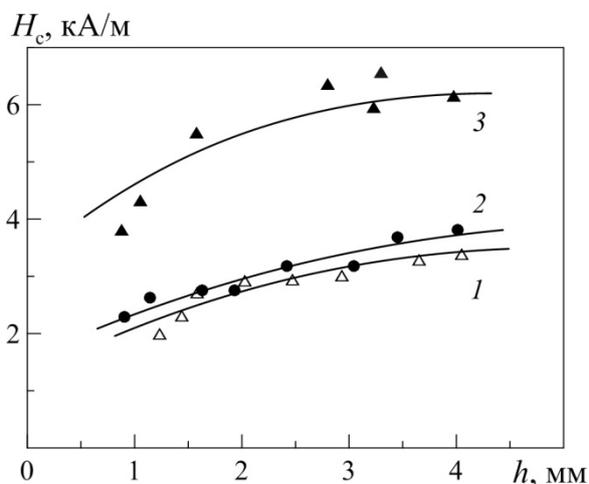


Рис. 2. Критическая напряженность H_c статического магнитного поля в зависимости от толщины слоя феррожидкости h с различной начальной магнитной восприимчивостью χ_0 : 2,0 (3); 7,0 (1, 2). D , мм: 59,4 (1, 3); 89,0 (2)

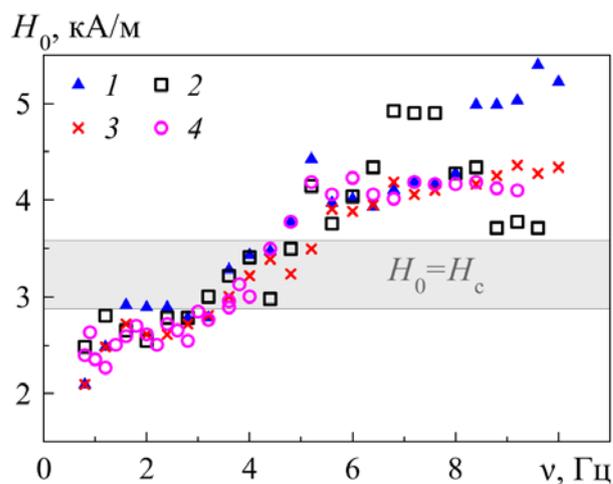


Рис. 3. Карта устойчивости слоя феррожидкости на жидкой подложке в зависимости от амплитуды напряженности переменного магнитного поля H_0 и частоты ν для слоя феррожидкости толщиной h , мм: 3,5 (1), 3,0 (2), 2,8 (3), 2,5 (4)

При малых частотах осцилляций поля неустойчивость слоя наступает при значениях $H_0 < H_c$, что указывает на дестабилизирующее действие поля в области частот 1–3 Гц. В диапазоне частот 3–5 Гц слой теряет устойчивость при значениях $H_0 \approx H_c$; далее с ростом частоты распад слоя

феррожидкости происходит при значениях $H_0 > H_c$, т.е. наблюдается стабилизирующий эффект осцилляций поля на устойчивость всей системы в целом.

Заключение

Исследована устойчивость слоя феррожидкости в ортогональном стационарном магнитном поле, получена зависимость величины критической напряженности поля от толщины слоя. Получены зависимости критических значений амплитуды напряженности от частоты вынужденных колебаний переменного магнитного поля для слоя феррожидкости различной начальной толщины. Полученные кривые устойчивости показывают, что воздействие малой частоты (1–3 Гц) дестабилизирует систему, в то время как большие частоты (от 5 Гц и выше) оказывают стабилизирующее воздействие.

Список литературы

1. *Bushueva K. A., Kostarev K. G.* Behavior of a ferrofluid layer with stable surface rupture subjected to a tangential magnetic field // *Fluid Dynamics*. 2011. Vol. 46 (5). P. 707–714.
2. *Bushueva C. A.* Drop structures formed by ferrofluid in the uniform magnetic field // *Magnetohydrodynamics*. 2013. Vol. 49 (3–4). P. 598–602.
3. *Khokhryakova (Bushueva) C. A., Kostarev K. G., Lebedev A. V., Denisova M. O.* Ferrofluid layer lying on perfluorooctan substrate under the action of vertically oscillating magnetic field The effect of an oscillating vertically oriented magnetic field on the ferrofluid layer located on a perfluorooctane substrate // *Magnetohydrodynamics*. 2018. Vol. 54 (1–2). P. 39–44.
4. *Rosensweig R. E.* *Ferrohydrodynamics*. Cambridge University Press, 1985. 344 p.
5. *Блум Э. Я., Майоров М. М., Цеберс А. О.* *Магнитные жидкости*. Рига: Зинатне, 1989. 387 с.

ПОЛУЧЕНИЕ СУПЕРПИКСЕЛЬНОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ МЕТОДОМ СУПЕРРАЗРЕШЕНИЯ

М. С. Гаранина, С. В. Машкин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Выполнен обзор основных методов получения изображения с высоким разрешением из изображений с низким разрешением. Дано описание алгоритма получения изображения методом super-resolution из серии изображений и программная реализация в среде Matlab с использованием пакета Image Processing Toolbox.

Ключевые слова: компьютерное зрение; суперразрешение; высокое разрешение

SUPER-RESOLUTION FROM MULTIPLE IMAGES: REVIEW AND IMPLEMENTATION

M. S. Garanina, S. V. Mashkin

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

Short review of methods of super-resolution (SR) from multiple images presented. Simple algorithm of SR and its implementation with Matlab and Image Processing Toolbox described.

Keywords: image processing; super-resolution from N-images; Matlab

Введение

Метод получения изображений с высоким разрешением (HR - High Resolution) на основе одного или нескольких исходных изображений с низким разрешением (LR – Low Resolution) имеет большое практическое значение, поскольку позволяет получить больше информации о наблюдаемом объекте, чем это позволяет сделать имеющаяся аппаратура. Алгоритмы суперпиксельного разрешения могут применяться в криминалистике, астрономии, медицине, дефектоскопии, в системах видеонаблюдения и др.

Ниже приводится краткое описание существующих способов увеличения разрешения изображения.

Аппаратные:

1) Уменьшение размера пикселя при изготовлении фотоматрицы камеры. При этом уменьшается количество света, попадающее на пиксель, что ведет к появлению шумов и сильному снижению качества изображения.

2) Увеличение площади фотоматрицы. При этом существенно возрастает стоимость изготовления оборудования, а также увеличиваются размеры камеры, что не всегда приемлемо.

Программные:

Программные способы получения HR-изображений из LR-изображений

включаются в себя две основные группы – основанные на использовании одного исходного изображения и основанные на использовании нескольких исходных изображений.

Способы, основанные на одном исходном изображении:

- 1) Линейные методы интерполяции (метод ближайшего соседа, билинейная, бикубическая и др.).
- 2) Нелинейные методы интерполяции (WADI, NEDI, и др.).
- 3) Методы, основанные на поиске похожих областей (в другом масштабе) на исходном изображении.
- 4) Методы, основанные на поиске похожих областей в имеющейся базе данных HR-изображений.

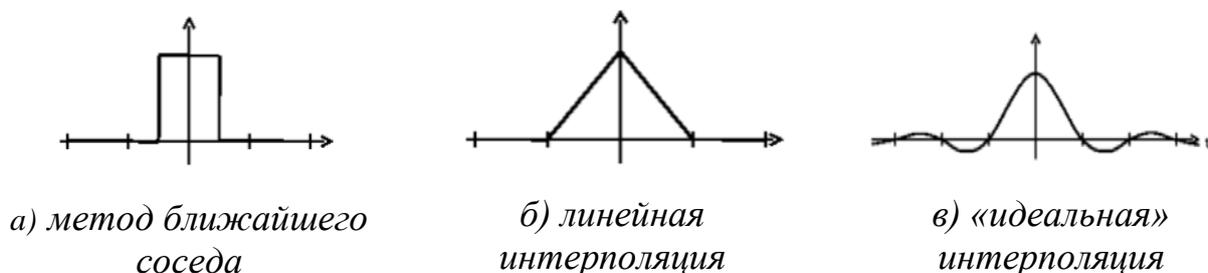
Линейные методы интерполяции применяют одни и те же преобразования для всех пикселей изображения. Изображение представляется в виде функции, а пиксели изображений являются точками, в которых значение функции известно. Таким образом, сутью повышения разрешения изображений является нахождение значений функции в промежуточных точках. В общем случае линейные методы представляют собой свертку представления изображения с некоторым ядром K .

Для двумерного случая:

$$f(x, y) = \sum_{i,j=-\infty}^{+\infty} F(i, j)K(i - x)K(j - y), \quad (1)$$

где $f(x)$ – интерполированное изображение, $F(i)$ – интенсивность (яркость) i -ого j -го пикселя на изображении, K – ядро или маска.

Из формулы (1) видно, что результат зависит только от выбора ядра K . Ниже представлены некоторые виды ядер:



а) метод ближайшего соседа

б) линейная интерполяция

в) «идеальная» интерполяция

Рис. 1. Ядра фильтров линейных методов интерполяции [1]

Общим недостатком линейных методов является возможное ухудшение изображения из-за появления артефактов [2]:

- 1) размытие (потеря четкости изображения),
- 2) алиасинг (неровности, эффект «лесенки»),
- 3) эффект Гиббса (появляется резкая высвеченная обводка около деталей изображений, где есть сильные перепады интенсивности).

Нелинейные методы интерполяции позволяют частично избавиться от недостатков линейных методов. Они используют для каждого интерполируемого значения интенсивности пикселя своё индивидуальное значения ядра,

учитывающее информацию локальной области на изображении, но это усложняет математические вычисления и требует больше ресурсов.

Одним из нелинейных методов интерполяции является градиентный алгоритм WADI [2], который, как и другие градиентные методы, использует тот факт, что интерполяция, учитывающая направление градиента яркости на изображении даёт результат лучший, чем обычная (ненаправленная) интерполяция.

Другим представителем нелинейной интерполяции является алгоритм NEDI [2], который использует тот факт, что яркость изображения медленно меняется вдоль границ объектов. Для обнаружения границ используется самоподобие исходного изображения со своей уменьшенной копией.

Принципиальным недостатком линейных и нелинейных методов интерполяции является то, что эти методы лишь улучшают изображение, но не позволяют привнести существенно новую информацию.

Методы, основанные на поиске похожих областей (в другом масштабе) на исходном изображении позволяют частично справиться с этим «информационным» ограничением. Они используют тот факт, что иногда на изображении можно найти увеличенные «копии» объектов. Недостатком этих методов является ограниченное количество ситуаций (изображений), когда эти методы могут быть применены.

Методы, основанные на поиске похожих областей в имеющейся базе данных HR-изображений, основываются на том, чтобы для исходного изображения с низким разрешением (LR – Low Resolution) найти и подставить сегменты из существующей базы данных HR-изображений, которая может содержать несколько миллионов изображений. Однако проблема данного метода заключается в том, что трудно устанавливать правильные соответствия сегментов.

Способы, основанные на нескольких исходных изображениях

В отличие от ресэмплинга (интерполяции, увеличения) изображений, повышающего разрешение, но не вносящего в изображение существенно новой информации, методы SR (Super-Resolution) пытаются извлечь новую информацию и устранить ухудшения, вызванные процессом формирования изображения в камере.

Основная идея SR заключается в объединении избыточной информации одной и той же сцены, содержащейся в нескольких зашумленных кадрах с низким разрешением [3].

Задача SR обычно ставится в виде обратной задачи нахождения изображения низкого разрешения, т.е. требуется создать такое HR изображение из серии LR изображений, которое бы при уменьшении и с учетом сдвигов дало минимальное расхождение с исходными изображениями низкого разрешения.

Задача SR формулируется следующим образом:

$$w = Ak * z = D * H * z, \quad (2)$$

где A_k – оператор понижения разрешения, z – искомое HR изображение, w – исходные LR изображения, D, H – операторы понижения разрешения.

Данная задача (2) является некорректно поставленной, так как существует несколько вариантов HR изображения, каждое из которых вполне соответствует исходному изображению, а для решения используются методы, опирающиеся на информацию о наборе исходных изображений. Корректность постановки задачи достигается за счёт добавления ограничений, например, использование регуляризирующего метода [2].

Табл. 1. Основные этапы работы программы, реализующей метод SR

№	Описание	Основные функции
1	Получение N изображений низкого разрешения из исходного изображения при помощи аффинных преобразований и уменьшения размера изображения.	imresize(S,[mrows ncols],method) – функция, изменяющая разрешение изображения S до размеров mrows x ncols maketform('affine',T) – функция, создающая tform-структуру для аффинных преобразований невырожденной матрицы T imtransform(I,tform) – функция, выполняющая геометрическое преобразование исходного изображения I на основе вычисленной tform-структуры
2	Поиск и описание особых точек изображений, нахождение пар соответствий особых точек	detectHarrisFeatures() – поиск особых точек с помощью детектора Хариса extractFeatures() – формирование дескриптора особых точек matchFeatures() – нахождение индексов пар совпадающих дескрипторов
3	Преобразование изображения к координатам исходного изображения	Imwarp() – аффинное преобразование изображения к исходному с использованием матрицы преобразования
4	Интерполирование изображения на более мелкой сетке с большим размером, объединение изображений	griddata(x,y,z, XI, YI) – интерполяция изображения z с координатами x и y на более мелкой сетке XI, YI meshgrid(x, y) формирует массивы, которые определяют координаты узлов прямоугольника, задаваемого векторами x, y.
5	Добавление изображения, у которых при первом «проходе» было недостаточно пар соответствия	Функции, использованные в пунктах 2-5
6	Применение фильтра для повышения резкости изображения	fspecial('unsharp') – возвращает маску h фильтра, повышающего резкость изображения. imfilter(A, H) – фильтрование многомерного массива A многомерным фильтром H.

Реализация метода SR в среде MatLab

Для создания HR изображения методом SR, была использована программа MatLab [4]. Подключение пакета Image Processing Toolbox позволяет работать с изображениями, используя различными методы, включая фильтры интерполирования.

Реализация алгоритма будет рассмотрена на примере обработки исходного HR-изображения (размером 1358×812 пикселей) и полученных 100 изображений низкого разрешения (271x162 пикселей).

Работу программы можно разбить на несколько этапов, которые рассмотрены в табл. 1.

Анализ полученных результатов

При создании изображения высокого разрешения использовался набор изображений, полученных путём произвольного поворота и смещения исходного изображения и последующего уменьшения его разрешения. Из-за отсутствия достаточного количества пар соответствующих особых точек из сгенерированных изображений реально использовались не все (в среднем около 40 из 100). Если изображение имеет размер $H \times W$ пикселей и требуется его увеличить в n раз (вдоль каждой стороны), то для хорошей работы алгоритма понадобится примерно n^2 кадров. При увеличении количества используемых LR-изображений, увеличивается и качество получаемого SR-изображения, появляется дополнительная информация, изображение становится более четким.



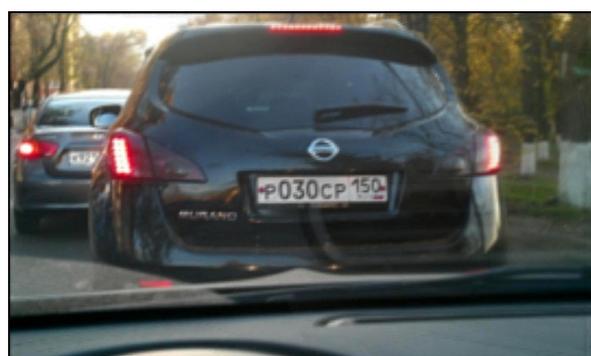
метод ближайшего соседа



билинейная интерполяция



бикубическая интерполяция



суперпиксельное разрешение

Рис. 2. Сравнение полученных результатов

Для сравнения на рис. 2 представлены результаты работы фильтров интерполяции методом ближайшего соседа, билинейной и бикубической и результаты работы реализованного метода. Видно, что полученное SR-изображение немного размыто по сравнению с другими даже после приме-

нения фильтра увеличения резкости. Также к недостаткам алгоритма можно отнести большое затрачиваемое время работы программы.

Заключение

В данной статье были рассмотрены существующие методы повышения разрешения изображения из одного и нескольких кадров. Подробно описан алгоритм получения изображения с высоким разрешением из изображений с низким разрешением, используя метод SR, и его программная реализация. Основным недостатком созданной программной реализации – некоторая размытость получаемого изображения. Определить и исправить причины этого предполагается в ходе дальнейшей работы.

Можно сказать, что метод SR является дешевым (в отличие от аппаратных методов) и весьма перспективным. Он может быть использован во многих сферах, где можно получить несколько кадров одной и той же сцены: обработка спутниковых фотографий поверхности Земли, компьютерная и магнитно-резонансная томография, камеры видеонаблюдения, видеорегистраторы, любительская фото- и видеосъемка и др.

Список литературы

1. *Маркелов К. С.* Модель повышения информативности цифровых изображений на базе метода суперразрешений // Инженерный вестник. 2013. Вып. 3. С. 525–542.
2. *Насонов А. В.* Регуляризирующие методы повышения разрешения изображений: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.18. Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва, 2011. 110 с.
3. *Park S. C., Park M. K., Kang M. G.* Super-resolution image reconstruction: a technical overview. // IEEE Signal Processing Magazine. 2003. Vol. 20 (3). P. 21–36.
4. MatLab&ToolBoxes [Электронный ресурс]. URL: <http://matlab.exponenta.ru> (дата обращения: 20.04.2018).

АВТОМАТИЗАЦИЯ ВЕРСТКИ ДОКУМЕНТАЦИИ ПРИ РАСЧЕТАХ НАДЕЖНОСТИ РАДИОЭЛЕКТРОННЫХ ИЗДЕЛИЙ

М. А. Ермолаева, С. Б. Карпов

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

В статье описывается задача автоматической верстки объемной документации в формате doc-документа. Для решения поставленной задачи рассмотрены различные варианты алгоритмов и проведено их сравнение. Верстка документации возможна благодаря разработанной компьютерной программе. Тестирование программы было проведено на реальном расчете надежности изготавливаемого изделия.

Ключевые слова: верстка; Word; C#; автоматизация

AUTOMATION OF THE LAYOUT OF DOCUMENTATION IN CALCULATIONS OF RELIABILITY OF RADIO ELECTRONIC PRODUCTS

M. A. Ermolaeva, S. B. Karpov

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The article describes the task of layout of voluminous documentation in doc-document format. To solve this problem, various variants of algorithms are considered and compared. Layout of documentation is possible thanks to the developed computer program. Testing of the program was carried out on the basis of a real reliability calculation.

Keywords: layout; Word; C#; automation

Введение

Необходимость автоматической верстки документации возникает, когда при расчетах разработчик документации получает большую базу таблиц Excel, которые затем приходится вручную добавлять в текстовый документ. В данной ситуации большую роль играет человеческий фактор, т.к. способность даже квалифицированных специалистов переоформлять и перепроверять большие объемы текстовой информации ограничена. С ростом объема текста растет вероятность появления ошибок и усложняется перепроверка. Автоматизация процесса оформления документации позволит сократить время его разработки и снизить вероятность появления ошибок.

Существуют программы для автоматического заполнения документов, например, DocWebService [1] или Автозаполнение документов [2]. Основное назначение таких программ – создание и заполнение договоров, актов, доверенностей, приказов, этикеток, визиток, коммерческих

предложений, типографских бланков и других небольших документов. Существуют программы и для верстки документов, например, Adobe InDesign или LaTeX. Но все эти программы создают документы в формате PDF (англ. Portable Document Format) и ориентированы на верстку журналов, статей или книг. Производственная документация же должна быть в doc-формате.

Конечно, можно воспользоваться программами перевода pdf-формата в doc-формат, но у них есть существенный недостаток: при переводе документа часто происходят значительные искажения и приходится вручную корректировать весь документ.

Следовательно, данные варианты программ не подходят для задачи автоматической верстки документации, когда есть необходимость переноса большого количества таблиц Excel (связанных, например, с составом изделия) в документ формата Word.

Исходные данные

Исходными данными для решения этой задачи являются таблицы Excel, шаблон Word-документа, а также необходимая информация от пользователя, такая как состав изделия, название изделия и другие. Пример входных таблиц Excel представлен на рис. 1.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	
1		РЭС	Средства коммутации												
2		Интенсивность отказов, [1/ч]	9,34E-06												
3		Среднее время безотказной работы, [ч]	107036,8055												
4		Вероятность безотказной работы	0,782295273												
5						за время работы		26280		ч					
6		Поз. обозн.	Тип по ТУ	Номинал	Коп.	Кн	Лб.с.г. ΛБ 10 ⁻⁶	Кр	Кэ	Кпр	КР, Кк.к., Кст, Кф	Ккс, Кв, Км, Кт, Кст1	Ккорп, Кстаб, Кс, Кф	Λр 10 ⁻⁶	Λз 10 ⁻⁶
7		РА1	Ручная пайка ЭРИ без накрутки 211 шт.	-	1		0,0013			4	1			1,0972	1,0972
8		X1	СНЦ28-4/14В-1-В*	-	1		0,0007			3	1	1,717296		0,000587	0,000587
9		X2	СНЦ28-19/22В-1-В*	-	1		0,0007			3	1	3,857648		0,001464	0,001464
10		XS1	M80-8883405*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
11		XS2	M80-8500442*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
12		XS3	M80-8882605*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
13		XS4	M80-8883405*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
14		XS5	M80-4810805*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
15		XS6	M80-4600842*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
16		XS7	M80-4600442*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
17		XS9	M80-8880805*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
18		XS10	M80-8880605*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
19		XS11	M80-4604242*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394
20		XS12	M80-8880605*	-	1		0,046			8	1		1,01819779	0,749394	0,749394

Рис. 1. Пример исходных данных из таблиц Excel

Таблица А.Н – Расчет интенсивности отказов «наименование компоненты и её десятичный номер»

Схемная поз.	Тип ЭРИ	$\lambda_{\text{Б}}$ 10 ⁻⁶ ч ⁻¹	$\lambda_{\text{э}}$ 10 ⁻⁶ ч ⁻¹	$\lambda_{\text{КС}}$ 10 ⁻⁶ ч ⁻¹
X1	PPC5-10-1-3-B	0,001694	0,002369	0,000024
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
XS1	M80-8883405	0,035420	0,648433	0,006484
Итого:			2,845516	0,028455

Рис. 2. Пример таблицы интенсивности отказов

В результате по исходным данным должен формироваться документ с различными таблицами, связанными между собой. Пример таблицы интенсивности отказов, которая получается из исходных данных таблиц Excel, приведена на рис. 2.

Описание существующих алгоритмов для автоматизации

Microsoft Word и Excel созданы по стандарту COM (англ. Component Object Model), т.е. спроектированы таким образом, что позволяют сторонним модулям подключаться к себе и управлять собой. Фактически эти программы не работают в автономном режиме, а постоянно взаимодействуют с другими программами. Программно можно проделать практически все операции, которые мы делаем вручную в Word и Excel: создать новый документ, внести в него правки, сохранить его и т. п.

На данный момент существуют библиотеки для работы с Microsoft Office на различных языках программирования, таких как Java, C#, C++.

Microsoft Office Interop является библиотекой для языка программирования C#. Она похожа своим синтаксисом на Visual Basic.

Spire является платной библиотекой для C#, которая может работать с Microsoft Word с помощью Spire.Doc и Microsoft Excel с помощью Spire.Xls.

Apache POI является библиотекой для языка Java. Используется для работы с различными документами пакета Microsoft Office.

Помимо библиотек, можно использовать макросы Word и Excel, а также базы данных MySQL.

Сравнение алгоритмов

При выборе алгоритма разрабатываемой программы в качестве критериев задавались простота реализации, функциональность и время выполнения программы. Для этого были разработаны небольшие программы с целью тестирования всех существующих решений.

Преимущества макросов:

- довольно простой и понятный в использовании язык Visual Basic;
- возможность легко форматировать текст и таблицы;
- макросы самостоятельны и вполне могут справиться сами со всеми поставленными задачами, без дополнительных программ.

При разработке тестовой программы, использующей макросы, был выявлен такой недостаток, как длительность выполнения работы. При формировании небольших таблиц время работы макроса составляло примерно 15 секунд для 1 страницы. Но при увеличении объема таблиц время выполнения существенно увеличивается. Так, при формировании таблиц на 100 страницах время работы заняло бы примерно 25 минут, а в реальности – еще больше.

Преимущества использования базы данных:

- не надо использовать стороннее программное обеспечение для расчетов, так как вся информация (как исходная, так и полученная при расчетах) будет храниться в базе данных;
- исправления в базе и добавление в нее новых элементов могут проводить сразу несколько человек;
- возможность в базе данных хранить дополнительную информацию, такую как состав изделий и составных частей.

Данный алгоритм работает быстрее макросов, но также имеет недостатки. Реальный алгоритм расчетов усложняется необходимостью учитывать различные условия эксплуатации, следовательно, придется усложнять и разрабатывать большие таблицы данных, что усложнит и весь алгоритм работы базы данных.

Наиболее оптимальным вариантом является использование библиотек для Microsoft Office, так как они работают гораздо быстрее макросов, что было выявлено на соответствующей тестовой программе. Кроме того, описан опыт [3], где указывается время работы программы на библиотеке Microsoft Office Interop. При переборе всех абзацев из 100 страниц время работы программы составило 5 минут, а также указано, как её можно оптимизировать.

Недостатками использования библиотек является необходимость учитывать версию пакета Microsoft Office, которая установлена на используемом компьютере, поскольку при различных версиях документы отображаются по-разному.

Правда, существуют библиотеки, которые не требуют установленного пакета Microsoft Office, такие как Spire, но все они являются платным продуктом, а бесплатные версии содержат урезанный функционал.

Реализация программы

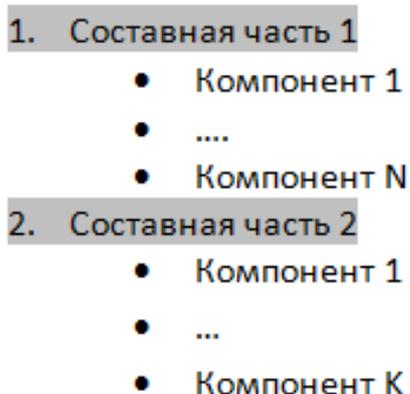


Рис. 3. Структура состава изделия

Реальное изделие состоит из составных частей (рис. 3), которые в свою очередь состоят из других составных частей (компонент). Каждому компоненту соответствует свой расчетный файл Excel. Все компоненты всех составных частей составляют расчетные таблицы интенсивности отказов (см. пример на рис. 2).

По данным таблиц Excel (рис. 1) для компонентов необходимо создать таблицы интенсивности в Word, подсчитать общую интенсивность каждого компонента, общую интенсивность каждой составной части и общую интенсивность изделия в целом.

Таблица А.1 – Расчет интенсивности отказов составных частей изделия для группы исполнения аппаратуры 1.7.1				
Наименование составной части	Количество, n	Интенсивность отказов n составных частей, 10^{-6} ч ⁻¹		Источник информации
		при эксплуатации	при хранении	
Составная часть 1	1	32,665340	0,326653	Расчетные данные, таблица А.2
⋮	⋮	⋮	⋮	
Составная часть N	1	12,289154	0,122892	Расчетные данные, таблица А.N
Итого:				
Изделие	1	120,886146	1,208861	Расчетные данные, таблицы А.2 - А.N

Рис. 4. Пример общей таблицы интенсивности

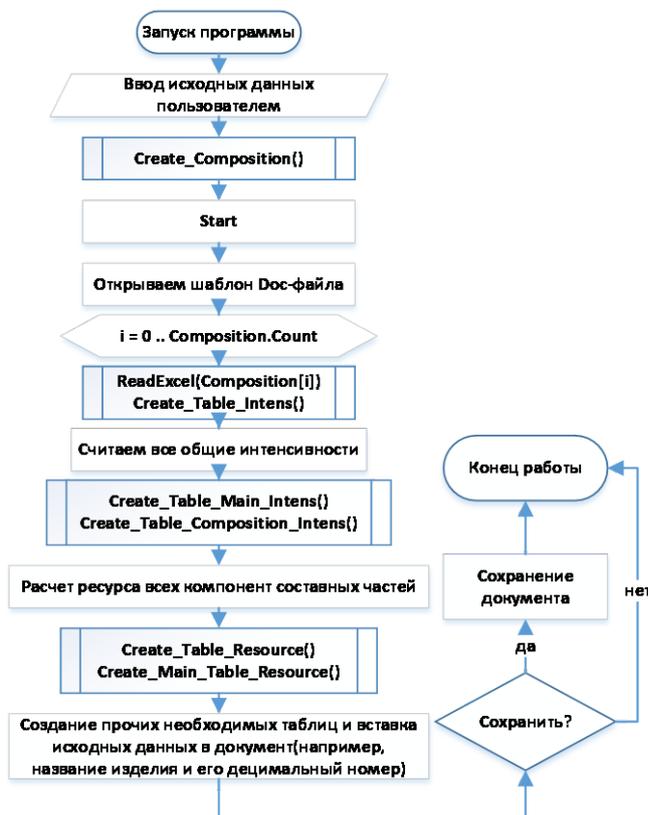


Рис. 5. Блок-схема работы реализованной программы

изделии, загружает таблицы Excel для каждого компонента всех составных частей. Далее программа считывает данные и записывает в память состав изделия и данные об изделии.

Start является началом основного цикла. Открывается шаблон документа и начинается считывание данных из Excel и формирование таблиц интенсивностей для компонентов каждой составной части. Далее производятся необходимые расчеты общей интенсивности, формируется

Далее создается общая таблица интенсивности всех составных частей (см. пример на рис. 4). В общей таблице указываются номера таблиц расчетных данных для каждой составной части, количество частей, общая интенсивность всех частей и изделия в целом.

Для реализации программы был выбран алгоритм на основе библиотеки Microsoft Office Interop на языке C#.

Сначала в программе нужно получить исходные данные от пользователя и организовать хранение информации о составе изделия. Для этого были разработаны классы Composition (для составных частей) и Component (для компонентов). В Composition хранится массив со всеми компонентами для данной составной части.

На рис. 5 представлена блок-схема работы реализованной программы. Вначале пользователь вводит исходные данные, такие как состав изделия и необходимые данные об

общая таблица интенсивности и таблицы для всех составных частей, а также вставка ссылок на таблицы (рис. 4, столбец *Источник информации*). Производятся необходимые расчеты и создаются таблицы ресурса для всех составных частей и общая таблица ресурса. Далее остается только создать прочие необходимые таблицы (например, таблицу состава изделия и таблицу с расчетными значениями) и вставить данные об изделии в текст документа.

Результаты работы программы

Для тестирования реализованной программы было выбрано изделие, состоящее из 3 составных частей и 12 компонентов (суммарное количество).

В результате работы программы был автоматически сформирован и отформатирован документ. Большую часть его составили таблицы интенсивности отказов рис. 2, а именно 80 страниц. Весь документ состоял примерно из 100 страниц. Время выполнения программы заняло около 25 минут, что намного быстрее ручной обработки документа. При этом основное времени работы программы занимает формирование повторов заголовков на каждой странице для объемных таблиц интенсивности отказов, при котором происходит перебор всех строк таблицы и сравнение тех страниц, на которых они находятся.

Заключение

Для решения задачи автоматической верстки документации была разработана компьютерная программа для расчетов надежности изделий. Тестирование программы показало, что предложенный нами алгоритм действительно позволяет автоматизировать верстку объемных документов, упростить работу специалистов и минимизировать количество ошибок в документе.

В настоящее время производится доработка программы для её унификации в работе с любыми документами, содержащими объемные таблицы.

Список литературы

1. Автоматическое заполнение документов [Электронный ресурс]. URL: <https://docwebservice.ru/> (дата обращения: 24.05.2019).
2. Программа для заполнения большого количества однотипных документов Word [Электронный ресурс]. URL: <https://kwork.ru/software/109411/programma-dlya-zapolneniya-bolshogo-kolichestva-odnotipnykh-dok-tov-word> (дата обращения: 24.05.2019).
3. Вильданов А. Н. Из опыта автоматизации Word на языке C# на примере создания оглавления // Cloud of Science. 2018. Т. 5. №1. С. 138–146.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ДАННЫХ ЭЛЕКТРОРАЗВЕДКИ НА БАЗЕ КОМПЛЕКСА АМС

П. С. Козьминых, С. Б. Карпов

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

В статье описывается удобная и простая в использовании программа для оперативной визуализации данных электроразведки на базе комплекса АМС. Программа позволяет просматривать как отдельные кривые зондирования, так и изображения профилей целиком.

Ключевые слова: электроразведка; визуализация

ELECTRICAL SURVEY DATA VISUALIZATION BASED ON AMC COMPLEX

P. S. Kozminykh, S. B. Karpov

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The article describes a convenient and easy-to-use program for the operative visualization of electrical survey data based on the AMC complex. The program allows you to view both the individual sounding curves, and the entire profile images.

Keywords: electrical survey; visualization

Введение

Обработка данных электроразведки давно перешла от составления рукописных таблиц и черчения графиков к программной обработке и интерпретации данных. Все эти программные средства вынужденно являются многофункциональными. Разработчикам подобных программных средств заранее не известно, с каким форматом данных и каким методом измерений придётся работать, в результате чего итоговый продукт является универсальным, многофункциональным, но очень громоздким. Из-за обилия функций они обладают не самым удобным и простым в управлении интерфейсом, для работы с которым зачастую требуется прочтение дополнительной документации. Кроме того, чаще всего программы такого типа являются платными.

Во время полевых работ нередко требуется оперативно просмотреть проделанные измерения, чтобы сделать предварительные выводы по исследуемому участку, либо удостовериться, что во время измерения не возникло никаких технических проблем, таких, например, как отсутствие контактов электродов на пикете. В таких случаях богатый функционал применяемых программ является излишним, а времени, затрачиваемого на простой просмотр данных в удобном виде, требуется слишком много.

Описываемая далее программа визуализации данных предназначена для работы с комплексом АМС и позволяет оперативно просматривать информацию как по отдельным пикетам так и по всему профилю сразу.

Комплекс АМС

Аппаратура АМС [1] предназначена для выполнения электроразведочных наблюдений методом вертикального электрического зондирования (ВЭЗ) [2] – одним из наиболее широко используемых в практике электроразведочных работ. В состав комплекта аппаратуры АМС входят генератор, измеритель и вспомогательное оборудование. Генератор предназначен для возбуждения в земле электрического поля заданной частоты. Измеритель выполнен в виде отдельного модуля и используется для организации всего процесса измерений, а также для управления генератором.

На поверхности земли собирают электроразведочную установку, обычно состоящую из двух питающих (А и В) и двух приемных электродов (М и N) (рис. 1). К питающим электродам подключают управляемый генератор, после чего в земле появляется электрическое поле и, в результате, электрический ток заданной величины. На приемных электродах М и N возникает разность электрических потенциалов (ΔU_{MN}), которая измеряется с помощью измерителя. По результатам измерений можно судить об электрических свойствах горных пород на различных глубинах проникновения тока в землю. Глубина проникновения тока зависит в основном от расстояния между питающими электродами А и В. По результатам выполненных измерений вычисляют кажущееся электрическое сопротивление ρ_k (КС), измеряемое в Ом·м:

$$\rho_k = K \frac{\Delta U_{MN}}{I_{AB}}, \quad (1)$$

где К – коэффициент, который зависит от расстояний между электродами А, В, М и N. КС характеризует интегральное значение удельного электрического сопротивления (УЭС) горных пород в области исследования.

Область исследования располагается под центром установки и простирается от поверхности до глубин, примерно равным АВ/2 (рис. 1). Для выполнения зондирования производят серию измерений, постепенно увеличивая размер питающей линии АВ. Чем больше параметр АВ/2, тем больше глубинность исследований. При этом каждая следующая область исследования полностью включает в себя предыдущую (рис. 2).

В результате описанной серии измерений получается набор значений кажущегося сопротивления, измеренных при заданных АВ/2. В электроразведке параметр АВ/2 называют разносом питающей линии (или просто разносом), а подобную серию измерений – пикетом.

Для удобного представления результатов наблюдений строят график зависимости ρ_k (в Ом·м) от разноса (в м). Такой график называется кривой зондирования или кривой ВЭЗ. Эти графики позволяют качественно отображать изменения УЭС горных пород с глубиной.

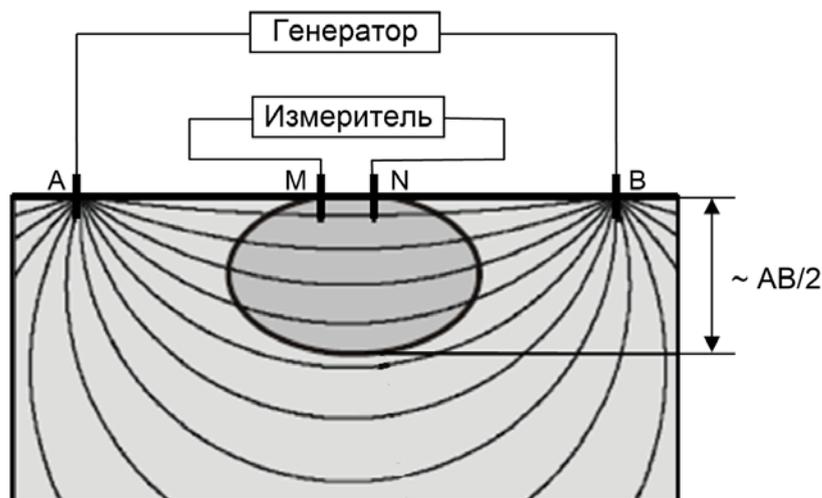


Рис. 1. Схема электроразведочной установки

Измеритель АМС не только управляет всем процессом измерений, но также осуществляет их контроль, визуализацию и хранение. Измеренная информация может считываться на компьютер с помощью специальной программы и сохраняться в файле формата XML.

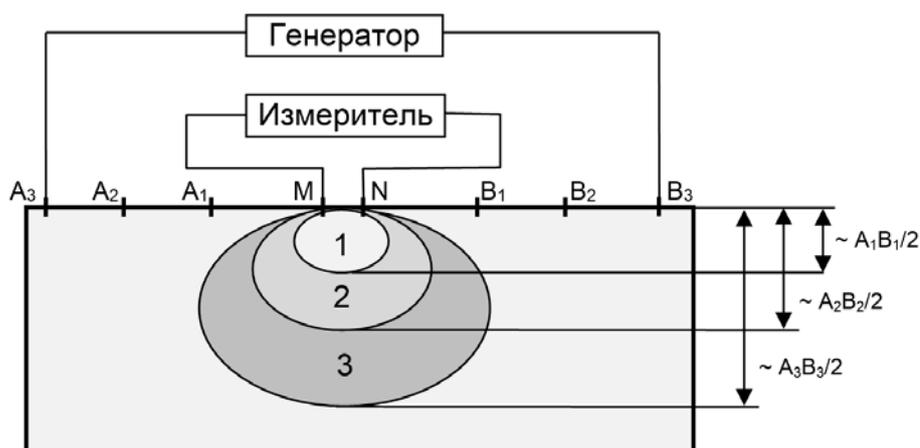


Рис. 2. Процесс зондирования в методе ВЭЗ

Визуализация данных АМС

Для оперативного просмотра информации, измеренной АМС и считанной в компьютер, была разработана программа, имеющая простой, интуитивно понятный интерфейс (рис. 3). После выбора нужного XML файла происходит его обработка, в ходе которой последовательно загружаются название, дата и время проведения измерений, которые будут

отображаться в интерфейсе, а также данные, используемые для построения кривых ВЭЗ и изображения профиля. Для визуализации используются такие данные об участке, как количество пар принимающих электродов, количество разносов на каждой паре, размеры всех использованных разносов и значения кажущегося сопротивления во всех измеренных точках участка (пикетах и профилях).

После загрузки файла строится изображение первого профиля участка и кривая ВЭЗ первого пикета (рис. 3). При построении графика учитывается количество линий MN (принимающих электродов), использующихся в измерениях на данном участке. На графиках применяются логарифмические шкалы для кажущегося сопротивления (ρ_k) и разноса ($AB/2$). Для удобства имеются дополнительные элементы управления, позволяющие для выбранного профиля отображать графики всех пикетов или нескольких в заданном интервале (рис. 4).

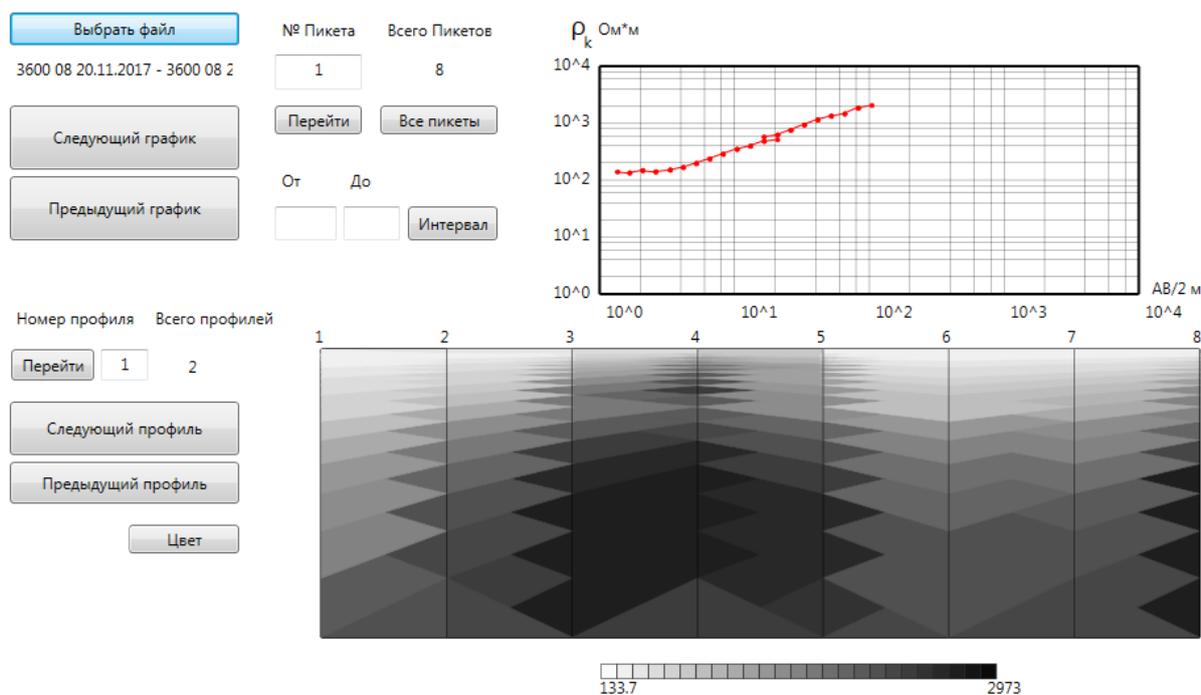


Рис. 3. Интерфейс программы после загрузки файла

Изображение профиля строится в координатах разноса и номера пикета. Для его построения используется вспомогательный массив, в котором для каждой измеренной точки задаётся структура, обладающая значением цвета (определяется относительно максимального ρ_k и варьируется от белого до чёрного для удобства восприятия) и значением разноса, на котором было проведено измерение. Дополнительно реализован режим отображения с цветовой палитрой, аналогичной шкале высот и глубин в картах.

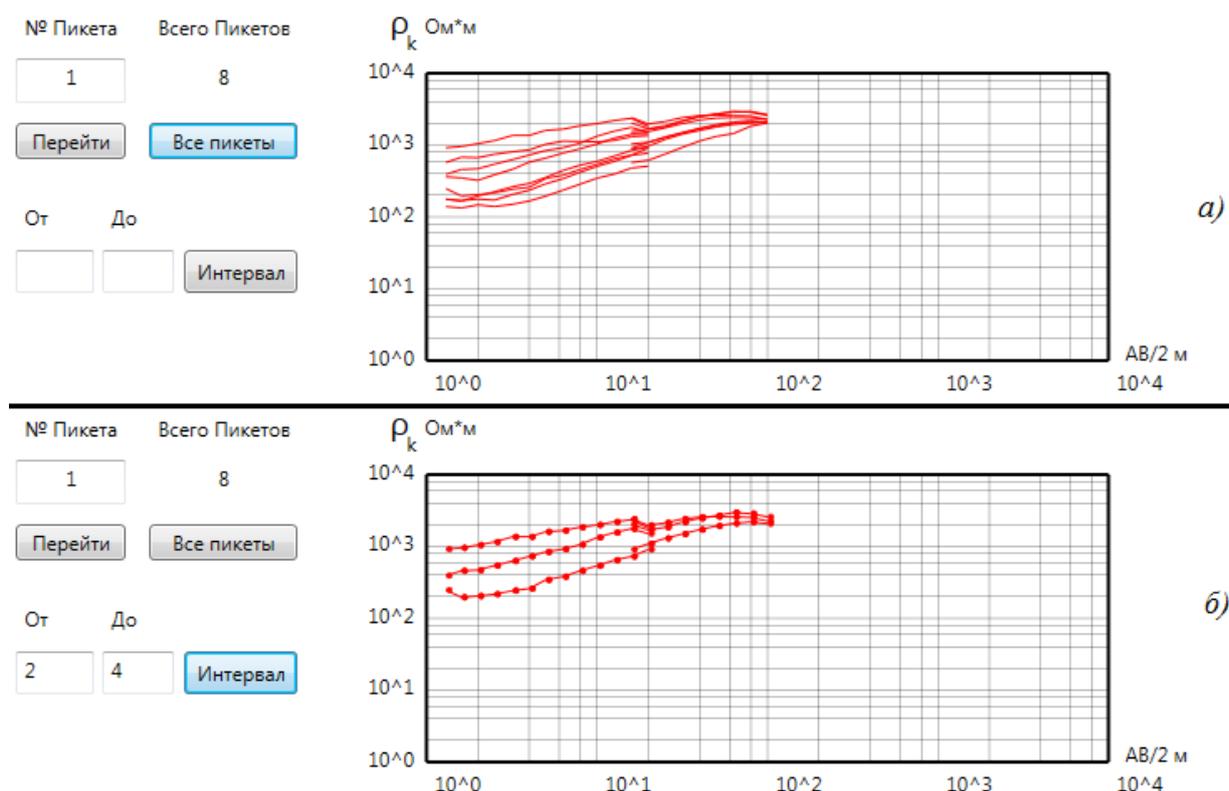


Рис. 4. Область отображения кривых зондирования с использованием дополнительных элементов управления:
 а) отображение всех кривых зондирования
 б) отображение нескольких кривых зондирования

Заключение

В результате работы была создана простая в обращении программа для визуализации данных электроразведки на базе комплекса АМС, визуализирующая данные в удобном для анализа формате. Испытания программы с реальными данными электроразведки были проведены успешно и показали, что программа может использоваться для оперативной проверки данных электроразведки.

Список литературы

1. Патент 97542 Российская Федерация, МПК7: G01V3/02. Аппаратурно-программный комплекс для геоэлектроразведки АМС-1 / Авторы и патентообладатели: Колесников В. П., Алатов С. А., Батяев И. М., Зеленин В. П., Карпов С. Б., Мельников А. К., Татаркин А. В. 10.09.2010.
2. Хасанов Д. И. Введение в электроразведку. Казань: Казанский государственный университет, 2009. С. 53–54.

РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ МАГНИТНОГО ДИПОЛЯ МЕТОДОМ РОЯ ЧАСТИЦ

В. Е. Коротаев, С. В. Машкин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

В данной работе рассматривается использование метода роя частиц для решения обратной задачи для точечного магнитного диполя. Было показано, что данный метод оптимизации позволяет решить задачу, однако точность найденного решения в некоторых случаях может быть низкой.

Ключевые слова: метод роя частиц; обратная задача для магнитного диполя; магнитное компьютерное видение

MAGNETIC DIPOLE INVERSE PROBLEM SOLUTION WITH PARTICLE SWARM OPTIMIZATION ALGORITHM

V. E. Korotaev, V. S. Mashkin

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

In this paper we consider to use particle swarm optimization method to find solution of the magnetic dipole inverse problem. Preliminary results show, that chosen method of numerical optimization allows to solve the problem, but in some cases the accuracy of such a solution may be low.

Keywords: particle swarm optimization; magnetic dipole inverse problem; magnetic computer vision

Обратная задача для источника магнитного поля заключается в том, чтобы найти параметры источника (местоположение, ориентация, мощность) по результатам измерения создаваемого им магнитного поля. Решение обратной задачи для произвольного источника магнитного поля является главной и очень привлекательной целью создания систем магнитного компьютерного видения (СМКВ).

Одно из решений обратной задачи для простейшего случая – случая точечного магнитного диполя, было предложено ранее [1]. В данной задаче магнитное поле измеряется в точках пространства, которые расположены в компактной области, размеры которой меньше расстояния до диполя (рис. 1). Используются следующие обозначения:

- \mathbf{X} – радиус вектор диполя в лабораторной системе отчета
- m – магнитный момент
- \mathbf{r}_a – координаты точек измерения
- \mathbf{B}_a – вектор магнитной индукции, посчитанный в данных точках

Метод роя частиц [2] позволяет решать многомерные оптимизационные задачи. Привлекательным видится его использование и для поиска

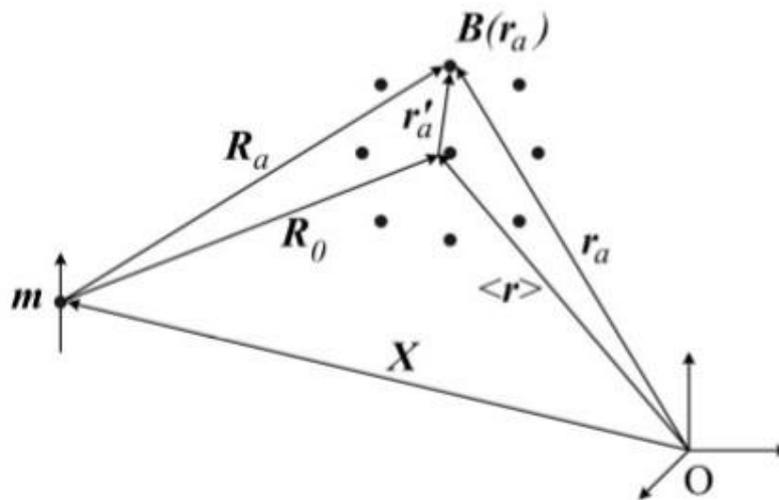


Рис. 1. Схема обратной задачи для точечного диполя

решения рассматриваемой обратной задачи – если окажется возможным решить задачу для простого источника, то, возможно, не будет препятствий и для определения параметров сложного источника поля.

Кратко рассмотрим метод роя частиц. Суть метода заключается в том, что в пространстве решений размещается сразу большое количество частиц, каждая из которых «сообщает» другим значение оптимизируемой функции в той точке, где частица находится в данный момент. Частицы движутся в пространстве решений постепенно, случайно, в сторону наилучшего решения. Ключевая формула, лежащая в основе закона движения частиц, следующая:

$$v_{id}(k+1) = wv_{id}(k) + c_1 \text{rand}_1(p_{id} - x_{id}) + c_2 \text{rand}_2(p_{gd} - x_{id}),$$

где

- $v_{id}(k+1)$ – скорость на следующей итерации;
- w – ускорение;
- $C1$ и $C2$ -коэффициенты ускорения;
 - $C1$ для персонального слагаемого;
 - $C2$ для роевого слагаемого;
- P_i - лучшее значение для частицы;
- P_g – лучшее значение для всего роя;
- rand_1 и rand_2 – вектора случайных чисел с компонентами от 0 до 1.

В результате решения оптимизационной задачи роем частиц будет найдено наилучшее решение P_{best} , которое представляет собой набор значений аргументов, при которых минимизируемая функция достигает минимального значения.

Моделирование решения задачи проводилось нами в среде Matlab. Были заданы ограничения на значения возможного решения задачи – границы области поиска, допустимые значения мощности источника поля.

Параметры области измерения, выбранные для решения данной задачи, приведены в табл. 1.

Табл. 1. Параметры области измерения

Форма	Длина стороны	Кол-во точек
Куб	1	27

В ходе серии решений задачи искомый диполь случайно создавался со значениями параметров из табл. 2. Именно эти значения необходимо было найти в ходе решения обратной задачи.

Табл. 2. Отрезки значений параметров для диполя

	x	y	z	m_x	m_y	m_z
Нижняя граница	12	-8	-8	0	0	0
Верхняя граница	48	8	8	1	1	1

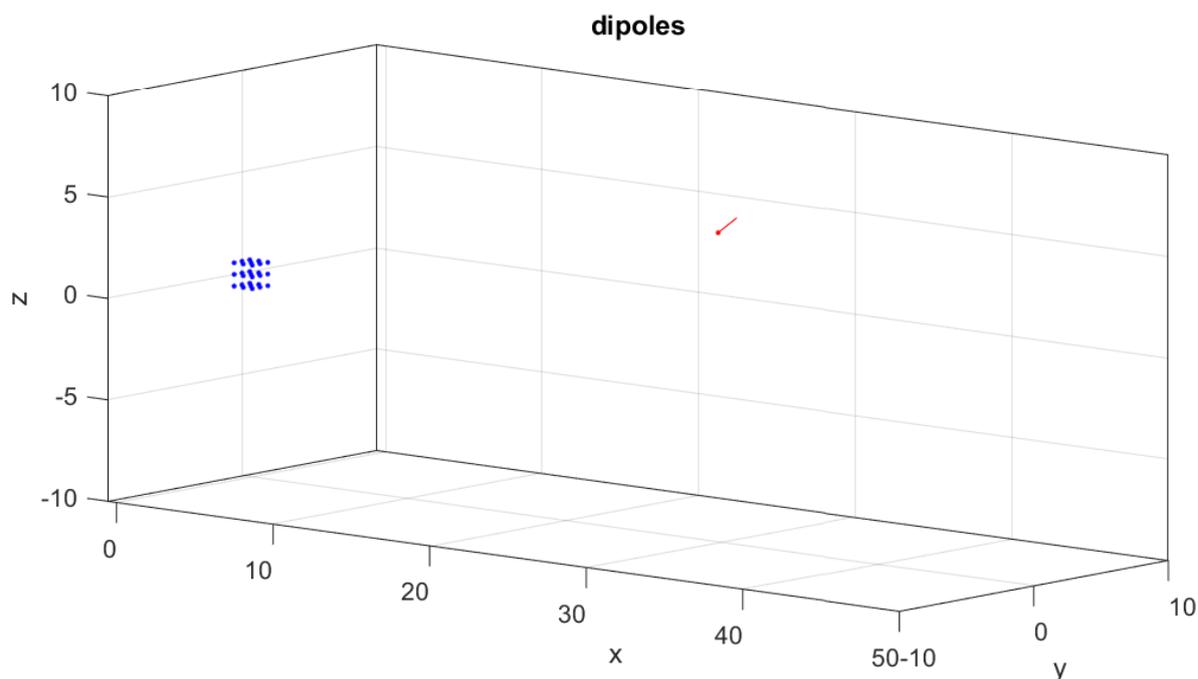


Рис. 2. Область измерения, исходный диполь и точки измерения

Для решения задачи был выбран «классический» алгоритм роя частиц [2]. В качестве оптимизируемой функции была взята суммарная разность векторов индукции магнитного поля, изначально измеренных и вычисляемых на основе решения, найденного на текущей итерации алгоритма PSO.

Табл. 3. Параметры для алгоритма

Количество итераций	Количество частиц	Ускорение	C_1	C_2
3000	100	2	1.5	2.0

Поиск решения для алгоритма осуществлялся в области, данные о которой приведены в табл. 4.

Табл. 4. Параметры для области поиска

	x	y	z	m_x	m_y	m_z
Нижняя граница	10	-10	-10	0	0	0
Верхняя граница	50	10	10	1	1	1

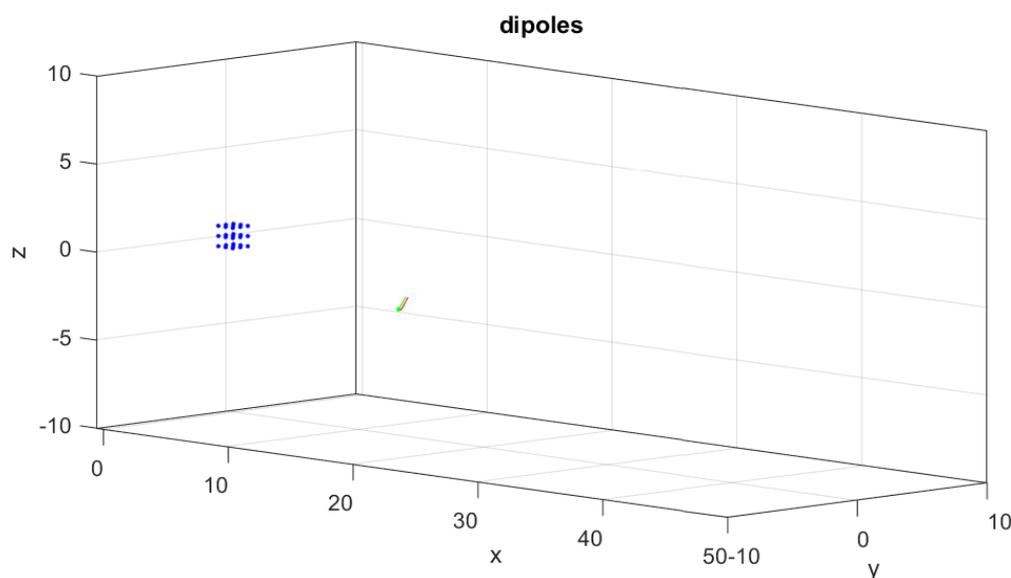


Рис. 3. Область измерения, исходный и новый диполи, точки измерения

В результате серии «бросаний» случайных диполей в заданную область поиска решения мы построили график (рис. 4) зависимости ошибки определения решения от расстояния между исходным диполем и областью измерения. Под ошибкой подразумевается минимальное значение функции, которую мы оптимизируем.

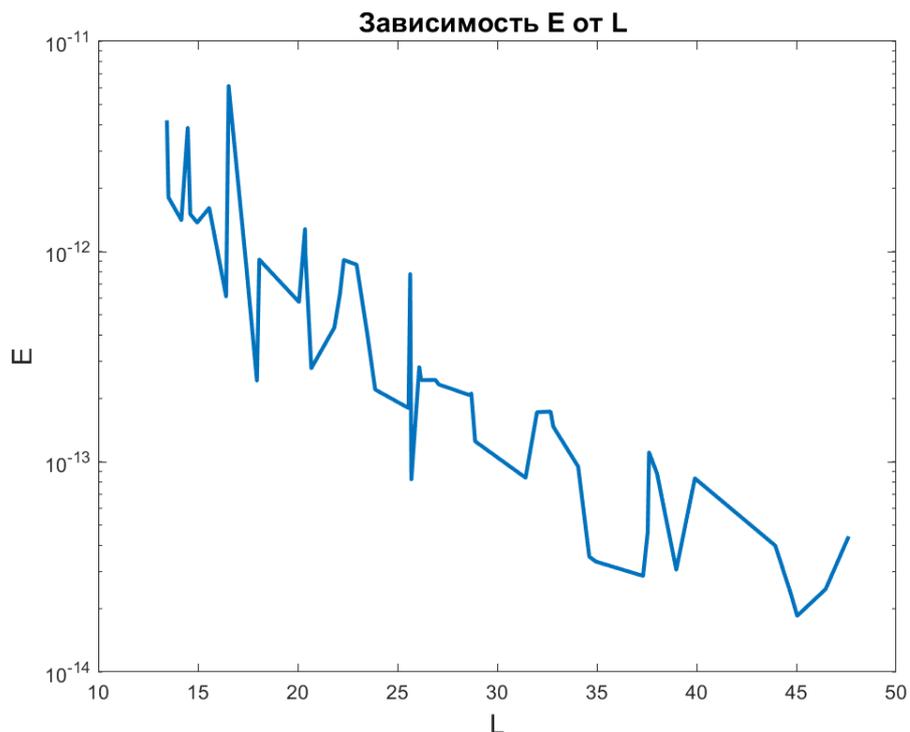


Рис. 4. График зависимости E от L , где L - расстояние между центром области измерения и исходным диполем, E – ошибка вычисления (значение минимизируемой функции)

Из графика можно сделать вывод, что ошибка уменьшается при увеличении расстояния от области измерения.

В ходе выполнения работы выяснилось, что метод роя частиц позволяет решить обратную задачу точечного магнитного диполя, но с некоторой погрешностью. Природу данной погрешности предстоит выяснить в дальнейшем.

Список литературы

1. Марценюк М. А., Машкин С. В. Моделирование системы магнитного компьютерного видения // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2004. Вып. 1. С. 112–128.
2. Kennedy J.; Eberhart R. Particle Swarm Optimization // Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks. Perth, Western Australia, 1995. P. 1942–1948.

МОБИЛЬНОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ ПОД ОС ANDROID ДЛЯ ЧТЕНИЯ ИНФОРМАЦИИ С ДАТЧИКОВ ПО ПРОТОКОЛУ MODBUS

А. И. Муралев

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Статья посвящена разработке универсального приложения под ОС Android, позволяющего читать информацию с датчиков и приборов, имеющих встроенный протокол Modbus. Приведены основные принципы работы с протоколом Modbus и с беспроводной сетью Bluetooth при разработке приложений для ОС Android.

Ключевые слова: Android, Modbus, Bluetooth

MOBILE APPLICATION FOR ANDROID OS FOR READING INFORMATION FROM SENSORS VIA MODBUS PROTOCOL

A. I. Muralev

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The article is devoted to the development of a universal application for Android OS, which allows reading information from sensors and devices that have built-in Modbus protocol. The article focuses on the basic principles of working with the Modbus protocol and the principles of working with Bluetooth when developing applications for Android.

Keywords: Android, Modbus, Bluetooth

Введение

В промышленности широко применяется протокол передачи данных Modbus для обмена информацией с различными датчиками и приборами. Соответственно разработано множество программ для ПК, осуществляющих чтение информации с датчиков и приборов, имеющих данный протокол обмена. Для организации связи нужно иметь с собой как минимум ноутбук, а также кабель для подключения к прибору по линии RS232 или RS485 через COM-порт компьютера или конвертор USB-RS485.

В настоящее время широко распространены смартфоны, с помощью которых также хотелось бы считывать данные с подобных датчиков. Для подключения к прибору можно было бы использовать беспроводную сеть Bluetooth. Данная работа посвящена описанию приложения под операционную систему Android для чтения данных с приборов и датчиков, имеющих встроенный протокол обмена Modbus с помощью встроенного в смартфон модуля Bluetooth.

Разрабатываемое приложение должно удовлетворять следующим требованиям:

- 1) должно быть универсальным, то есть должно позволять считывать данные с любых датчиков и приборов, работающих по протоколу обмена Modbus;
- 2) подключение к приборам должно осуществляться по беспроводной сети Bluetooth;
- 3) должно иметь понятный пользовательский интерфейс;
- 4) считываемые данные должны выводиться на экран смартфона в виде таблиц и графиков.

В настоящий момент не существует ни одного решения, которое удовлетворяло бы поставленным требованиям.

Протокол ModBus

Протокол Modbus является одним из самых популярных протоколов обмена данными с промышленными приборами. Данный протокол основан на архитектуре ведущий – ведомый (master – slave). Широкая распространенность протокола вызвана его простотой и надежностью. Основной особенностью протокола является то, что в сети имеется ведущее устройство, опрашивающее все остальные устройства (ведомые). Ведомое устройство не может самостоятельно инициировать передачу данных. Передача данных состоится только в случае запроса от ведущего устройства. Такой принцип работы называется «запрос – ответ» [1].

Рассмотрим, как выглядят форматы запроса и ответа при чтении параметров. Формат запроса представлен в табл. 1 [2].

Табл. 1. Формат запроса в протоколе Modbus

Адрес	Функция	Начальный регистр		Количество регистров		Контрольная сумма	
		Старший байт	Младший байт	Старший байт	Младший байт	Младший байт	Старший байт

Формат ответа представлен в табл. 2 [2].

Табл. 2. Формат ответа в протоколе Modbus

Адрес	Функция	Количество байт данных	Данные	Контрольная сумма	
				Младший байт	Старший байт
			...		

Адрес прибора обычно берется из руководства по эксплуатации (РЭ) или паспорта прибора. Для чтения и записи данных могут использоваться следующие функции [3]:

- 1 (0x01) – чтение значений из нескольких регистров флагов (ReadCoilStatus);
- 2 (0x02) – чтение значений из нескольких дискретных входов (ReadDiscreteInputs);
- 3 (0x03) – чтение значений из нескольких регистров хранения (ReadHoldingRegisters);
- 4 (0x04) – чтение значений из нескольких регистров ввода (ReadInputRegisters);
- 5 (0x05) – запись значения одного флага (ForceSingleCoil);
- 6 (0x06) – запись значения в один регистр хранения (PresetSingleRegister);
- 15 (0x0F) – запись значений в несколько регистров флагов (ForceMultipleCoils);
- 16 (0x10) – запись значений в несколько регистров хранения (PresetMultipleRegisters).

Начальный регистр в запросе также определяется из РЭ или паспорта прибора в зависимости от того, какой параметр необходимо считать с прибора. Количество регистров определяется типом передаваемого значения. Чаще всего информация передается в формате float (число с плавающей точкой), которое занимает 4 байта, а следовательно, 2 регистра. Кроме того, в разных приборах в зависимости от разработчика порядок следования байт может отличаться. Для подсчета контрольной суммы в протоколе Modbus используется стандартная функция CRC16.

Организация работы с модулем Bluetooth

Для того чтобы разрешить приложению использовать функции Bluetooth, необходимо в файле манифеста при разработке внести следующие изменения [4]:

```
<manifest... >
<uses-permissionandroid:name="android.permission.BLUETOOTH"
/>
<uses-permission
android:name="android.permission.BLUETOOTH_ADMIN" />
</manifest>
```

На первом шаге необходимо проверить наличие и доступность Bluetooth-модуля и убедиться, что он включен. После этого начинается поиск устройств. Поиск устройств – это процедура сканирования, которая ищет устройства с поддержкой Bluetooth в зоне видимости и запрашивает некоторую информацию о них. Однако не все устройства, находящиеся в зоне обнаружения, отвечают на запрос. Для того чтобы устройство было обнаружено, оно должно находиться в режиме Discoverable. Если

устройство находится в этом режиме, то на запрос обнаружения оно предоставляет информацию о себе (имя устройства и его уникальный MAC-адрес). Зная эти параметры, устройство, выполнявшее сканирование, может затем инициировать соединение. Затем устройство проверяет, происходило ли до этого сопряжение. Если устройства подключаются впервые, то появляется запрос на сопряжение. И только после этого происходит подключение между устройствами. Таким образом, быть сопряженным и быть подключенным означает разное:

- сопряжение означает, что устройства знают друг о друге, имеют ключ связи для установления зашифрованного соединения и способны устанавливать соединение друг с другом;
- соединение означает, что устройства в настоящий момент совместно используют RFCOMM канал и могут передавать данные друг другу.

Работа приложения

Внешний вид приложения представлен на рис. 1а. После подключения к нужному датчику или прибору пользователю необходимо задать название считываемого параметра, его единицы измерения, а также период времени, через который необходимо проводить снятие показаний.

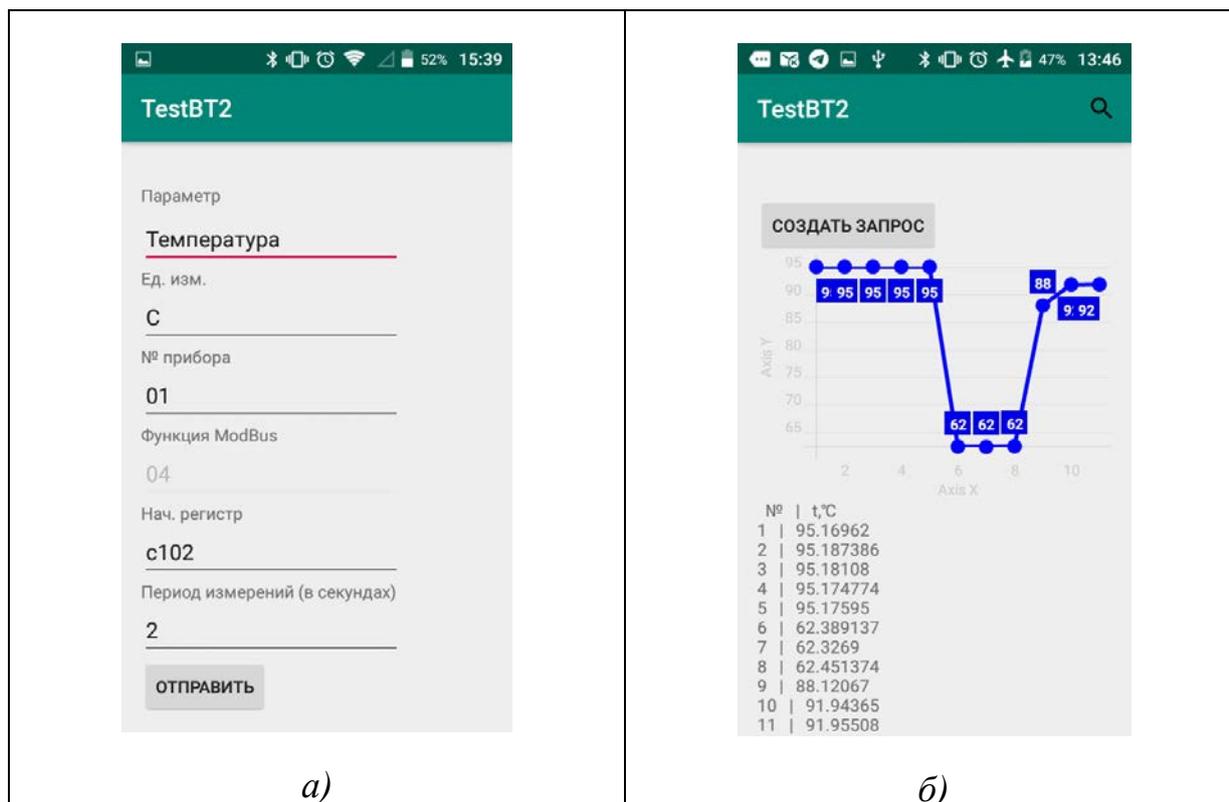


Рис. 1. Внешний вид приложения:

а) окно ввода параметров; б) окно вывода считанных значений

Далее необходимо задать параметры Modbus запроса, на основе которых формируется запрос датчику: адрес Modbus, функция, начальный

регистр. После запуска измерений приложение посылает сформированный запрос датчику и ждет от него ответ, который необходимо расшифровать и выделить из него нужные нам данные. При отсутствии ответа выдается соответствующее сообщение.

Полученные значения заносятся в таблицу и на график. Процесс измерений повторяется с заданным периодом. Внешний вид вывода считанных значений представлен на рис. 1б. Графики строятся с помощью библиотеки helloCharts [5].

Заключение

Разработанное приложение было протестировано на приборах ИМ2300 производства ОКБ «Маяк». Данные приборы могут измерять и вычислять несколько физических величин, информация о которых хранится в соответствующих каналах прибора. Во время проверки работоспособности программы были опробованы разные каналы, для чего задавались различные значения начального регистра (они брались из паспорта прибора). На рис. 1б приведены результаты чтения канала прибора, отвечающего за измерение температуры.

Тестирование показало, что данное приложение можно использовать для чтения текущих значений параметров любых датчиков и приборов, имеющих встроенный протокол Modbus.

Список литературы

1. Modbus [Электронный ресурс]. URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Modbus> (дата обращения: 20.06.2019).
2. Теплоэнергоконтроллер ИМ2300. Руководство по эксплуатации. 2017. 55 с.
3. Описание протокола Modbus [Электронный ресурс]. URL: <http://onitex.ru/modbus-protokol> (дата обращения: 21.06.2019).
4. Bluetooth overview [Электронный ресурс]. URL: <https://developer.android.com/guide/topics/connectivity/bluetooth> (дата обращения: 15.06.2019).
5. Charts/graphs library for Android compatible with API 8+, several chart types with support for scaling, scrolling and animations [Электронный ресурс]. URL: <https://github.com/lecho/hellocharts-android> (дата обращения: 17.06.2019).

ФИЛЬТРАЦИЯ ВРЕМЕННЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ГЕОЛОКАЦИОННЫХ ДАННЫХ

М. В. Никулин, И. П. Селетков

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

В статье рассмотрена проблема нахождения отклонений и ошибок в геолокационных данных, вызванных помехами и проблемами со спутниковой и сотовой связью. Для решения этой задачи рассмотрены несколько методов фильтрации. Показано, что наиболее эффективно фильтрацию осуществляет фильтр с использованием нейронной сети.

Ключевые слова: Фильтрация геолокационных данных; Python

THE FILTERING OF THE TIME SEQUENCES OF GEOLOCATION DATA

M. V. Nikulin, I. P. Seletkov

Perm State University, Bukirev St. 15, 614990 Perm

The article deals with the problem of finding deviations and errors in geolocation data caused by interference and problems with satellite and cellular communications. To solve this problem, several filtering methods are considered. The article shows that a neural network filter produces the most efficient filtering results.

Keywords: Filtering location-based data; Python

Для контроля работы сотрудников на пространственнораспределённых предприятиях можно собирать и анализировать геолокационные данные из их мобильных АРМов. Но в случае плохой связи со спутниками или с сетями мобильных операторов в последовательностях координат могут возникать «выбросы» – последовательности некорректных данных длиной от 1 до 5–10 шагов по времени. Такие данные необходимо отфильтровывать или, по возможности, заменить для повышения качества аналитических отчётов.

Характер движения может варьироваться в зависимости от специфики конкретного предприятия, но в большинстве случаев обходчики могут перемещаться от объекта к объекту пешком или на транспорте, и долго находиться на одном месте во время обслуживания объекта или на отдыхе.

Геолокационные данные представляют собой последовательности кортежей вида (широта, долгота, время), что позволяет с учётом законов физики движения тел выявить, какие данные являются ложными и убрать их из общего множества. Усложняет задачу тот факт, что временные интервалы не фиксированы и могут быть очень большими (за это время человек может проехать большое расстояние на транспорте), что не позволяет использовать физику движения напрямую.

Пример изменения долготы и широты мобильного устройства с течением времени показан на рис. 1.

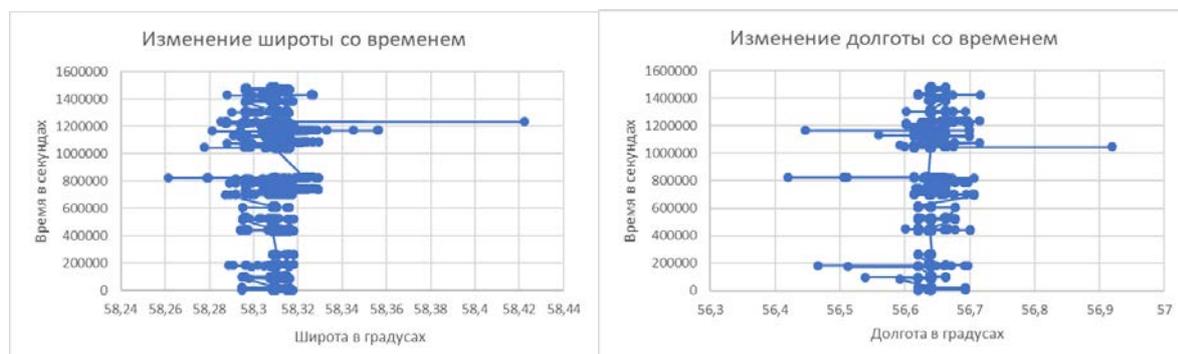


Рис. 1. Изменение широты (слева) и долготы (справа) в зависимости от времени

В качестве мобильных АРМов обходчиков используются мобильные телефоны или планшеты. В современных устройствах есть 2 механизма сбора данных о положении: спутниковые приёмники (GPS/GNSS) и инерционные датчики.

Преимущество спутникового позиционирования – погрешности измерений не аддитивны, то есть не накапливаются со временем: на новое измерение не влияет то, сколько измерений было до этого и с какими погрешностями.

Недостаток же в том, что в случае плохой видимости спутников при попытке частого получения координат существенно возрастает потребление электроэнергии и, как следствие, снижается максимальная продолжительность эксплуатации устройств на одном заряде батареи. Если же запрашивать координаты редко, тогда снижается применимость законов движения для фильтрации, из данных сложнее убрать шумы.

Инерционные датчики в смартфонах позволяют измерить линейные (акселерометр) и центростремительные (гироскоп) ускорения. Такие измерения могут быть произведены достаточно часто и являются очень точными, но из-за того, что нет привязки к координатам, их результаты приходится интегрировать по времени, что приводит к накоплению ошибки.

Использование одновременно как данных GPS/GNSS, так и показаний инерционных датчиков телефона позволит получить наиболее точное расположение устройства, но приведёт к очень высокому энергопотреблению и невозможности эксплуатации устройства в таком режиме достаточно для проведения обходов время. В результате принято решение о использовании только данных со спутниковых систем и поиске метода интеллектуальной фильтрации.

Для фильтрации временных последовательностей существует большое количество различных методов, в частности фильтр Калмана, скользящая средняя, многочастичный фильтр, фильтрация с помощью нейросети и т.д.

Фильтр Калмана – рекурсивный фильтр, оценивающий изменение вектора состояния динамической системы на соответствие априорно заданной матрице преобразований, характеризующей теоретическое поведение системы [1].

Реализация фильтра для данной задачи произведена следующим образом. Так как движение происходит на поверхности земли, то взяты 2 составляющие скорости (по координате x и y), движение считалось без ускорения, скорость считалась как отношение расстояния между соседними координатами к изменению времени. Расчёт расстояния для географических координат производится по формуле гаверсинусов [2].

Для движения автомобиля было выбрано равномерное движение плюс небольшая добавка из-за погрешности нашей модели. Система для нашего случая имеет вид (1). Вектор состояния содержит значения координат по X и Y , а управляющий вектор содержит две составляющие скорости.

$$\begin{cases} X_n = X_{n-1} + V_{xn-1} * dt + \xi_x, \\ Y_n = Y_{n-1} + V_{yn-1} * dt + \xi_y, \\ Z_x = X_n + \eta_x, \\ Z_y = Y_n + \eta_y, \end{cases} \quad (1)$$

(где Z_x и Z_y координаты полученные датчиком, ξ_x и ξ_y ошибка датчика, η_x и η_y ошибка системы).

Такой фильтр хорошо справился с обработкой координат равномерного движения, но не смог отфильтровать изменение характера движения – остановку на объекте после быстрого перемещения.

Скользящая средняя – значения результирующей функции в каждой точке определения равны среднему значению исходной функции за предыдущий период [3]. В качестве величины была выбрана скорость, которая считалась аналогично предыдущему случаю. Единственная сложность при построении данного фильтра – выбор правильного размера окна наблюдения, который влияет на рассчитываемое среднее значение. Решение о фильтрации принимается при сравнении средней скорости по окну со значением мгновенной скорости в данной точке с учётом допустимого интервала.

Такой фильтр плохо справлялся с фильтрацией, так как любое большое отклонение влияет на среднюю, но зато является самым «быстрым» среди рассмотренных.

Если брать вместо средней медиану (**медианный фильтр** [4]), то опять же возникает проблема размера окна в случае длительных по времени «выбросов». Оно должно быть больше чем в 2 раза больше, чем длительность максимального «выброса». В данном случае, около 20 шагов по времени. Использование такого большого окна для обработки корректных данных приводит к удалению нужных данных.

Ещё один вариант фильтрации – применение **метода роя частиц** [5] – создание большого количества частиц, которые пытаются повторить движе-

ние объекта. Если в некоторой области вокруг точки, полученной с датчика, окажется достаточное количество частиц, то такую точку можно считать правильной.

В данном фильтре чем больше частиц, тем больше точность, но меньше быстродействие. Рассматривалось равномерное движение в направлении к точке, которую фильтр проверял на выброс, с небольшим отклонением $\pm 5^\circ$.

Частицы генерировались случайно в радиусе равном 0,1 от дистанции между точками. Для того чтобы определять выброс или нет каждой частице присваивался вес, пропорциональный $1/r$, где r расстояние от частицы до рассматриваемой точки (сумма весов у частиц равно 1). После движения веса частиц суммировались. Если сумма весов достигала определённого значения, то такая точка считалась «хорошей» (веса частиц вне радиуса 0,1 дистанции становились равны нулю).

Такой фильтр не смог отфильтровать разнородное движение и отличался самым долгим временем работы в сравнении с остальными методами.

Последний вариант рассмотрения в качестве фильтра – **нейронная сеть**. Рассмотрены две наиболее подходящие архитектуры нейросети: полносвязная и рекуррентная с использованием LSTM слоёв [6].

Изначально сделана попытка, чтобы за один проход нейросети обрабатывалось как можно больше точек. На вход подавался вектор, имеющий размерность (6, 10) (подавались параметры: долгота, широта, разность по времени между точками, дистанция между точками, скорость по x и y для 10 точек), на выходе сеть давала вектор с 10 числами (необходимость удаления для каждой точки). С такими параметрами ни та не другая сеть не смогли выявить закономерности и считали, что все точки являются выбросами.

Что бы улучшить результат было решено уменьшить входной и выходной векторы и обрабатывать точки скользящим окном. Новые архитектуры нейросетей принимали на вход вектор уже не из 10 точек, а только из 5 и отвечали на вопрос, является ли 3 точка выбросом. Полносвязная нейросеть показала лучший результат по сравнению с рекуррентной (53% на тестовой выборке), поэтому для дальнейшего развития было решено выбрать полностью полносвязную нейросеть.

Далее, чтобы улучшить показатель, проведен анализ и добавлены новые параметры для точек: косинус для величин с циклическим изменением и натуральный логарифм в случае отличия значений величин на порядок. Финальная нейросеть принимала на вход вектор из 60 значений: первые 55 значений состояли из различных параметров 5 точек, остальные - средние значения некоторых из этих параметров. Обучающая выборка была сбалансирована: выбросов было 40% от всех данных. Размер выборки - 26000 записей о координатах. Полученная точность 83%, рассчитана по формуле 2.

$$Acc = \frac{tp+fp}{tp+fp+tn+fn} \quad (2)$$

(где Acc точность, tp правильно отмеченные выбросы, fp правильно отмеченные точки без выбросов, tn точки в которых классификатор ошибся отметив отметил как выбросы, fn точки в которых классификатор ошибся посчитав «хорошими» точками). Пример работы полученного фильтра показан на рис. 2.



*Рис. 2. Пример работы нейросети
(овалами отмечены выбросы, которые нашла нейросеть)*

В заключение можно сказать, что наиболее точное решение получились при фильтрации с помощью нейронной сети. Скорость расчёта оказалась не много ниже фильтра Калмана, но существенно выше использования роя частиц. Все фильтры реализованы на языке python. Нейросети сделаны с использованием библиотеки keras [7]. Полученный фильтр использован при разработке микросервисов для фильтрации геолокационных данных и готов к внедрению в существующие информационные системы.

Список литературы

1. Фильтр Калмана [Электронный ресурс]. Page Version ID: 99344638. URL: https://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=%D0%A4%D0%B8%D0%B%D1%8C%D1%82%D1%80_%D0%9A%D0%B0%D0%BB%D0%BC%D0%B0%D0%BD%D0%B0&oldid=99344638 (дата обращения: 30.06.2019).
2. Расчет расстояний между городами по их координатам – Программирование. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.kobzarev.com/programming/calculation-of-distances-between-cities-on-their-coordinates/> (дата обращения: 30.06.2019).
3. Скользящая средняя [Электронный ресурс]. Page Version ID: 92748052. URL: https://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=%D0%A1%D0%BA%D0%BE%D0%BB%D1%8C%D0%B7%D1%8F%D1%89%D0%B0%D1%8F_%D1%81%D1%80%D0%B5%D0%B4%D0%BD%D1%8F%D1%8F&oldid=92748052 (дата обращения: 30.06.2019).
4. Медианный фильтр [Электронный ресурс]. Page Version ID: 94206653. URL: https://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=%D0%9C%D0%B5%D0%B4%D0%B8%D0%B0%D0%BD%D0%BD%D1%8B%D0%B9_%D1%84%D0

- [%B8%D0%BB%D1%8C%D1%82%D1%80&oldid=94206653](https://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=%D0%B8%D0%BB%D1%8C%D1%82%D1%80&oldid=94206653) (дата обращения: 30.06.2019).
5. Метод роя частиц [Электронный ресурс]. Page Version ID: 98891871. URL: https://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4_%D1%80%D0%BE%D1%8F_%D1%87%D0%B0%D1%81%D1%82%D0%B8%D1%86&oldid=98891871 (дата обращения: 30.06.2019).
6. Долгая краткосрочная память [Электронный ресурс]. Page Version ID: 99375481. URL: https://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=%D0%94%D0%BE%D0%BB%D0%B3%D0%B0%D1%8F_%D0%BA%D1%80%D0%B0%D1%82%D0%BA%D0%BE%D1%81%D1%80%D0%BE%D1%87%D0%BD%D0%B0%D1%8F_%D0%BF%D0%B0%D0%BC%D1%8F%D1%82%D1%8C&oldid=99375481 (дата обращения: 30.06.2019).
7. Home – Keras Documentation [Электронный ресурс]. URL: <https://keras.io/> (дата обращения: 30.06.2019).

СИСТЕМА ФОРМИРОВАНИЯ СВЕТОВОГО И ЗВУКОВОГО СОПРОВОЖДЕНИЯ ДЛЯ РЕЛАКСАЦИИ ЧЕЛОВЕКА

Р. М. Ханнанов, В. Б. Поляков

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Описана система, использующая методы световой и звуковой терапии для релаксации человека. Рассмотрена техническая реализация такой системы и устройства управления на микроконтроллере STM32F407. Также предлагаются возможные варианты развития системы.

Ключевые слова: релаксация; свет; цвет; звук; микроконтроллеры

SOUND AND LIGHT FORMATION SYSTEM FOR MAN RELAXATION

R. M. Hannanov, V. B. Polyakov

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The system using methods of light and sound therapy for human relaxation is described. The technical implementation of such a system and control device on the STM32F407 microcontroller is considered. It also offers possible options for the development of the system.

Keywords: relaxation; light; color; sound; microcontrollers

Интенсивные физические или эмоциональные нагрузки, которым подвержены люди в современном мире нередко приводят к стрессам, что снижает работоспособность человека, не говоря уже о его пагубном влиянии на здоровье. Чтобы снять эмоциональное напряжение часто используют различные методы релаксации: дыхательные техники, аутотренинг, визуализация и другие. При их комбинации возникает синергетический эффект [1]. Восстановительные сеансы проводятся в релаксационной комнате. Релаксационная комната представляет собой место, в котором для любого человека могут быть применены несколько подходящих для него методов релаксации. Поскольку не каждый метод может в нужной степени повлиять на состояние пациента, необходимо иметь как можно более широкий спектр различных методов релаксации. В [2] авторами был предложен прототип системы для релаксационной комнаты, которая позволяет использовать релаксационные методики, основанные на аудио и визуальных эффектах. В системе использовалось устройство управления на базе платформы Arduino, которое выполняло возложенные на него функции, но имело существенный недостаток: оно являлось лишь дополнительной подсистемой, а основную работу выполнял персональный компьютер (ПК). Устройство формировало

световые эффекты, но при этом анализ композиций позволял лишь отличать одни аудиокomпозиции от других.

Кроме того, опыт эксплуатации первого варианта системы [2] показал, что использование ПК для непосредственного управления звуком и светом не всегда удобно: при подготовке системы к работе требуется значительное время (загрузка компьютера, запуск приложения); большое число проводных соединений между элементами системы и т.д. Данные обстоятельства потребовали изменения технического решения системы. В частности, функция воспроизведения аудиофайлов была перенесена на управляющее устройство, что потребовало использовать более производительный микроконтроллер – STM32F407.

Подобный переход дал ряд преимуществ:

- теперь устройство само воспроизводит музыку, которую пользователь записал на флеш-носитель;

- анализ композиций проводится в специальном приложении на компьютере, где пользователь может сконфигурировать светосопровождение так, как ему нужно;

- разрядность ШИМ в STM32 – 16 бит, что даёт 65536 возможных оттенков одного цветового канала, а в Arduino – 8 бит или 256 возможных оттенков, что позволяет делать цветовые переходы более плавно.

Цель данной работы – спроектировать и разработать систему, которая смогла бы оказывать релаксирующее воздействие на человека, используя комплекс мероприятий светового и звукового сопровождения, направленных на психоэмоциональную разгрузку человека.

Для достижения поставленной цели в данной работе рассматриваются след-

- подбор подходящей музыки и выделение в ней нужных параметров, с целью построения соответствующего светового сопровождения;

- формирование светового сопровождения;

- построение системы на базе микроконтроллера STM32, которая будет оказывать релаксирующее воздействие в соответствии с поставленной целью.

Для решения первой задачи было проанализировано множество музыкальных композиций для релаксации, природных шумов и их комбинаций. В качестве параметров, характеризующих каждую композицию, были выбраны темп песни, наличие резких перепадов по громкости, а также наличие различных природных шумов: звуки костра, дождя, ветра и т.д.

Вторая задача была подробно разобрана в статье [2]. Основная информация, полученная в ходе решения данной задачи – зависимость влияния различных цветов на психоэмоциональное состояние человека в зависимости от расположения источника света. Именно эти зависимости заложены в принцип формирования светосопровождения системой.

Третья задача заключается в технической реализации результатов первых двух задач. Структурная схема разработанного устройства представле-

на на рис. 1. Некоторые блоки данного устройства были полностью перенесены из предыдущей версии устройства. Блок индикации A1 предназначен для вывода информации об имеющихся в памяти музыкальных композициях и реализован на жидкокристаллическом символьном индикаторе, связанном с платой STM32VLDISCOVERY через интерфейс I2C. Обновление информации на дисплее происходит каждый раз при нажатии на кнопки блока управления A4. Устройство воспроизведения A2 отвечает за воспроизведение музыки и может представлять собой различные устройства: акустические колонки, наушники и др. Подключение A2 к плате A5 выполняется через линейный аудио выход. Светодиодная RGB-лента A3 используется для светового сопровождения воспроизводимой аудиоинформации и подключается к плате A5 через блок силовых ключей A6 и порты ввода-вывода. Блок управления A4 вместе с блоком индикации A1 реализует интерфейс пользователя. Кнопки play/stop, up, down подключаются к трём выводам портов ввода-вывода и используются для воспроизведения/остановки и выбора музыкальной композиции, находящейся на flash-накопителе. Процессорный блок A5 выполнен на отладочной плате STM32VLDISCOVERY и обрабатывает нажатия кнопок, передаёт информацию для вывода на индикатор, читает данные с flash-носителя, выводит аудио поток на блок A2 и формирует последовательность данных для блока A3. Блок силовых ключей A6 используется для управления светодиодной лентой и построен на биполярных транзисторах, используемых в ключевом режиме. Flash-накопитель A7 подключается к плате A5 через USB-интерфейс и используется для хранения файлов, используемых в системе.

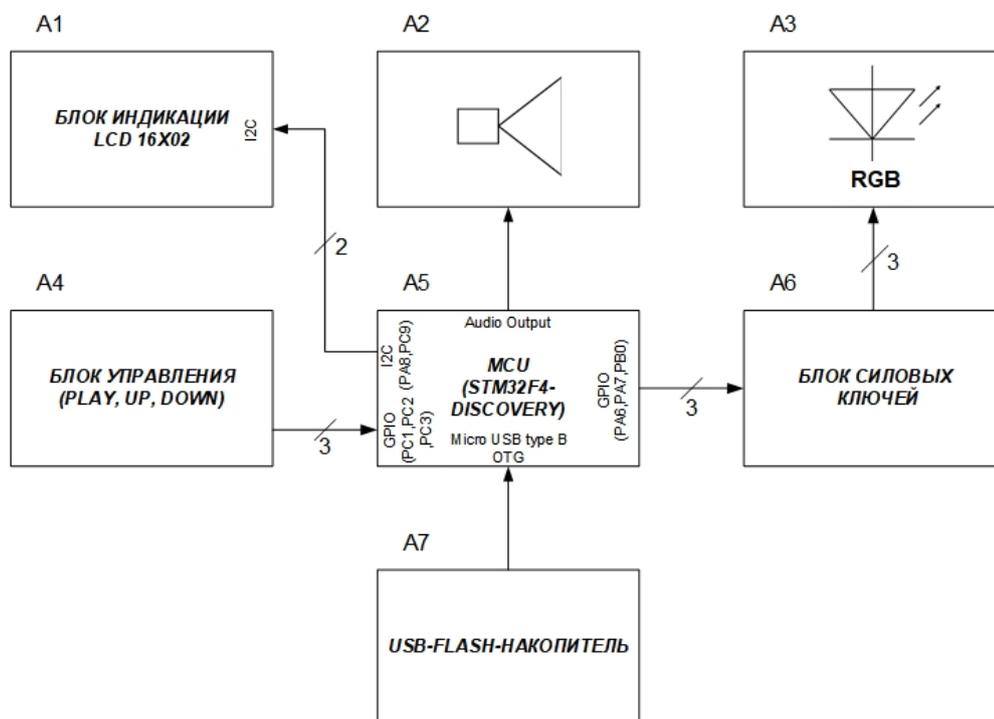


Рис. 1. Структурная схема системы управления сенсорной комнаты

Для работы системы необходимо предварительно подготовить с помощью специального приложения на ПК информацию для flash-накопителя: для каждого аудио файла создаётся файл с метаданными о темпе музыки, наличии или отсутствии резких переходов, присутствии природных шумов. Оба файла – аудио файл и файл метаданных - должны быть записаны на flash-накопитель. Таким образом подготовленный flash-накопитель через USB интерфейс подключается к системе. При включении системы происходит её инициализация и чтение файлов с flash-накопителя А7, при этом названия файлов заносится в массив. Затем, названия файлов выводятся на блок индикации А1, и пользователь при помощи кнопок блока управления А4 может выбрать нужный файл. При нажатии на кнопку play, начинается воспроизведение музыки, а на основе метаданных формируется световое сопровождение. В процессе воспроизведения пользователь имеет возможность выбрать другую музыкальную композицию.

В настоящее время система управления для релаксационной сенсорной комнаты находится в опытной эксплуатации. Имеется возможность расширения функциональных возможностей системы за счёт интеграции в систему интернет вещей. Для этого можно использовать интерфейс RMP или UART микроконтроллера STM32F407. Использование интерфейса RMP позволяет реализовать Ethernet подключение. Интерфейс UART рассматривается как вариант управления через ИК-канал с помощью пульта дистанционного управления или через универсальный шлюз [3].

Список литературы

1. *Марина И. Е.* Сеанс релаксации как технология оказания профессиональной психологической помощи // Вестник Челябинского государственного университета. 2013. № 6. С. 116–122.
2. *Ханнанов Р. М., Поляков В. Б.* Система управления для релаксационной сенсорной комнаты // Физика для Пермского края: материалы региональной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Пермь, 2018. Вып. 11. С. 196–199.
3. *Крупинин М. А., Поляков В. Б.* Универсальный шлюз IoT. // Физика для Пермского края: материалы региональной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Пермь, 2016. Вып. 9. С. 134–137.

СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ ВЫЧИТАНИЯ ФОНА, ПОСТРОЕННЫХ НА ОСНОВЕ СМЕСИ ГАУССИАН (MOG) И УСТОЙЧИВЫХ К ДРОЖАНИЮ КАМЕРЫ

Я. Е. Чеурин, С. В. Машкин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

При обнаружении объектов переднего плана в системах компьютерного зрения часто используется метод вычитания фона, построенный на основе смеси гауссиан (MoG). Классическая версия этого детектора обладает рядом недостатков, одним из которых является чувствительность к дрожанию камеры. В данной работе представлены результаты сравнения нескольких современных усовершенствованных версий данного метода, лишённых указанного недостатка.

Ключевые слова: смесь гауссиан; детектор движения; дрожание камеры

COMPARISON OF MODERN MOG-BASED BACKGROUND SUBTRACTION METHODS, WHICH ARE RESISTANT TO CAMERA JITTER

Y. E. Cheurin, S. V. Mashkin

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

In this paper we compare classical foreground detector, based on Mixture of Gaussians background model subtraction (MoG), with improved ones: Fuzzy Mixture of Gaussians (FMOG) and Stabilized video MoG (Stab+MoG). These detectors minimize influence of camera jitter. The estimation of the accuracy of the considered algorithms is obtained.

Keywords: mixture of gaussian; motion detection; camera jitter

Выделение объектов переднего плана в видео-поток является одной из основных и важнейших задач в видеонаблюдении, мониторинга и анализа, обнаружения и слежения объектов. Чаще всего под объектами переднего плана рассматривают движущиеся объекты, а задачу решают путём идентификации модели фона и вычитания её из каждого кадра видео [1, 3].

Есть несколько задач, которые хороший алгоритм вычитания фона должен решать правильно. Рассмотрим видеозапись со стационарной камеры уличного видеонаблюдения [1–3].

- Алгоритм вычитания фона должен иметь невысокие требования к вычислительной мощности и памяти;
- алгоритм вычитания фона должен адаптироваться к различным изменениям уровня освещённости в течение суток, справляться с различными шумами, такими как туман, дождь или снег;

- модель фона должна быть выбрана таким образом, чтобы детектор адекватно реагировал на быстрые изменения: такие как внезапное начало движения автомобилей;
- детектор не должен срабатывать на тени и засветки, создаваемые движущимися объектами;
- детектор не должен быть чувствительным к небольшим колебаниям камеры.

Широко известная библиотека компьютерного зрения OpenCV содержит как «классический» MoG детектор, так и его усовершенствованный вариант MoG2, который при адекватной настройке успешно справляется с тенями и засветками. Однако в библиотеке OpenCV пока нет реализации детектора, который справляется с небольшими колебаниями камеры. Целью данной работы является исследование и сравнение усовершенствованных MoG-детекторов, пытающихся преодолеть проблему дрожания стационарной камеры.

В работе будут рассмотрены такие методы как:

- MOG – Mixture of Gaussians, модель смеси распределений Гаусса (в пространстве RGB);
- Stab+MOG – модель смеси распределений Гаусса (в пространстве RGB) + предобработка – стабилизация видео;
- FMOG – Fuzzy Mixture of Gaussians, модель нечеткой смеси распределений Гаусса (в одномерном пространстве Gray).

MOG

Алгоритм, основанный на использовании модели смеси Гауссовых распределений (Mixture of Gaussians, MOG), предложили Stauffer и Grimson [2].

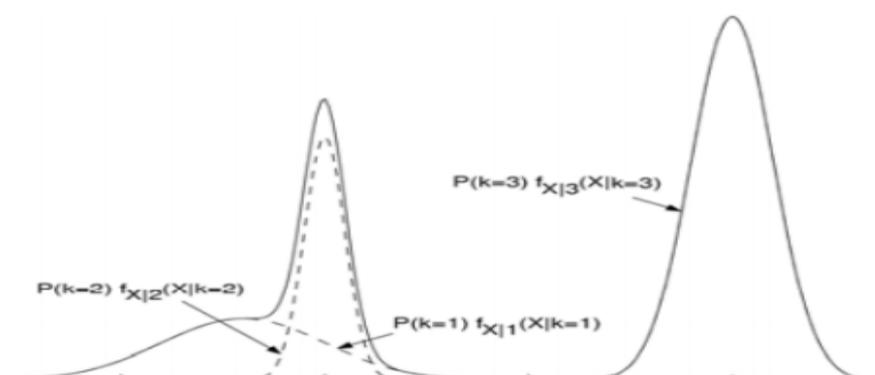


Рис. 1. Пример смеси распределений Гаусса

В этом алгоритме распределение интенсивностей каждого пикселя моделируется смесью K Гауссовых распределений. Обычно на практике значение K варьируется от 3 до 5. При $K < 3$ алгоритм не так эффективен, так как он не может адаптироваться к сложным средам. Если же $K > 5$, то вычислительные затраты увеличиваются в несколько раз. Также стоит

отметить, что модель фона основана исключительно на предыдущих кадрах видеозаписи. Пример смеси гауссиан представлен на рис. 1.

Stab+MOG

Данный метод борется с дрожанием камеры посредством того, что исходный видеопоток сначала стабилизируется (для чего мы использовали библиотеку VidStab), а лишь потом кадры передаются на вход алгоритма MoG.

FMOG

Данный метод [3] учитывает помехи, как связанные с дрожанием камеры, так и со сложным динамическим фоном (качание деревьев, снег, отражения от воды и т.д.). Он базируется на нечётких Гауссовых смесях, компоненты вектора среднего которых вместо определённого значения, ранее $\mu^k = [\mu_R^k, \mu_G^k, \mu_B^k]$, принимают диапазон значений $\mu_R^k \in [\underline{\mu}_R^k, \overline{\mu}_R^k]$, и $\tilde{\mu}$ называют неопределённым вектором среднего значения. При этом функция плотности многомерного нормального распределения $N(X, \tilde{\mu}, \Sigma)$ выражается следующей формулой:

$$N(X, \tilde{\mu}, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} |\Sigma_j^k|^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{X_1 - \mu_1}{\sigma_1} \right)^2} \dots e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{X_d - \mu_d}{\sigma_d} \right)^2}, \text{ где}$$

$$\mu_1 \in [\underline{\mu}_1, \overline{\mu}_1], \dots, \mu_d \in [\underline{\mu}_d, \overline{\mu}_d].$$

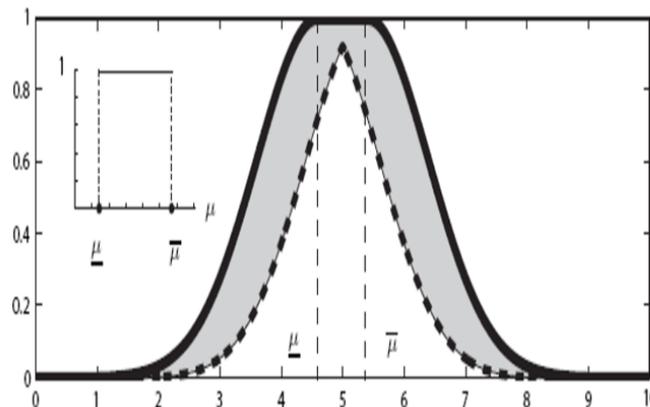


Рис. 2. Распределение с неопределённым вектором среднего μ

Коэффициент k_m управляет интервалом, в котором изменяется вектор среднего [3, 4].

$$\underline{\mu} = \mu - k_m \sigma, \quad \overline{\mu} = \mu + k_m \sigma, \quad k_m \in [0, 3].$$

Проверка соответствия пикселя $k^{\text{ой}}$ гауссиане теперь выглядит следующим образом:

$$H(X_t) = \begin{cases} \frac{2k_m|X_t - \mu|}{\sigma}, & \text{если } X_t \leq \mu - k_m\sigma \text{ или } X_t \geq \mu + k_m\sigma \\ \frac{|X_t - \mu|}{2\sigma^2} + \frac{k_m|X_t - \mu|}{\sigma} + \frac{k_m^2}{2}, & \text{если } \mu - k_m\sigma < X_t < \mu + k_m\sigma \end{cases},$$

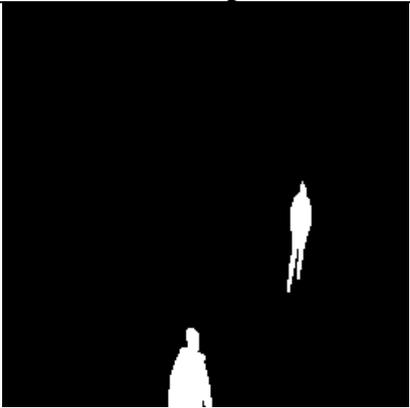
$H(X_t) < 2.5\sigma.$

Этот метод отличается от стандартного метода MOG, только этим условием. После проверки выполняются те же пункты, что и в MOG.

Результаты

Для проведения тестов мы использовали 2 пары видеозаписей с изображениями размером 250x250. В табл.1 приводится подробное описание каждой из исходных видеозаписей. Эталонные кадры были получены посредством ручной разметки - пиксели объектов интереса выделялись в графическом редакторе.

Табл. 1. Описание тестовых данных

Описание видеозаписи	Исходный кадр	Эталонный кадр
Видеозапись № 1: камера во дворе, зима, погода пасмурная, сильный ветер, тряска камеры, уровень помех и шумов: средний, номер кадра: 280		
Видеозапись № 2: камера во дворе, погода пасмурная, сильный ветер, тряска камеры, уровень помех и шумов: низкий, номер кадра: 180		

Результаты тестирования методов на видеозаписи №1 представлены на рис. 3 и в табл. 2.

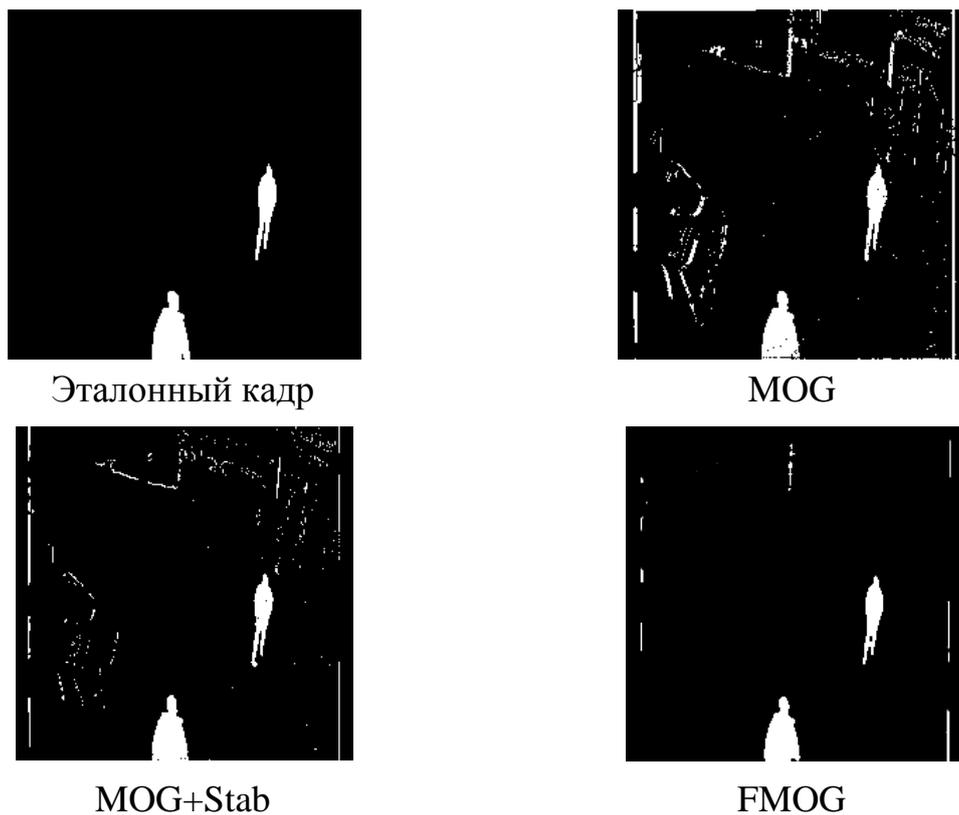


Рис. 3. Результаты тестирования алгоритмов на видеозаписи №1

Результаты тестирования всех методов на видеозаписи №2 представлены на рис. 4 и в табл. 2.

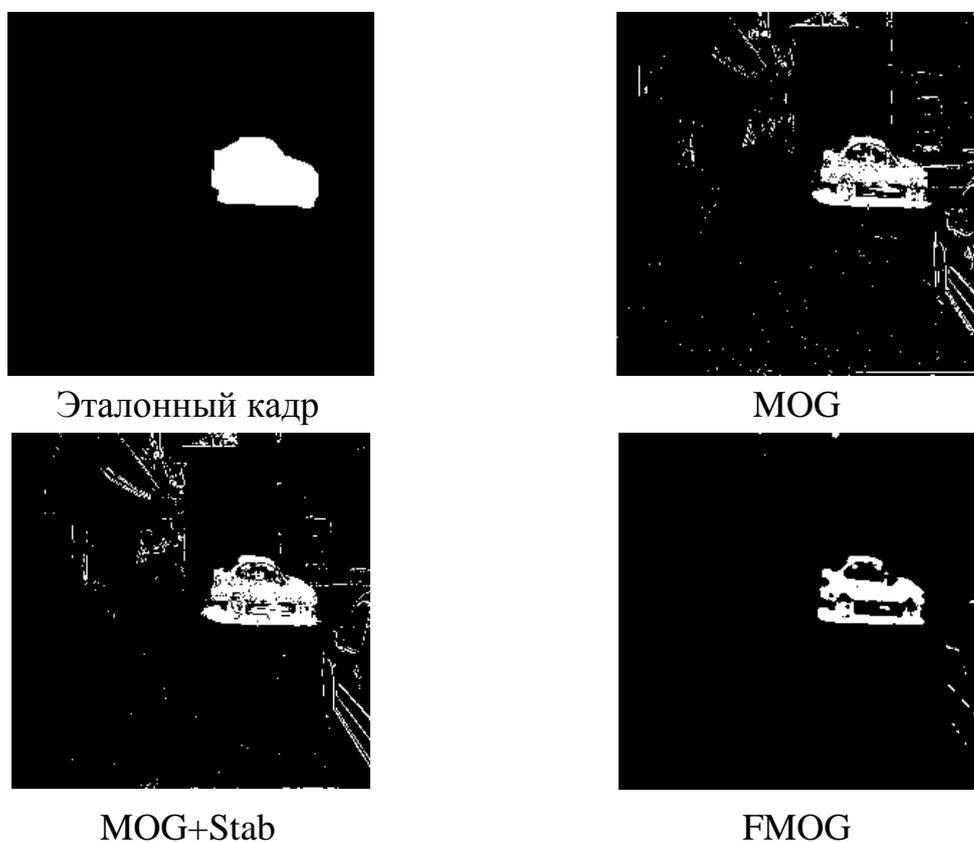


Рис. 4. Результаты тестирования алгоритмов на видеозаписи № 2

Табл. 2. Результат работы методов

№ видео Метод	1	2	Средняя точность по 2 видео
MOG	0.54768	0.60589	0.57678
FMOG	0.90113	0.72289	0.81201
MOG+Stab	0.70626	0.65230	0.67928

Анализируя результаты методов, можно сделать вывод, что с дрожанием камеры лучше остальных справляется метод, использующий нечеткие смеси Гауссовых распределений, FMOG – его усреднённая точность по двум видеозаписям равна 81%. С помощью данного метода можно с хорошей точностью выделять движущиеся объекты в условиях колебаний внешней среды или самой камеры.

Список литературы

1. *Cheung S-C. S, Kamath C.* Robust techniques for background subtraction in urban traffic video // Proceedings. SPIE's Symposium on Electronic Imaging. San Jose, California, USA, 2004. Vol. 5308. P. 881–892.
2. *Stauffer C., Grimson W. E. L.* Adaptive background mixture models for real-time tracking // Proceedings of IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. Fort Collins, Colorado, USA, 1999. Vol. 2. P. 246–252.
3. *Alandkar L., Gengaj S. R.* Dealing background issues in object detection using GMM: a survey // International Journal of Computer Applications. 2016. Vol. 150 (5). P. 50–55.
4. *Baf F. El., Bouwmans T., Vachon B.* Type-2 Fuzzy Mixture of Gaussians Model: Application to Background Modeling // Proceedings of International Symposium on Visual Computing. Las Vegas, Nevada, USA, 2008. P. 772–781.

СПЕКТРАЛЬНОЕ УПЛОТНЕНИЕ И УСИЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ В ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫХ СЕТЯХ

А. С. Вдовин, А. В. Гавшин, И. Л. Вольхин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

В настоящей работе исследованы важнейшие составляющие волоконно-оптических сетей, а именно, устройства, позволяющие передавать информацию по нескольким каналам в одном волокне – мультиплексоры, и устройства, предназначенные для компенсации затухания – оптические усилители. В качестве объекта исследования выбраны эрбиевые усилители и DWDM мультиплексоры.

Ключевые слова: оптика; эрбиевый усилитель; оптический мультиплексор

WAVELENGTH-DIVISION MULTIPLEXING AND AMPLIFICATION OF OPTICAL SIGNALS IN TELECOMMUNICATION NETWORKS

A. S. Vdovin, A. V. Gavshin, I. L. Volkhin
Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

In the present work, the most important components of fiber-optic networks are investigated, namely, devices that allow transmitting information through several channels in a single fiber – multiplexers, and devices designed to compensate attenuation – optical amplifiers. Erbium amplifiers and DWDM multiplexers were chosen as the object of study.

Keywords: optics; erbium amplifier; optical multiplexer

Для передачи данных на большие расстояния обычные медные кабели уже не подходят, так как, несмотря на витую структуру кабеля, возникают волновые эффекты и наводится большое количество помех, что сильно искажает форму сигнала. Кроме того, использование медных кабелей предполагает, что для передачи различных сигналов необходимо прокладывать множество различных кабелей, а при использовании оптического волокна, можно обойтись одним проводом, передавая сигналы с различными длинами волн. Данная технология носит название мультиплексирование с разделением по длине волны, или спектральное уплотнение (далее WDM) [1]. Одним из ключевых компонентов WDM сетей является мультиплексор, который и объединяет сигналы на входе по длинам волн. Волоконно-оптические линии связи позволяют передавать сигнал на расстояния, во много раз превышающие те, на которых может использоваться медный кабель. Исходя из больших протяженностей проложенных сетей, возникает проблема, связанная с тем, что амплитуда любого сигнала с течением времени уменьшается, следовательно, возникает

потребность в усилении сигнала. Для этого используются оптические усилители, они позволяют восстанавливать мощность проходящего через них сигнала.

DWDM (Dense Wavelength Division Multiplexing) – плотное мультиплексирование по длине волны [1]. Эта технология является самой актуальной в настоящее время, вследствие необходимости постоянно увеличивать пропускную способность телекоммуникационных линий передачи. Главное отличие сетей с плотным мультиплексированием от сетей со спектральным уплотнением первого поколения – высокая плотность каналов. Такая технология позволяет организовать до 80 дуплексных каналов в одном оптоволокне. Несущие волны идут с шагом всего 0.8 нм. Одним из ключевых компонентов сети со спектральным уплотнением является оптический мультиплексор. Он используется для объединения нескольких каналов с разными длинами волн в одно оптическое волокно. Обратную функцию выполняют демультиплексоры. Мультиплексированию и демультиплексированию подвергаются спектральные компоненты отдельных сигналов, характеристики которых всегда известны заранее. За основу современных оптических мультиплексоров в DWDM сетях, преимущественно, берутся матрицы волноводных дифракционных решеток [1]. Потери, вносимые такими устройствами, практически не зависят от числа каналов. При этом важно контролировать поляризацию падающего оптического излучения. Угол падения выбирается таким образом, что волны определенной длины при отражении от отдельных линий решетки будут отличаться по фазе друг от друга на одну и ту же длину волны. В таком случае все отраженные волны будут усиливать друг друга [1, 2], как показано на рис. 1.

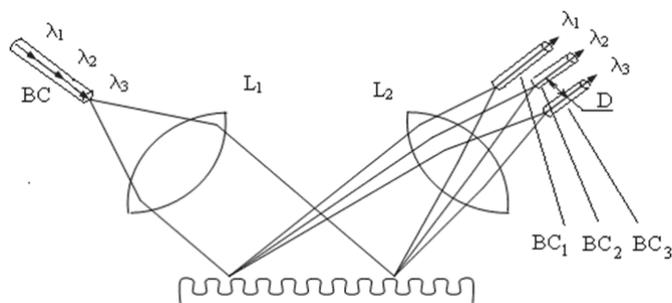


Рис. 1. Принцип работы мультиплексора на основе дифракционной решетки

Проводились исследования основных параметров оптического мультиплексора M40, магистральной оптической системы передачи DWDM «OptiX BWS 1600G». Сигналы на вход мультиплексора поступают с транспондера.

Затухание, вносимое мультиплексором. Данный параметр должен быть строго меньше максимально допустимого значения указанного в паспорте устройства. С помощью анализатора оптического спектра измеряется мощность оптического сигнала W_1 на выходе источника излучения. Далее измеряется мощность W на выходе мультиплексора. Такие измерения повторяются для каждого канала. Вносимые потери измеряются в дБ и определяются по формуле:

$$IL = 10 \cdot \lg \left(\frac{W_1}{W} \right).$$

Среднее значение затухания исследуемого мультиплексора 4.8 дБ. По требованиям, затухание, вносимое мультиплексором М40, должно быть менее 10 дБ. Полученные значения полностью соответствуют нормам.

Изоляция определяется как минимальная величина ослабления мощности сигнала с выборкой по всем неосновным выходным каналам, по отношению к основному каналу. К примеру: изоляция в 40 дБ означает, что в каждом соседнем канале длины волны основного канала ниже уровня сигнала основного канала на этой длине волны минимум на 40 дБ. Изоляция смежных каналов мультиплексора М40 должна быть больше 20 дБ. В ходе экспериментов получено среднее значение изоляции 30.6 дБ, что полностью соответствует требованиям.

Измерение ширины полосы оптического канала мультиплексора М40 на уровнях -20 дБ и -1 дБ. Анализатор спектра настраивается на проведение измерений на уровне -1 дБ, и снимаются показатели. После завершения измерений на -1 дБ, проводятся измерения на -20 дБ. Полученная спектрограмма приведена на рис. 2. Полученные значения ширины спектра не должны превышать или быть меньше допустимых значений, которые указываются в паспорте устройства.

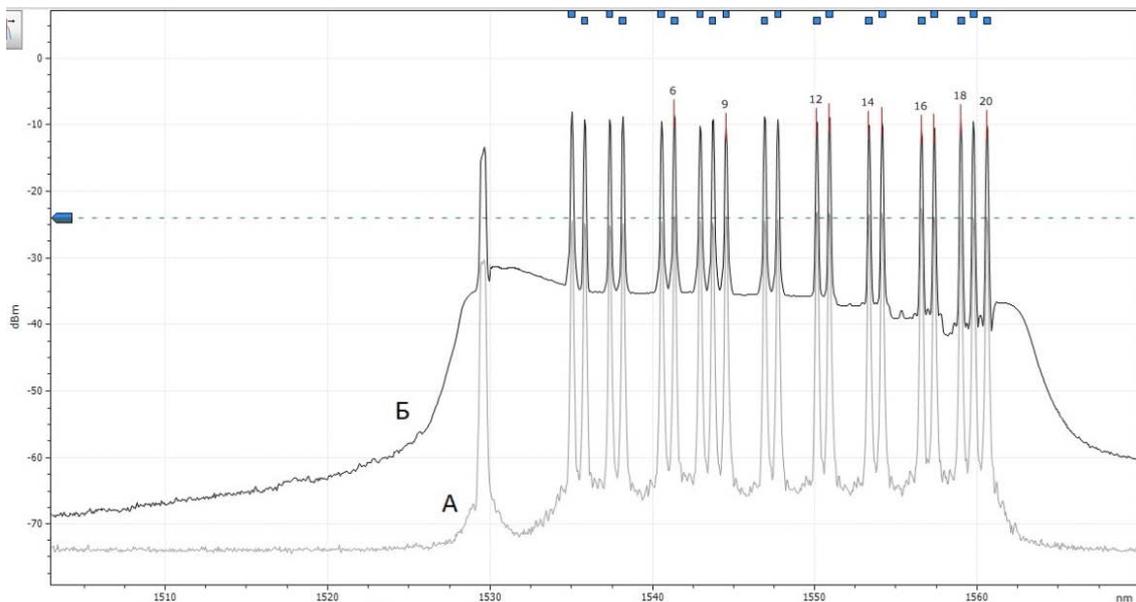


Рис. 2. Спектрограмма мультиплексированного сигнала (А – сигнал с выхода мультиплексора; Б - сигнал с выхода усилителя)

$$Isolation_i = \min_{i \neq j} \left(10 \lg \frac{W_{in i}(\lambda_i)}{W_{out j}(\lambda_i)} \right),$$

где $W_{in i}(\lambda_i)$ – мощность входного сигнала на длине волны λ_i ,
 $W_{out j}(\lambda_i)$ – мощность выходного сигнала на длине волны λ_i , присутствующего в канале j ($j \neq i$).

Ширина спектра на уровне -20 дБ не более 177 ГГц, на уровне -1 дБ не менее 25 ГГц. Значения на каждом порту соответствуют норме. Анализ спектрограмм проводился в программе EXFO Optical Spectrum Analyzer.

На следующем этапе проведено исследование оптического усилителя. В настоящее время наиболее распространены волоконно-оптические усилители на основе легированных эрбием оптических волокон (Erbium-Doped Fiber Amplifier – EDFA). Преимуществами усилителей данного типа являются: отсутствие зависимости от методов модуляции сигнала; отсутствие преобразования в электрический сигнал; возможность одновременного усиления сигналов с различными длинами волн; соответствие рабочего диапазона усиления области минимальных потерь, что изображено на рис. 3 [3].

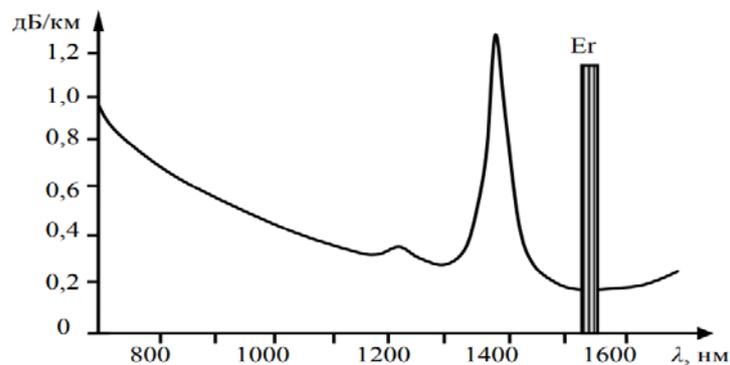


Рис.3. Спектр поглощения кварцевого оптоволокна

Упрощенная схема усилителя изображена на рис. 4. Оптическая накачка, необходимая для перевода ионов эрбия в возбужденное состояние, осу-

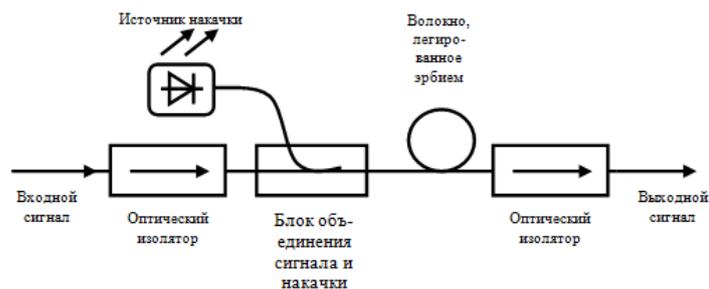


Рис. 4 Упрощенная схема эрбиевого усилителя

ществляется на длинах волн, соответствующих одной из их полос поглощения. Луч накачки, смешивается с входным сигналом. Далее, смешанный свет попадает в область волокна, легированную ионами эрбия. При воздействии луча накачки на ионы эрбия, они переходят из основного в возбуждённые состояния, т.е. создается инверсная заселённость энергетических уровней эрбия. Фотон полезного сигнала взаимодействует с возбужденным атомом эрбия, тем самым вынуждая его излучить запасенную энергию в виде дополнительного кванта излучения с такой же энергией, фазой и направлением распространения, как и у кванта полезного сигнала. Благодаря про-

цессу вынужденного излучения, удастся увеличить интенсивность первоначальной электромагнитной волны, при этом атомы эрбия переходят в основное, невозбужденное состояние.

Среда, в которой создана инверсия населенности, и система оптической обратной связи, которая за счет отражения возвращает часть излучения обратно, в совокупности обеспечивают непрерывную лазерную генерацию. Этот процесс превращает усилитель в лазер, нарушая структуру входного сигнала, поэтому на выходе из усилителя вводят оптические «изоляторы», потому что место присоединения к усилителю оптического волокна представляет собой границу раздела сред и ввиду различий показателей преломления, в этом месте возникает отражение.

Использование многоканальных волоконно-оптических систем со спектральным мультиплексированием делает нижеприведенные характеристики принципиально важными. Порядок следования исследования в целом повторяет работу [4].

Ширина полосы усиления оказывает определяющее влияние на число спектральных каналов, используемых для передачи информации, а значит, на общую информационную пропускную способность волокна. Диапазон длин волн усиливаемых оптических сигналов определяется спектром излучения ионов эрбия в зависимости от материала сердцевины волокна. Типичный диапазон равен $1.53 \div 1.58$ мкм.

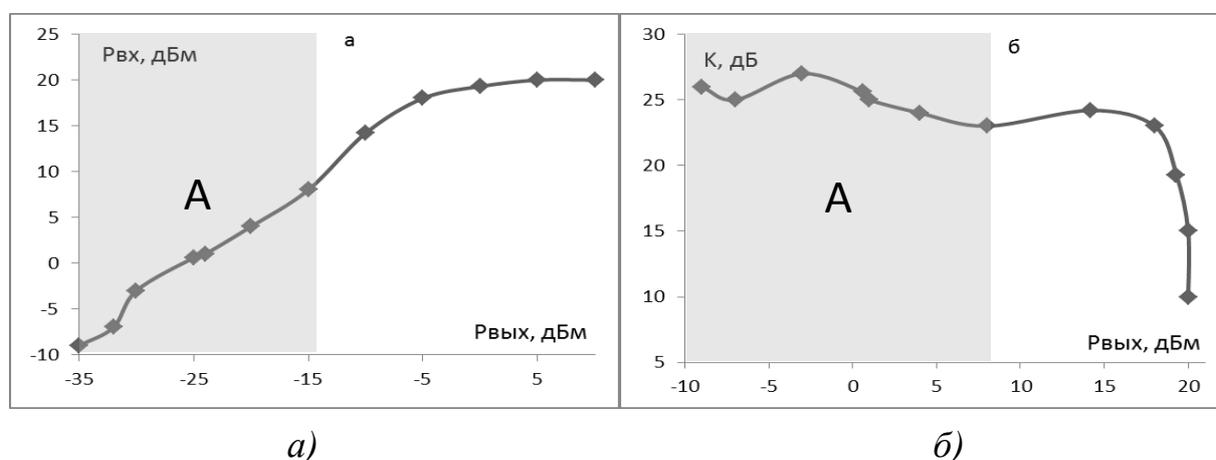


Рис. 5. Зависимости: а) выходная оптическая мощность от входной; б) коэффициент усиления от входной мощности (А – область работы телекоммуникационного усилителя)

Коэффициент усиления определяется как отношение мощности сигнала на выходе усилителя $P_{\text{вых}}$ к мощности входящего сигнала $P_{\text{вх}}$ (измеряется в децибелах):

$$K = P_{\text{вых}}[\text{дБм}] - P_{\text{вх}}[\text{дБм}].$$

Из рис. 5б видно, что в области А коэффициент усиления остается приблизительно постоянным и равен 25 дБ.

Мощность насыщения $P_{\text{вых. макс}}$ определяет максимальную мощность сигнала, которая может быть получена на выходе усилителя, как видно из рис. 5а, что она равна 20 дБм.

На рис. 2 изображен спектр сигнала с выхода оптического усилителя, из него видно, что спектр шумов усиливается так же, как усиливаемый полезный сигнал.

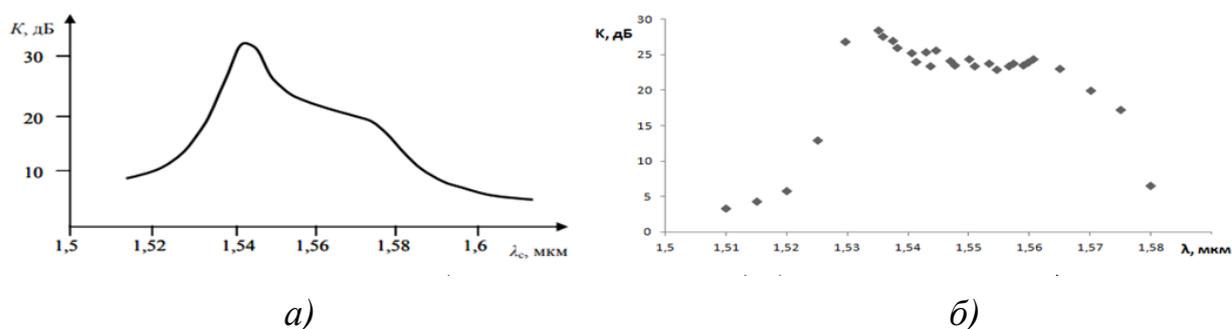


Рис. 6. Спектр усиления эрбиевого усилителя: а) без использования фильтров; б) с использованием брегговской решетки

Наиболее важной характеристикой усилителя является равномерность коэффициента усиления. Она определяется как разность между максимальным и минимальным значениями коэффициента усиления в пределах рабочего спектрального диапазона. Как видно из рис. 6а, изменение коэффициента усиления может превышать 10 дБ. В случае усиления слабых сигналов проводится сглаживание спектральной характеристики. Для этого в оптическую цепь усилителя вводят спектрально-селективные поглощающие фильтры. Основным видом фильтра является фотоиндуцированная длиннопериодная брегговская решетка, полученная путем пространственно-периодического облучения сердцевины оптоволокна ультрафиолетовым излучением через его поверхность. Спектр и интенсивность поглощения задаются периодом решетки и временем облучения. Из рис. 6б видно, что при использовании фильтра удается уменьшить неравномерность спектра усиления.

Список литературы

1. *Жирар А.* Руководство по технологии и тестированию систем WDM. Пер. с англ. под ред. А. М. Бродниковского, Р. Р. Убайдуллаева, А. В. Шмалько. М.: EXFO, 2001. 252 с.
2. *Иванов В. И.* Применение технологии WDM в современных сетях передачи информации: учебное пособие. Казань. 2010. 148 с.
3. *Курков А. С., Наний О. Е.* Эрбиевые волоконнооптические усилители // Lightwave Russian Edition. 2003. №1. С. 14–19.
4. *Ажеганов А С., Вольхин И. Л., Шестакова Н. К.* Квантовая и полупроводниковая электроника: курс лекций: учебное пособие. Перм. гос. нац. исслед. ун-т. Пермь, 2018. 159 с.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ АКТИВНЫХ БРОУНОВСКИХ ЧАСТИЦ

А. П. Винокуров^a, А. А. Кузнецов^{a,b}

^aПермский государственный национальный исследовательский университет, 614990, Пермь, Букирева, 15

^bИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, Королева, 1

В работе с помощью численного моделирования методом ланжевеновской динамики исследуются закономерности движения пассивных и активных броуновских частиц. В случае активных частиц отдельно рассматриваются случаи двумерного и трёхмерного движения. Результаты моделирования сравниваются с известными в литературе аналитическими решениями.

Ключевые слова: броуновское движение; активная броуновская частица; средний квадрат смещения

NUMERICAL SIMULATION OF THE DYNAMICS OF ACTIVE BROWNIAN PARTICLES

A. P. Vinokurov^a, A. A. Kuznetsov^{a,b}

^aPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

^bInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Korolyov St. 1, 614013, Perm

In this paper, using the Langevin dynamics numerical simulation, we study the laws of motion of passive and active Brownian particles. In the case of active particles, two-dimensional and three-dimensional motion cases are considered separately. The simulation results are compared with analytical solutions known in the literature.

Keywords: Brownian motion; active Brownian particles; mean square displacement

Броуновское движение – беспорядочное непрерывное движение частиц, которое впервые было обнаружено Робертом Брауном в 1827 году. Впервые данное явление объяснил в 1905 году Альберт Эйнштейн [1].

В природе также существуют системы с активными частицами, которые способны преобразовывать энергию окружающей среды, в энергию направленного движения. Естественные активные частицы – микроорганизмы, но также существует множество искусственных активных частиц.

В 1987 году Рейнольдс представил “модель Бойдса”, в которой моделируется совокупное движение стай птиц, стад наземных животных и стай рыб в графическом приложении компьютера. Позднее в 1995 году Вичек усовершенствовал данную модель [2].

В данной работе рассматривается две системы частиц: с пассивными частицами и с активными частицами.

Исследуемые частицы будем моделировать как однородные сферы одинакового диаметра d , обладающие одинаковой массой m , которые не взаимодействуют друг с другом. В работе будет необходимо определить зависимость среднего квадрата смещения частиц (mean square displacement, MSD) от времени.

$$MSD(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle (\mathbf{r}_i(t_0 + t) - \mathbf{r}_i(t_0))^2 \rangle_{t_0}.$$

Задача будет решаться с помощью численного моделирования методом ланжевеновской динамики.

Метод ланжевеновской динамики

Рассмотрим систему уравнений Ланжевена, описывающих поступательное и вращательное движение броуновских частиц, а также уравнение, описывающее связь единичного вектора \mathbf{u} , жестко связанного с частицей, и угловой скорости $\boldsymbol{\omega}$

$$\begin{cases} m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\gamma_T \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} + \mathbf{F}_{therm}(t) + \gamma_T V \mathbf{u}, & (1) \\ J \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = -\gamma_R \boldsymbol{\omega} + \mathbf{Q}_{therm}(t), & (2) \\ \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{u}, & (3) \end{cases}$$

где γ_T – коэффициент трения поступательного движения, V – скорость «самодвижения» (self-propulsion velocity) активной частицы, \mathbf{u} – единичный вектор ориентации частицы, J – момент инерции i частицы, $\boldsymbol{\omega}$ – угловая скорость, γ_R – коэффициент трения вращательного движения,

Правая часть уравнения (2) состоит из трёх слагаемых. Первое слагаемое учитывает трение при поступательном движении в вязкой среде. Второе слагаемое $\mathbf{F}_{therm}(t) = (6kT\gamma_T)^{1/2} \boldsymbol{\xi}_T(t)$ является Броуновской стохастической силой для поступательного движения, где k – постоянная Больцмана, T – температура в К, $\boldsymbol{\xi}_T(t)$ – нормализованный Гауссовский случайный процесс. Третье слагаемое учитывает так называемое “самодвижение” частиц.

Правая часть уравнения (3) состоит из двух слагаемых. Первое слагаемое учитывает трение при вращательном движении в вязкой среде. Второе слагаемое: $\mathbf{Q}_{therm}(t) = (6kT\gamma_R)^{1/2} \boldsymbol{\xi}_R(t)$ является Броуновским стохастическим вращающим моментом, $\boldsymbol{\xi}_R(t)$ – нормализованный Гауссовский случайный процесс.

Введя безразмерное расстояние, время и угловую скорость

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{r}_i}{d}, \tau = \frac{t}{d} \left(\frac{kT}{m} \right)^{1/2}, \mathbf{k} = \boldsymbol{\omega} d \left(\frac{m}{kT} \right)^{1/2}$$

соответственно и проведя несложные преобразования с исходной системой уравнений Ланжевена получаем:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \mathbf{x}}{d\tau^2} + \Gamma_T \frac{d\mathbf{x}}{d\tau} - v\Gamma_T \mathbf{u} + (2\Gamma_T)^{1/2} \xi_T^*(\tau) = 0, \\ J^* \frac{d\mathbf{k}}{d\tau} = -\Gamma_R \mathbf{k} + (6\Gamma_R)^{1/2} \xi_R^*(\tau), \\ \frac{d\mathbf{u}}{d\tau} = \mathbf{k} \times \mathbf{u}, \end{cases}$$

где

$$v = V \left(\frac{m}{kT} \right)^{1/2}, \Gamma_T = \frac{\gamma_T d}{(mkT)^{1/2}}, \xi_T^*(t) = \xi_T(t) \sqrt{d} \left(\frac{m}{kT} \right)^{1/2},$$

$$J^* = \frac{J}{md^2}, \Gamma_R = \frac{\gamma_R d}{kT} \left(\frac{m}{kT} \right)^{1/2}, \xi_R(\tau) = \frac{\xi_R(\tau)}{kT}.$$

Для моделирования системы будем использовать пакет ESPResSo [4].

Результаты

Зависимость среднего квадрата смещения *пассивных* броуновских частиц от времени в трёхмерном случае хорошо известна в литературе и в принятых обозначениях имеет следующий вид [1]:

$$\langle x^2 \rangle(\tau) = \frac{6}{\Gamma_T^2} (\Gamma_T \tau - 1 + \exp(-\Gamma_T \tau)).$$

На рис. 1 мы можем наблюдать, что при $\tau \ll \tau_p$, — зависимость квадратичная

$$\langle x^2 \rangle(\tau) = 3\tau^2,$$

а при $\tau \gg \tau_p$, — линейна, о чем и говорит теория Эйнштейна:

$$\langle x^2 \rangle(\tau) = \frac{6\tau}{\Gamma_T}.$$

Здесь $\tau_p = 1/\Gamma_T$ — инерционное время. На достаточно малых временах наблюдается инерционное движение частиц, на больших временах диффузионное движение пассивных частиц. Как показано на рис. 1, с увеличением коэффициента вязкого трения поступательного движения γ_T движение частиц в среде затрудняется.

Как показано на рис. 2, частицы движутся хаотическим образом и явного выделенного направления движения не наблюдается.

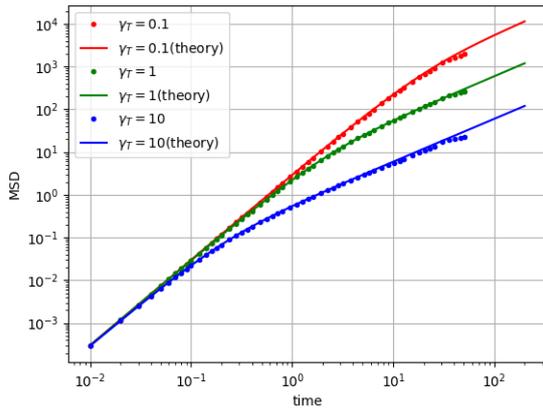


Рис. 1. Зависимость среднего квадрата смещения частиц от времени

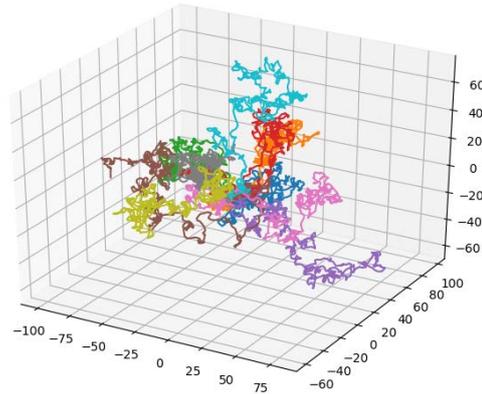


Рис. 2. Траектории пассивных броуновских частиц

Зависимость среднего квадрата смещения от времени в двумерном случае для активных броуновских частиц выглядит следующим образом [3]:

$$\langle x^2 \rangle(\tau) = \frac{4\tau}{\Gamma_T} + \frac{(V\Gamma_R)^2}{2} \left(\frac{2\tau}{\Gamma_R} + \exp\left(-2\tau/\Gamma_R\right) - 1 \right). \quad (4)$$

Согласно (4) для активных броуновских частиц [2]:

- При $\tau \ll \Gamma_R$ – движение диффузионное с коэффициентом диффузии $4/\Gamma_T$;
- При $\tau \cong \Gamma_R$ – движение квазибаллистическое;
- При $\tau \gg \Gamma_R$ – движение диффузионное с увеличенным эффективным коэффициентом диффузии $4/\Gamma_T + V^2\Gamma_R$.

На рис. 3 формула (4) сравнивается с результатами моделирования для двумерной системы при $\Gamma_R = \Gamma_T = 1$ и различных скоростях самодвижения. Видно, что диффузионный режим при $\tau \gg \Gamma_R$ очень точно описывается теоретической формулой, однако при меньших временах наблюдается значительное расхождение. Оно связано с инерцией моделируемых частиц, не учитываемой в формуле (4).

На рис. 4 можем наблюдать зависимость среднего квадрата смещения от времени для активных броуновских частиц в трехмерном случае. Ситуация аналогична двумерному движению. Видно, что при больших временах формула (4) (при умножении на коэффициент 3/2) описывает увеличение эффективного коэффициента диффузии активных частиц также хорошо, как и в двумерной системе.

На рис. 5. можем наблюдать траектории активных броуновских частиц в трёхмерном пространстве с неизменными параметрами окружающей среды, массой и размером, но с разными заданными скоростями. Как видно на рисунке увеличение скорости вносит значительный вклад в движение частиц в среде.

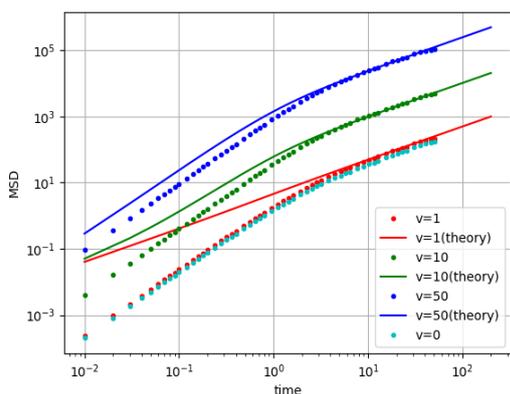


Рис. 3. Зависимость среднего квадрата смещения активных броуновских частиц от времени в двумерном случае для $\Gamma_R = \Gamma_T = 1$

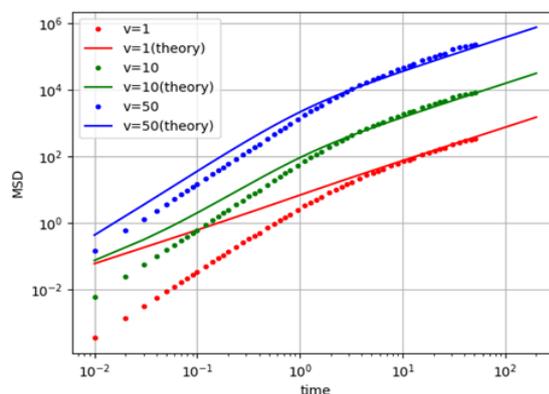
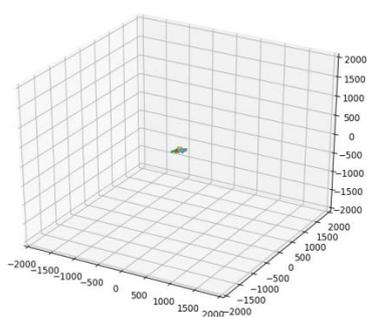
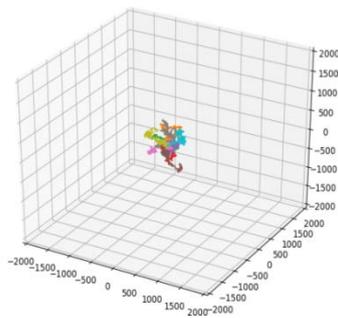


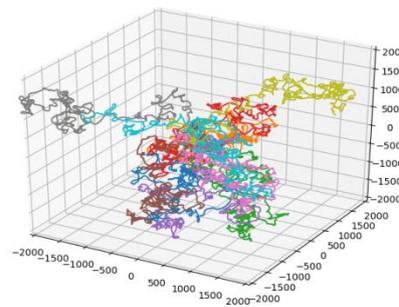
Рис. 4. Зависимость среднего квадрата смещения активных броуновских частиц от времени в трехмерном случае для $\Gamma_R = \Gamma_T = 1$



а)



б)



в)

Рис. 5. Траектории частиц при разных скоростях:
а) $V=1$; б) $V=10$; в) $V=50$

Заключение

Было продемонстрировано, что способность частицы преобразовывать энергию окружающей среды, в энергию направленного движения вносит существенный вклад в движение частицы. Также было показано, что известное в литературе решение уравнений Ланжевена для двумерной системы активных частиц совпадает с численными данными для трёхмерной системы, что говорит об универсальности данного теоретического решения.

Список литературы

1. Li T., Raizen M. G. Brownian motion at short time scales //Annalen der Physik. 2013. Vol. 525 (4). P. 281–295.

2. *Bechinger C. et al.* Active particles in complex and crowded environments // *Reviews of Modern Physics*. 2016. Vol. 88 (4). 045006.
3. *Howse J. R. et al.* Self-motile colloidal particles: from directed propulsion to random walk // *Physical review letters*. 2007. Vol. 99 (4). 048102.
4. *Limbach H.-J., Arnold A., Mann B. A., Holm C.* ESPResSo – An extensible simulation package for research on soft matter systems // *Computer Physics Communications*. 2006. Vol. 174 (9). P. 704–0727.

УСТРОЙСТВО ДЛЯ БИОМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ЧЕЛОВЕКА ПО РИСУНКУ ВЕН ЛАДОНИ

А. И. Лунегов, А. В. Манцуров, И. В. Лунегов
Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

В работе представлена разработка и изготовление устройства для биометрической идентификации человека по рисунку вен ладони. Устройство выполнено на основе микроконтроллера K1986BE92QI компании Миландр.

Ключевые слова: биометрическая идентификация; разработка; устройство; рисунок вен

DEVICE FOR BIOMETRIC EVALUATION OF A PERSON BY THE PATTERN OF THE VEINS OF THE PALM

A. I. Lunegov, A. V. Mantsurov, I. V. Lunegov
Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

The work presents the development and manufacture of a device for biometric identification of a person according to the pattern of the veins of the palm. The device is based on the Milander K1986BE92QI microcontroller.

Keywords: biometric identification; development; device; drawing veins

Биометрические технологии для идентификации личности, давно стали привычными в системах контроля и могут применяться для предотвращения запрещенного доступа в здания, к компьютерам, банкоматам, мобильным телефонам и т.д. В банковской сфере область их применения расширяется практически ежедневно и не ограничивается системами входа и выхода. В области СКУД (система контроля и управления доступом) системы, обеспечивающие или ограничивающие доступ на объект на основе идентификации по венам ладони, появились сравнительно недавно, но быстро приобретают популярность во всем мире. Данный способ идентификации был признан более практичным и удобным по сравнению с терминалами, обеспечивающими доступ на предприятие по отпечаткам пальцев или специальным именным картам. Идентификация по венам ладони основана на поглощении инфракрасного излучения гемоглобином кровеносных сосудов. Каждый человек обладает уникальным рисунком вен ладони и по сравнению с отпечатками пальцев он значительно сложнее. Эти особенности позволяют значительно повысить точность процедуры распознавания.

В рамках работы по изготовлению устройства по биометрической идентификации человека по рисункам вен ладони был применен метод теплового поглощения.

Метод основан на свойствах поглощения и рассеивания света биологическими тканями организма человека.

Спектры, представленные на рис. 1, показывают, что в диапазоне от 700 до 900 нм (ближний инфракрасный диапазон) основной вклад в поглощение электромагнитного излучения тканями организма человека вносит гемоглобин (различают оксигемоглобин – гемоглобин насыщенный кислородом, входящий в состав артериальной крови и дезоксигемоглобин – гемоглобин, входящий в состав венозной крови).

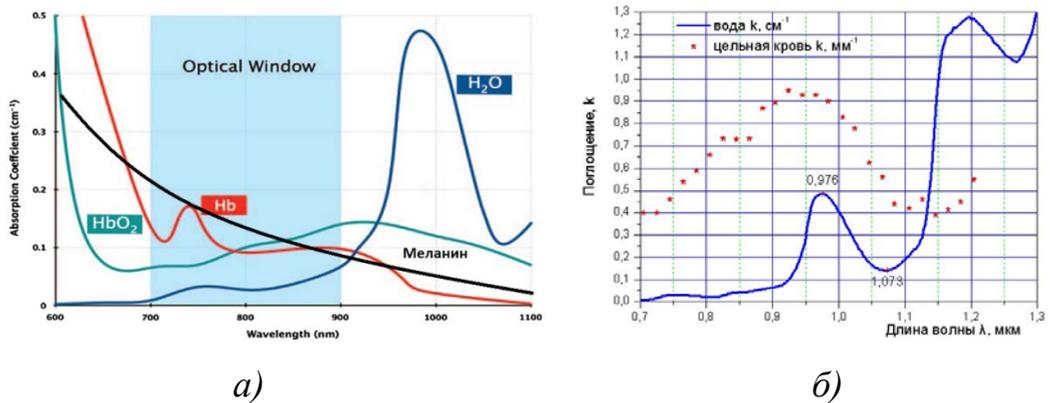


Рис. 1. Спектры поглощения гемоглобина с окном прозрачности (а) и цельной крови (б) в сравнении со спектром поглощения воды

Таким образом, при использовании внешнего источника инфракрасного излучения, облучающего поверхность кожи с длинами волн, входящими в окно прозрачности (рис.1а) и регистрирующей камеры, чувствительной к данному диапазону волн, может быть получено контрастное изображение, содержащее тонкую структуру кровеносных сосудов определенной части тела (ладонь, тыльная часть кисти руки, запястье, фаланги пальцев). При выборе объекта сканирования учитывают расположение кровеносных сосудов и их свойства [1].

Устройство для биометрической идентификации состоит из трех основных модулей (рис. 2):

- 1) модуль «камера»,
- 2) микропроцессорный модуль,
- 3) модуль датчиков и подсветки.

Модуль «камера» состоит из цифровой камеры, основным элементом которой является фоточувствительная матрица (ФМ) OV7670, стабилизированного источника питания, динамической памяти-буфера FIFO и тактового генератора.

ФМ с буфером выполняет роль самостоятельного микропроцессорного устройства. Она может осуществлять первичную обработку изображений, а именно: контролировать экспозицию и усиление, выставлять баланс белого и т.д. В состав ФМ входят фоточувствительные ячейки, аналого-цифровой преобразователь, сигнальный (DSP) и микропроцессор, стек, таймер

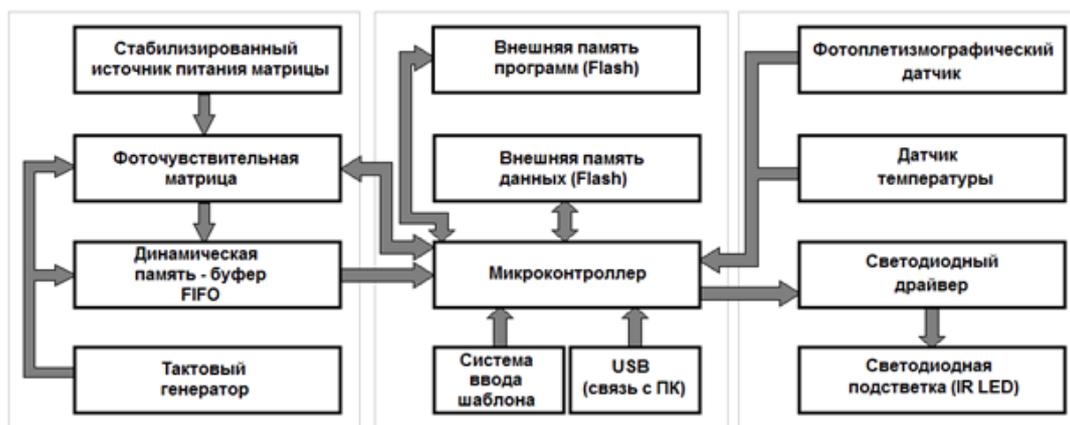


Рис. 2. Структура устройства для биометрической идентификации

видеоимпульсов, конфигурационные регистры ввода/вывода, порт (шина) ввода/вывода, а также модуль интерфейса SCCB (аналог интерфейса I²C). При формировании изображения сигнальный процессор генерирует импульсы пиксельной, строчной и кадровой развертки (или пиксельной (PCLK), горизонтальной (HSYNC) и вертикальной (VSYNC) синхронизации). Эти импульсы представляют собой управляющие сигналы для внешнего буфера – динамической ОЗУ».

Также к ОЗУ подключается шина ввода/вывода для побайтовой передачи изображения. Импульсы PCLK инкрементируют адрес ОЗУ (адресный счетчик встроен в используемую ОЗУ), а импульсы VSYNC сбрасывают формируемый адрес в нуль. Еще импульсы VSYNC сообщают микроконтроллеру о готовности к считыванию очередного изображения, уже находящегося в ОЗУ AL422В.

Связь матрицы с ОЗУ осуществляется при помощи логического элемента «2И-НЕ» (микросхема SN74LVC1G00), который выполняет соответствующую булеву функцию и формирует логический сигнал разрешения записи данных в буфер.

Для исключения возможных искажений снимка из-за скачков напряжения питания фоточувствительной матрицы, в схеме применяется линейный стабилизатор напряжения РАМ3101DAB28с защитой от короткого замыкания.

В процессе своей работы, камера находится под температурным воздействием окружающей среды и подвержена нагреву в процессе работы. В результате чего может изменяться частота её работы. Для поддержания независимого тактирования всего модуля используется встроенный генератор, работающий на частоте 24 МГц. Использование данного генератора уменьшает нагрузку на МК и всю систему в целом.

Микропроцессорный модуль (МП), как центральный элемент системы, соединен со всеми остальными модулями и состоит из: микроконтроллера (МК), внешней Flash памяти данных (ПД), внешней Flash памяти программ (ПП), коммуникационного интерфейса USB и системы ввода шаблона. На

микроконтроллер ложиться основная задача по общему управлению всем устройством и обработке входящих данных с фоточувствительной матрицы.

В МП применяется микроконтроллер K1986BE92QI. Микроконтроллер разработан в РФ и обладает современным 32-битным ядром с архитектурой ARM Cortex-M3, содержащий 128 Кб памяти программ Flash-типа и 32 КБ ОЗУ. Микроконтроллер работает на тактовой частоте до 80 МГц. Для стабильной генерации тактового сигнала МК используется кварцевый резонатор HC-49SM на 8 МГц, так как встроенный в микроконтроллер RC-генератор обладает намного меньшей стабильностью генерации тактового сигнала, что обычно приводит к нарушению синхронизации между отдельными узлами устройства [2].

Модуль датчиков и подсветки состоит из фотоплетизмографического датчика, светодиодного драйвера и светодиодной подсветки. Светодиодный драйвер и подсветка играют роль излучателя выбранной длины волны с заданной интенсивностью. В качестве светодиодного драйвера используются полевые MOSFET транзисторы IRF7313 с управляемым напряжением затвора. Выбранные транзисторы используются в виде транзисторной сборки в едином корпусе для упрощения монтажа на плату.

В связи с наличием у светодиодов ограничения по току (превышение которого приводит к перегоранию), в схеме применяется импульсный стабилизатор тока диодов. Стабилизатор тока выполнен на микросхеме MC34063 – импульсный стабилизатор тока, работающий в интервале напряжений питания от 3 до 40 В, обеспечивая выходной ток нагрузки до 1.5 А.

Принципиальная схема устройства приведена на рис. 3.

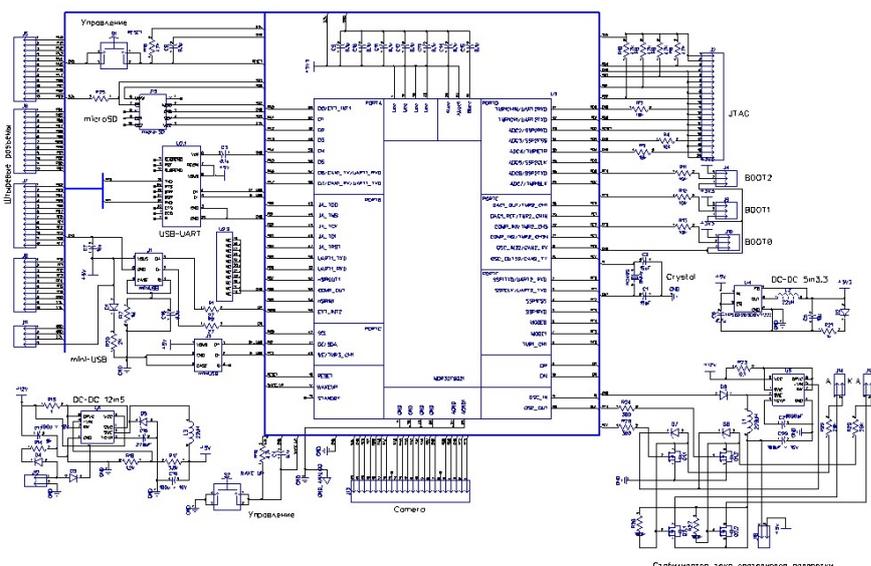


Рис. 3. Принципиальная схема платы устройства

Для защиты от муляжей в разрабатываемом устройстве применяется фотоплетизмографический датчик, по-другому пульсометр.

Он основан на принципе фотоплетизмографии (ФПГ), которая представляет собой метод измерения изменения объема крови в тканях с помощью источника света и детектора. Поскольку любые изменения объема крови синхронны с биением сердца, этот метод может использоваться для расчета частоты сердечных сокращений. Для ФПГ источник света и светодетектор помещаются возле ткани для измерения результирующего света. Из-за ограниченной глубины проникновения света через ткани органов, ФПГ датчик применим к ограниченной части тела, например для пальца или мочки уха. Тем не менее, благодаря высокой отражательной способности ФПГ, источник света и детектор света размещены на одной стороне части тела. Полученный сигнал по величине будет колебаться в зависимости от пульсового кровотока, вызванных биением сердца [3].

Устройство для биометрической идентификации человека по рисункам вен ладони состоит из двух частей: корпуса и рупора с упором под ладонь. Внутри корпуса скомпонованы материнская плата, плата с камерой и светодиодами, плата ФПГ датчика. Для получения наилучшего качества изображения высота рупора подобрана так, чтобы ладонь находилась в фокусе камеры. Готовое устройство показано на рис. 4.

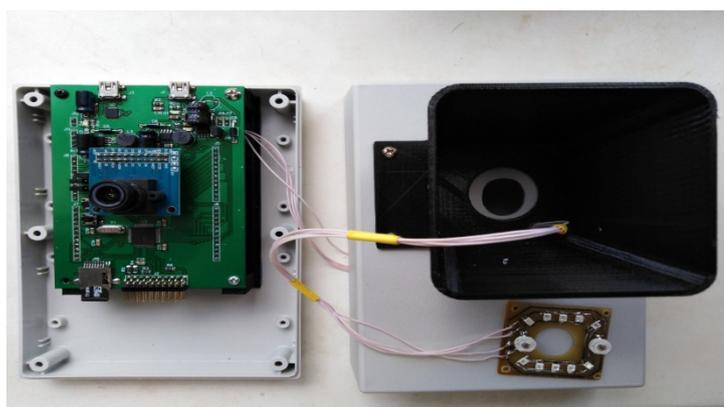


Рис. 4. Внешний вид устройства для биометрической идентификации

Для взаимодействия с устройством была разработана программа – графический интерфейс на языке С# в среде программирования Visual Studio 10. Основными задачами программы являются:

- загрузка конфигурационного файла;
- отправка и прием данных и команд;
- визуализация полученной фотографии.

После запуска приложения пользователь должен инициировать сеанс связи с устройством, открыв СОМ-порт №1. Для этого на форме приложения реализована специальная кнопка «Открыть порт (СОМ1)». Если в системе не зарегистрирован порт с данным именем, то программа выдаст соответствующую ошибку.

Для удобной модификации конфигурационных параметров создан текстовый файл test_320x240.txt, содержащий адреса и значения параметров

для оптимального режима съемки. Загрузка этого файла в устройство осуществляется нажатием на кнопку «Загрузить конф. Файл». После удачной загрузки, через несколько секунд поверх окна приложения будет выведено сообщение об удачной загрузке файла

По отношению к съемке, устройство может работать как в автоматическом, так и в полуавтоматическом режимах. Автоматический режим подразумевает автоматическую съемку ладони при её удачном расположении на сканере. Перед началом съемки, когда человек прикладывает ладонь, устройство при помощи ФПГ датчика определяет величину частоты сердечных сокращений пользователя (ЧСС). При этом устройство вычисляет мгновенную ЧСС. Если значение мгновенной частоты три раза подряд на протяжении 4-6 сек принимает значения из диапазона от 50 до 130 ударов в минуту, то устройство переходит к процессу формирования снимка и отправляет его на ПК. В противном случае устройство переходит в режим ожидания руки. Загрузка снимка в ПК занимает около 2–3 сек. В течение всего этого времени шкала загрузки отображает уровень текущей загрузки изображения.

В процессе тестирования устройства была получена база изображений более 100 человек. Некоторые изображения рисунка вен ладони показаны на рис. 5.

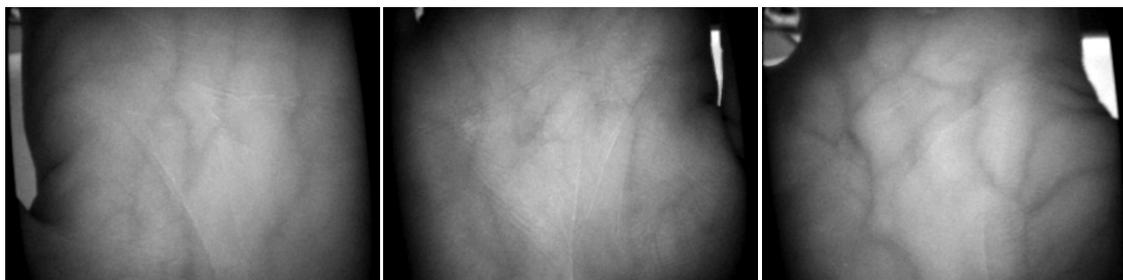


Рис.5. Изображения рисунка вен ладони

Готовое устройство полностью соответствует требованиям технического задания заказчика и передано ему для испытаний и промышленного внедрения. Устройство показало свою устойчивость к использованию муляжей, реагируя только на живого человека.

Список литературы

1. *Jen-Chun Lee*. A novel biometric system based on palm vein image // *Pattern Recognition Letters*. 2012. Vol. 33. P. 1520–1528.
2. Основные характеристики микроконтроллеров серии K1986BE92Q1 [Электронный ресурс]. URL: <https://www.terraelectronica.ru> (дата обращения: 20.04.2019).
3. Прибор для измерения пульса [Электронный ресурс]. URL: <https://tehnoobzor.com> (дата обращения: 23.05.2019).

ИССЛЕДОВАНИЕ СИСТЕМЫ ДИАГНОСТИКИ ЛЕТАТЕЛЬНЫХ АППАРАТОВ НА ЭЛЕКТРОМАГНИТНУЮ СОВМЕСТИМОСТЬ

Д. Ю. Тарасов, И. Л. Вольхин

Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15

Создана экспериментальная установка для диагностики радиоэлектронной аппаратуры на электромагнитную совместимость. Установка размещена внутри экранированной камеры защищённой от внешних электромагнитных воздействий. Проведено испытание системы диагностики летательных аппаратов на электромагнитную совместимость. По результатам разработаны рекомендации и проведена модернизация компонентов системы диагностики, что позволило уменьшить уровень кондуктивных помех до величины рекомендованной государственным стандартом.

Ключевые слова: система диагностики; электромагнитная совместимость; кондуктивная помеха

INVESTIGATION OF DIAGNOSTIC SYSTEM FOR AIRCRAFT DEVICES ON ELECTROMAGNETIC COMPATIBILITY

D. Y. Tarasov, I. L. Volhin

Perm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

Experimental devise for diagnostics of radio electronic equipment on electromagnetic compatibility has been created. Experimental devise was located inside the shielded chamber protected from external electromagnetic influences. Test of aircraft diagnostics system for electromagnetic compatibility has been done. Based on the results, recommendations were developed and the components of diagnostic system were upgraded, which made it possible to reduce the level of conducted interference to the value recommended by the state standard.

Keywords: diagnostic system; electromagnetic compatibility; conductive disturbance

Проблемы электромагнитной совместимости (ЭМС) не ограничиваются созданием помех радиослужбам. Всё большее значение преобладают проблемы, связанные с тем, что электронная аппаратура всех видов становится более восприимчивой к внешним электромагнитным помехам. Это явление становится всё более заметным по двум причинам. Во-первых, постоянно увеличивается концентрация и взаимодействие электронных изделий во всех сферах повседневной жизни. Происходит увеличение плотности радиоэлектронной техники. Во-вторых, современное оборудование с микропроцессорами в пластмассовых корпусах обладает, как правило, худшей устойчивостью к воздействию электромагнитных помех.

Восприимчивость к помехам в настоящее время является одной из основных проблем электронных устройств, особенно тех, для которых обес-

печение нормального функционирования является жизненно важным по причинам, связанным с безопасностью или экономикой. К указанным системам относятся системы диагностики состояния летательных аппаратов.

Электромагнитные помехи представляют собой опасную форму загрязнения окружающей среды. Уровень этого загрязнения постоянно возрастает [1]. Воздействия электромагнитных помех могут иметь широкий диапазон последствий от потери настроения у радиослушателя из-за треска при приёме радиовещательной передачи до несчастных случаев с потенциально смертельным исходом, обусловленных нарушениями работы систем контроля, критических для безопасности.

Для возникновения помехи должны быть выполнены следующие условия: существование источника помех; существование приёмника помех; а также взаимодействие между источником и приёмником помех. Прибор можно считать электромагнитно совместимым, если он: не создаёт помех другой технике; не воспринимает помехи от другой техники и не создаёт помех работе сам себе [1].

Одним из основных видов электромагнитных помех является кондуктивная помеха – электромагнитная помеха, распространяющаяся по проводам [2]. Для её ослабления применяются следующие технические решения: Фильтры и экранирование. Для экранирования используют как немагнитные металлы, так и ферромагнитные материалы.

Металлические корпуса электронных устройств обеспечивают определённую защиту от проникновения из окружающего пространства в него электромагнитных помех. Однако неизбежные разрезы, швы, отверстия для кабелей и вентиляции сильно снижают их экранирующее действие. В корпусах, удовлетворяющих требованиям электромагнитной совместимости, этот недостаток должен быть устранен [2]. Эффективное экранирование электронных приборов с пластмассовыми корпусами достигается применением металлических нитей в связующем материале или металлизацией поверхности корпуса. Обеспечение электромагнитной совместимости, создание условий для измерений и испытаний приборов без помех, получения достоверной информации, требуют во многих случаях специального электромагнитного экранирования помещений [3]. Примерами электромагнитных экранированных помещений являются: испытательные помещения и лаборатории средств связи, измерений, автоматизации и техники высоких напряжений; измерительные помещения для научных исследований и службы метрологии; медицинские диагностические и терапевтические кабинеты в больницах; вычислительные центры на промышленных предприятиях, в банках и многих других организациях.

Проведение испытаний системы диагностики на электромагнитную совместимость

При проведении испытаний системы диагностики летательных аппаратов на ЭМС был использован ГОСТ РВ 6601-002-2008 [4]. На рис. 1 приведена схема установки для проведения испытаний. Испытываемая система 1

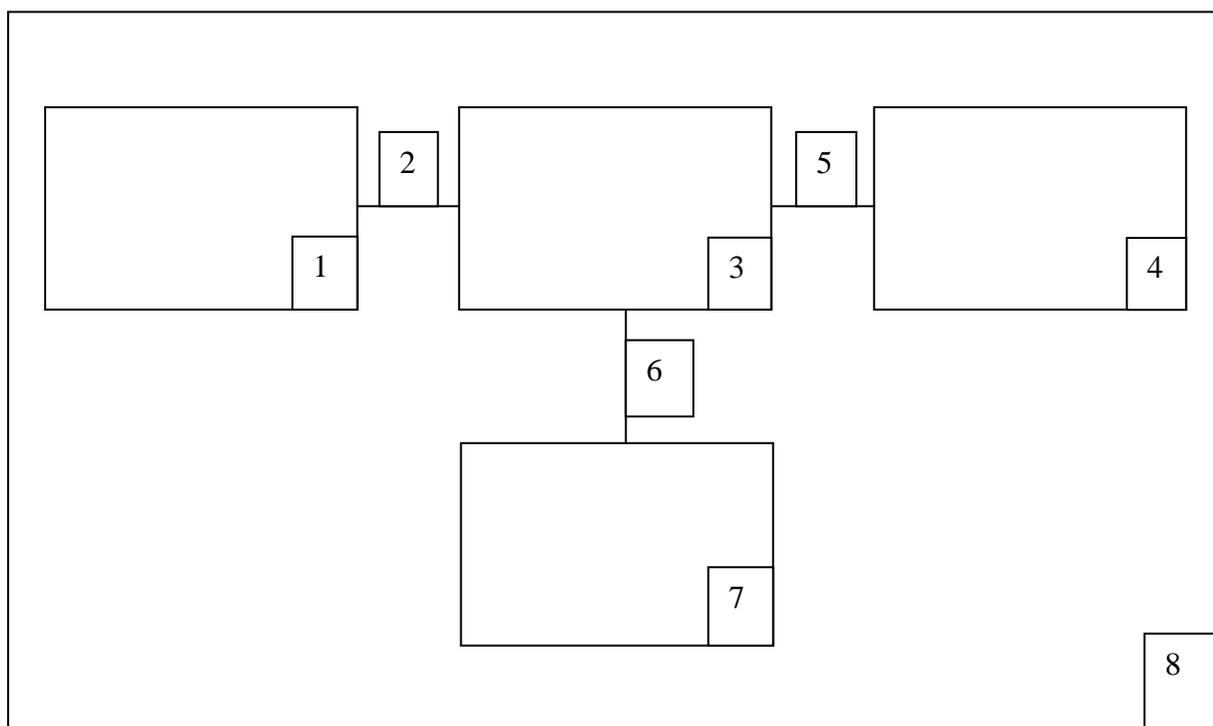


Рис. 1. Схема установки для проведения испытаний системы диагностики летательных аппаратов на электромагнитную совместимость

соединена незэкранированным шнуром питания 2 с эквивалентом сети 3, на который подаётся напряжение с источника питания 4 через незэкранированный шнур питания 5. Сигнал помех от эквивалента сети через экранированный коаксиальный кабель 6 поступает на вход анализатора сигналов РХА N9030A 7. Вся система диагностики размещена в экранированной камере 8.

Предварительно проведённые испытания электромагнитной обстановки в экранированной камере показывают, что она приемлема для проведения испытаний согласно ГОСТ [4]. Испытания системы диагностики в диапазоне 150 кГц –30 МГц проведены с двумя соединительными проводами 2. Один из них не имеет фильтра сетевых помех, а другой оснащён указанным фильтром. Спектрограммы помех от системы диагностики без фильтра и с фильтром представлены на рис. 2а и 2б.

На спектрограммах по горизонтальной оси отложена частота, по вертикальной оси – уровень сигнала в дБ на деление. Здесь же белой линией отмечен допустимый уровень помех по ГОСТ [4]. Анализ спектрограмм показывает, что при отсутствии фильтра уровень кондуктивной помехи во всем диапазоне частот находится выше ограничительной линии по ГОСТу. Поэтому система не является электромагнитно совместимой и необходимо принимать меры по уменьшению уровня помехи. При использовании фильтра уровень сигнала кондуктивной помехи в диапазоне от 12 МГц до 21 МГц уменьшился до уровня ограничительной линии по ГОСТу. Использованный

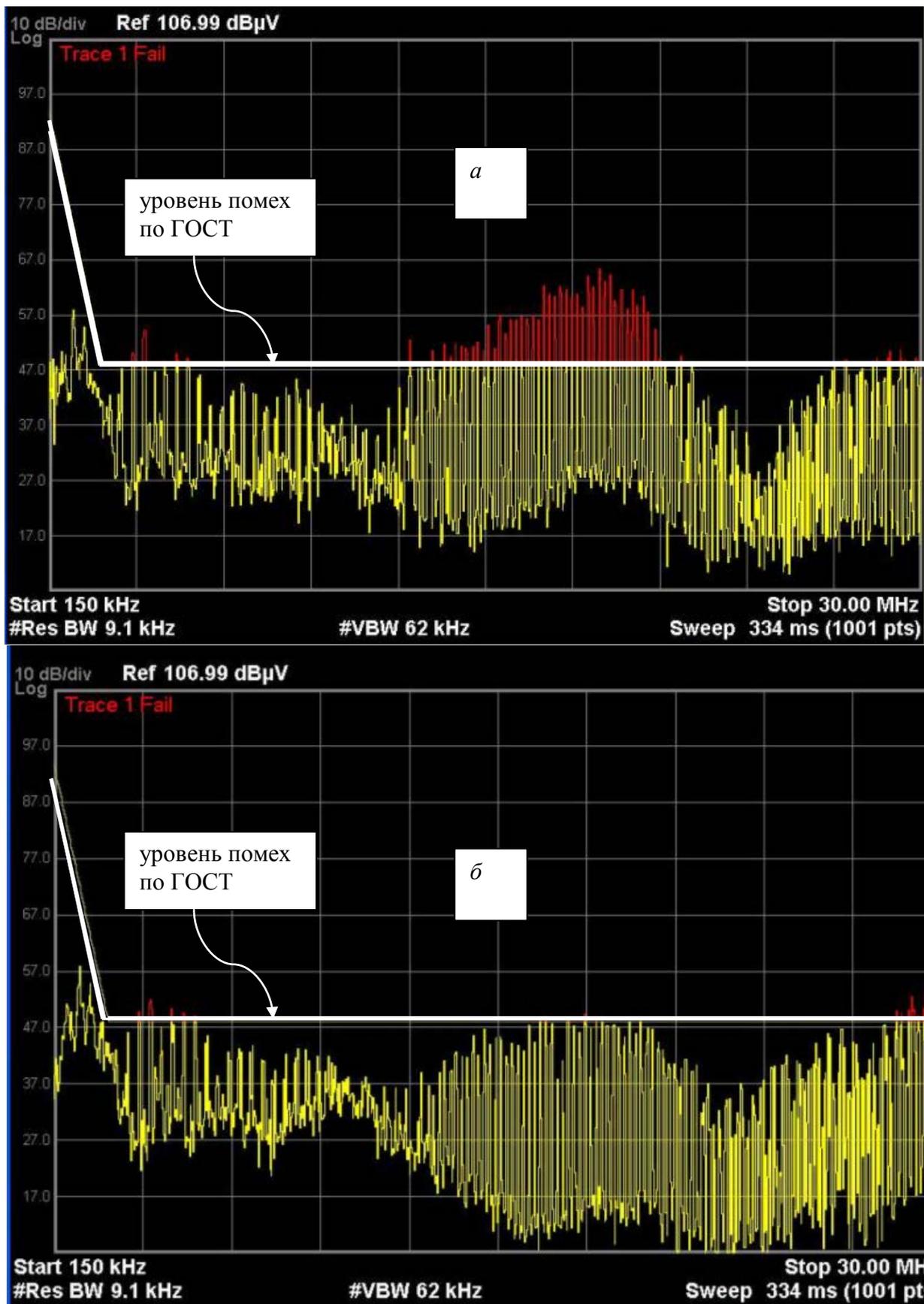


Рис. 2. Спектрограмма помех от системы диагностики:
 а) без фильтра; б) с фильтром

модуль защиты и фильтрации MPM2-B5 согласно техническому описанию [5] эффективно подавляет помех в диапазоне от 3 МГц до 20 МГц. Но в диапазонах 2,0–2,5 МГц и 25–30 МГц фильтр работает неэффективно и уровень кондуктивных помех остался на прежних уровнях, превышающих рекомендуемый ГОСТ [4]. Для уменьшения уровня кондуктивной помехи в указанных диапазонах необходимо принять дополнительные меры. Для уменьшения низкочастотных (по спектрограмме) помех рекомендуем использовать дополнительный фильтр низких частот, а высокочастотных – создать дополнительную экранировку кабелей и компонентов системы диагностики.

Аналогичная система диагностики с применением рекомендованных мер была исследована в аккредитованной лаборатории ЭМС АО «Тестприбор». Результаты приведены на рис. 3. Из спектрограммы следует, что в диапазоне частот от 150 кГц до 30 МГц превышений допустимого уровня кондуктивных помех не обнаружено.

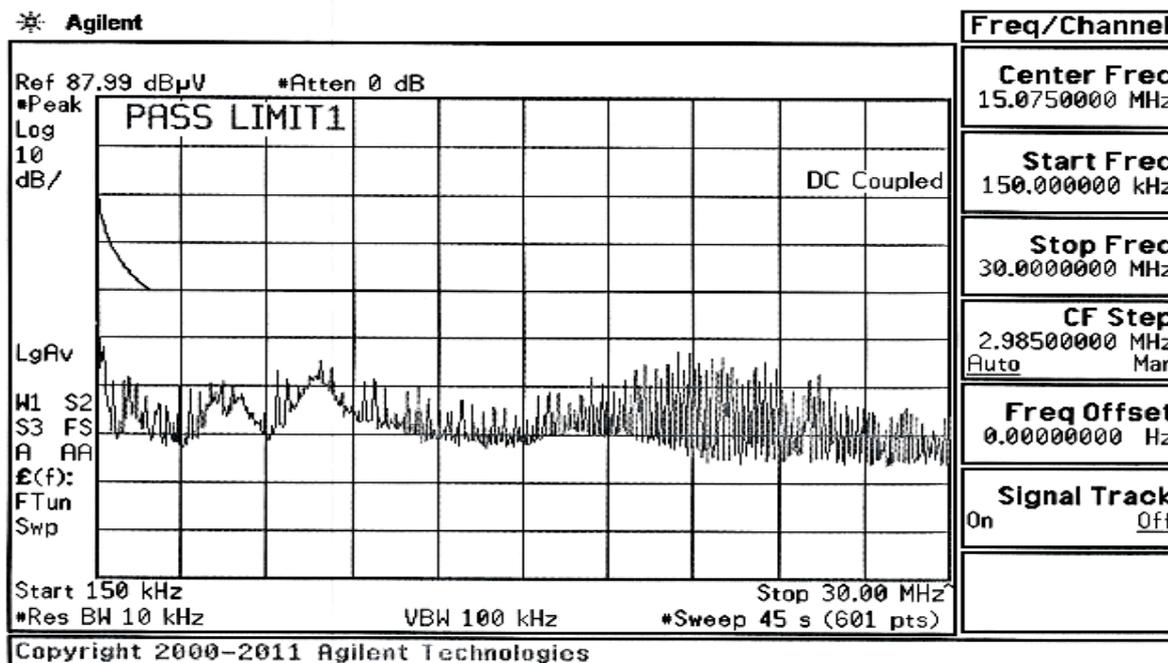


Рис. 3. Спектрограмма помех от системы диагностики по данным

Список литературы

1. Харлов Н. Н., Электромагнитная совместимость в электроэнергетике: учебное пособие. Томский политехнический ун-т, 2007. 211 с.
2. Газизов Т. Р. Основы электромагнитной совместимости радиоэлектронной аппаратуры: учебное пособие. Томский гос. ун-т систем управления и радиоэлектроники, 2012. 256 с.

3. *Ромащенко М. А.* Основы внутриаппаратурной электромагнитной совместимости: учебное пособие. Воронежский гос. технический ун-т, 2015. 144 с.
4. Государственный стандарт ГОСТ РВ 6601-002. Оборудование бортовое авиационное. Общие требования к допустимым уровням создаваемых электромагнитных помех и методики их измерений. 2009. 41 с.
5. Модули защиты и фильтрации. Серия МРМ 2,5-20 А. URL: http://www.rkt.ru/files/filters_dc.pdf (дата обращения: 30.05.2019).

РАВНОВЕСНЫЙ МАГНИТНЫЙ ОТКЛИК СУСПЕНЗИИ АНИЗОМЕТРИЧНЫХ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ

А. С. Трушников^a, А. А. Кузнецов^{a,b}

^aПермский государственный национальный исследовательский университет, 614990, Пермь, Букирева, 15

^bИнститут механики сплошных сред УрО РАН, 614013, Пермь, Королева, 1

Метод ланжевеновской динамики использовался для численного исследования влияния анизотропии магнитных наночастиц на равновесные свойства суспензий на их основе. Для различных объёмных долей наночастиц построены кривые намагничивания, а также вычислен параметр ориентационного порядка системы в нулевом поле.

Ключевые слова: магнитные наночастицы; суспензия; равновесная кривая намагничивания; параметр ориентационного порядка

EQUILIBRIUM MAGNETIZATION CURVE SUSPENSION OF ANISOMETRIC MAGNETIC NANOPARTICLES

A. S. Trushnikov^a, A. A. Kuznetsov^{a,b}

^aPerm State University, Bukireva St. 15, 614990, Perm

^bInstitute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Korolyov St. 1, 614013, Perm

The Langevin dynamics simulations are used to study the effect of magnetic nanoparticles anisotropy on the equilibrium properties of magnetic suspensions. For various volume fractions of nanoparticles, magnetization curves were obtained, and the zero-field orientational order parameter was calculated.

Keywords: magnetic nanoparticles; suspension; equilibrium magnetization curve; orientation order parameter

1. Введение

Принято считать, что магнитные жидкости являются парамагнетиками. Однако теоретически было предсказано, что спонтанное ориентационное упорядочение магнитных моментов потенциально может наблюдаться в ансамбле взаимодействующих магнитных наночастиц [1]. То есть гипотетически магнитные жидкости могут вести себя не только как парамагнетики, но и как ферромагнетики. Так в 2015 году был создан новый тип магнитной жидкости, в которой, по утверждению авторов статьи [2], наблюдалось упорядочивание магнитных моментов.

Хорошо известно, что спонтанное ориентационное упорядочение («нематический порядок») возможен в концентрированной суспензии бесконечно тонких твёрдых немагнитных дисков [3]. Однако теоретических или вычислительных исследований систем

взаимодействующих анизометричных частиц, обладающих также и магнитными свойствами, до сих пор не проводилось.

Целью работы является исследование влияния анизотропии магнитных наночастиц на равновесные свойства суспензий на их основе. Основным методом исследования – это численное моделирование методом ланжевеновской динамики.

2. Постановка проблемы и методы решения

В данной работе рассматривается ансамбль анизометричных дипольных частиц, помещённых в объём куба, на стенки которого наложены периодические граничные условия. Пусть в нашем случае частицы представляют собой сферы, объединённые в гексагональную форму, с равными по модулю дипольными магнитными моментами, всегда перпендикулярными плоскости их горизонтальной симметрии (рис. 1). Эти анизометричные магнитные частицы (далее будем называть их гексагонами) состоят из семи сферических частиц (с равными диаметрами d), которые делятся на одну центральную и шесть боковых (центры которых равноудалены от центра центральной частицы на расстояние d). Боковые частицы (далее будем называть их виртуальными) жёстко закреплены за центральной, тем самым, представляя собой одно целое с ней. Каждый гексагон обладает одинаковой массой m , которая равномерно распределена в центральной частице.

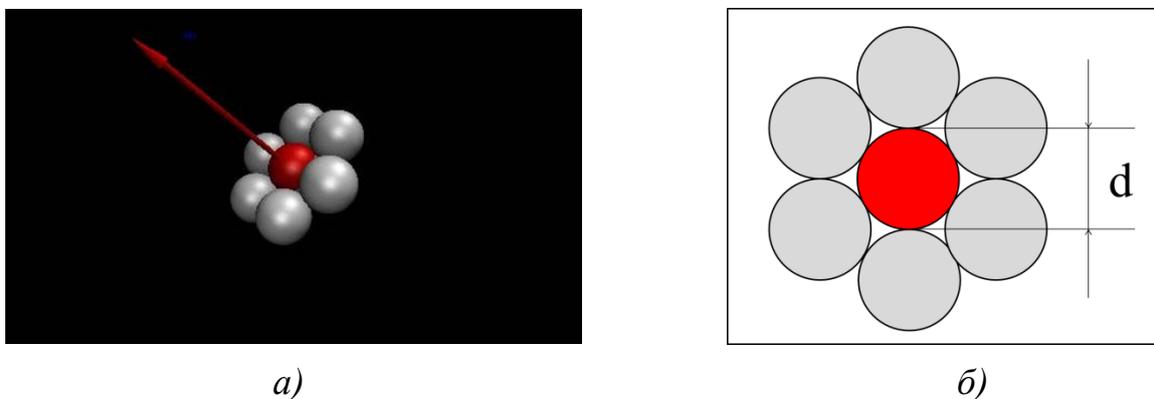


Рис. 1. а) Снимок одного гексагона с указанным магнитным моментом (одна из сторон центральной частицы покрашена другим цветом, чтобы показать ориентацию диполя); б) Гексагон, горизонтальный срез

Наша система состоит из N числа гексагонов, объёмная доля которых равна f и модуль магнитного момента каждого гексагона – $|\mu|$. Напряжённость же однородного внешнего магнитного поля обозначим \mathbf{H} . Все гексагоны в начальный момент времени хаотически расположены в выделенном им кубическом объёме V , также как и направления их диполей.

В рамках данной работы необходимо построить кривые намагничивания гексагонов для соответствующих объёмных долей f , а также вычислить параметр ориентационного порядка (далее – параметр

порядка) их магнитных диполей в отсутствии внешнего магнитного поля. Вычисление параметра порядка будем производить по формуле, предложенной в статье [4]:

$$S = \frac{3}{2} \left(\frac{1}{N^2} \sum_{kl} (\boldsymbol{\mu}_k \boldsymbol{\mu}_l)^2 - \frac{1}{3} \right),$$

где $\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\mu}_l$ – магнитные моменты k -ой и l -ой частицы.

Для описания поступательного и вращательного движений гексагонов воспользуемся модифицированными уравнениями Ланжевена для расчёта координат положения центральных частиц и их поворота. Так как виртуальные частицы жёстко закреплены за ней, то их положение будет полностью определяться местоположения и ориентацией центральной частицы. Воспользуемся известными уравнениями, учтём вклад виртуальных частиц и составим следующую систему уравнений для описания движения центральных частиц:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \frac{\partial u_i}{\partial \mathbf{r}_i} - \gamma_T \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} + \boldsymbol{\xi}_T + \sum_a \mathbf{f}_{V_a}, \quad (1)$$

$$J \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = - \left[\boldsymbol{\mu}_i \times \frac{\partial u_i}{\partial \boldsymbol{\mu}_i} \right] - \gamma_R \boldsymbol{\omega}_i + \boldsymbol{\xi}_R + \sum_a \boldsymbol{\tau}_{V_a}, \quad (2)$$

$$u_i = \sum_{i \neq j} u_{WCA}(\mathbf{r}_{ij}) - \mu_0 \boldsymbol{\mu}_i \mathbf{H}. \quad (3)$$

Опишем данную систему уравнений:

1) Уравнение (1), отвечающее за поступательное движение i -ой частицы, где m – это масса частицы; \mathbf{r}_i – радиус-вектор до i -ой частицы; t – время; u_i – энергия i -ой частицы; γ_T – коэффициент трения поступательного движения; $\boldsymbol{\xi}_T$ – тепловой шум, действующий на поступательные степени свободы; $\sum_a \mathbf{f}_{V_a}$ – слагаемое, учитывающее вклад сил \mathbf{f}_{V_a} поступательного движения a -ых виртуальных частиц.

2) Уравнение (2), отвечающее за вращательное движение i -ой частицы, где J – момент инерции частицы; $\boldsymbol{\omega}_i$ – угловая скорость i -ой частицы; $\boldsymbol{\mu}_i$ – собственный магнитный момент i -ой частицы; γ_R – коэффициент трения вращательного движения; $\boldsymbol{\xi}_R$ – тепловой шум, действующий на вращательные степени свободы; $\sum_a \boldsymbol{\tau}_{V_a}$ – слагаемое, учитывающее вклад сил $\boldsymbol{\tau}_{V_a}$ вращательного движения a -ых виртуальных частиц.

3) Уравнение (3), отвечающее за энергию i -ой частицы, где $u_{WCA}(\mathbf{r}_{ij})$ – потенциал Вика-Чандлера-Андерсена (рассмотренный ниже); μ_0 – магнитная постоянная.

В качестве модели взаимодействия данных частиц возьмём модифицированную модель парного взаимодействия потенциала Леннарда-

Джонса (4), а именно потенциал Вика-Чандлера-Андерсена (5). Следующие формулы:

$$u_{LJ}(\mathbf{r}_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{d}{\mathbf{r}_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{d}{\mathbf{r}_{ij}} \right)^6 \right], \quad (4)$$

$$u_{WCA}(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} u_{LJ}(\mathbf{r}_{ij}) + \varepsilon, & |\mathbf{r}_{ij}| < 2^{\frac{1}{6}}d \\ 0, & |\mathbf{r}_{ij}| \geq 2^{\frac{1}{6}}d \end{cases}, \quad (5)$$

где \mathbf{r}_{ij} – вектор расстояния между i -ой и j -ой частицами; ε – глубина потенциальной ямы. Для потенциала Леннарда-Джонса член $(d/\mathbf{r}_{ij})^{12}$ отвечает силам отталкивания между частицами, а член $(d/\mathbf{r}_{ij})^6$ – их притяжению. Потенциал Вика-Чандлера-Андерсена – это сдвинутый и усечённый по форме потенциал Леннарда-Джонса, учитывающий лишь отталкивающую часть взаимодействия [5].

В ходе дальнейшей вычислительной работы будем считать, что величины, такие как масса, расстояние и магнитный момент имеют следующие единицы измерения: масса $[m]$ = единица массы (ед. м.), расстояние $[r]$ = единица диаметра частицы (е. д. ч.), магнитный момент $[\mu]$ = единица магнитного момента (ед. маг. мом.). Следовательно, все остальные величины, такие как время t , сила F , потенциальная энергия u и т. п. будут измеряться с помощью введённых выше единиц измерения.

Для решения данной системы уравнений (1) – (3) напомним программные коды на языке программирования Python для универсального программного пакета ESPResSo [6], предназначенного для выполнения и анализа многочастичных симуляций молекулярной динамики.

Настроим начальные параметры входа для нашей моделируемой суспензии. Определим: число гексагонов $N = 100$, модуль их магнитного момента $|\boldsymbol{\mu}| = 1$. Направим вектор однородного внешнего магнитного поля вдоль одной из декартовых осей (в программе реализовано для оси Z). Остальные же параметры, такие как температура $T = 1$, трение $\gamma = 1$ и др., взяты исходя из стандартных настроек ESPResSo для симуляции потенциала Леннарда-Джонса. Параметры, которые мы будем варьировать в данной работе: объёмная доля частиц f , модуль напряжённости однородного магнитного поля $|\mathbf{H}|$.

3. Результаты

На рис. 2а мы можем наблюдать изменение намагничивания гексагональной частицы в системе для разных концентраций при изменении внешнего магнитного поля. Синей линией указана классическая функция Ланжевена, которой соответствует равновесное состояние слабоконцентрированной монодисперсной коллоидной магнитной жидкости под действием внешнего магнитного поля [7]. Она имеет следующий вид:

$$L(\alpha) = cth(\alpha) - \frac{1}{\alpha^2}, \text{ где } \alpha = \frac{H}{T}.$$

Полученные значения для объёмной доли в точности ложатся на теоретическую кривую функции Ланжевена. С увеличением же объёмной доли (значит и концентрации) для сильных магнитных полей наблюдается рост кривой намагничивания суспензии гексагонов. При слабых полях, сильных расхождений с функцией Ланжевена не наблюдается.

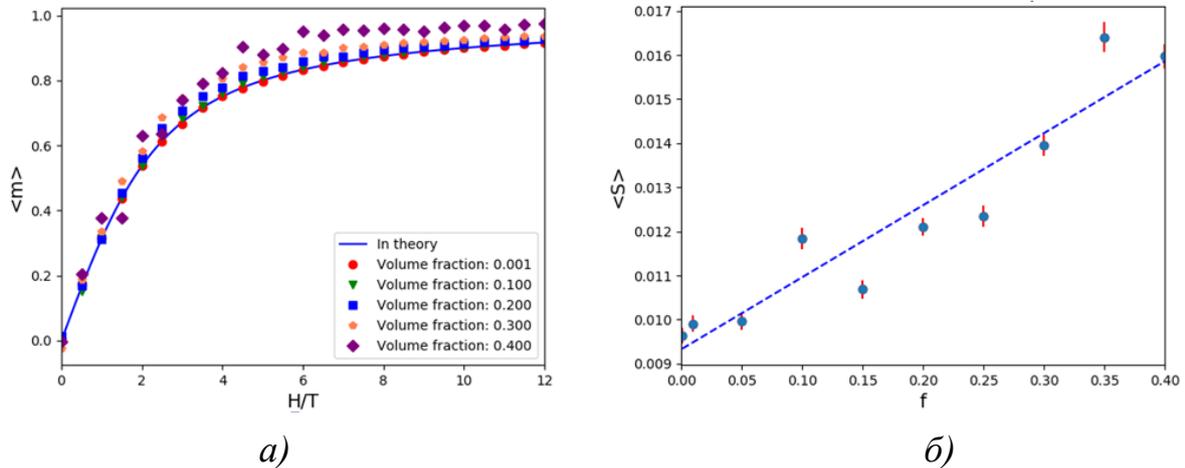


Рис. 2. а) Ансамбль кривых намагничивания (здесь $\langle t \rangle$ – среднее значение проекции магнитного момента для равновесного состояния, H/T – отношение энергии частицы в магнитном поле к температуре, выраженной в энергетических единицах). Сплошная линия – теория Ланжевена; б) График зависимости среднего значения параметра порядка $\langle S \rangle$ от объёмной доли гексагонов f

На рис. 2б мы можем наблюдать слабую тенденцию к упорядочению магнитных моментов суспензий гексагонов. Явно виден рост параметра порядка с увеличением концентрации, однако его значение ~ 0.01 , что соответствует в статье [4] изотропной, а не упорядоченной фазе (т.к. в нашем случае $1/N = 0.01$).

4. Заключение

Было численно исследовано влияние анизотрии магнитных наночастиц на равновесные свойства суспензии на их основе. Было продемонстрировано, что наличие анизотропных стерических взаимодействий ведёт к усилению магнитного отклика системы. Эффект наиболее выражен в сильных полях, в то время как начальный участок кривой намагничивания почти не отклоняется от классического ланжевеновского закона для идеального парамагнитного газа. Установлено, что исследованная система не проявляет признаков спонтанного ориентационного упорядочения. В отсутствие магнитного поля она остаётся изотропной в широком диапазоне концентраций дисперсной фазы. Мы предполагаем, что отсутствие упорядочения

связано с недостаточной анизотропией частиц. В нашем случае отношение сторон (аспектное отношение) составляло 1:3, тогда как «ферромагнитные» жидкости из работы [2] содержали частицы с аспектным отношением 1:7.

В дальнейшем учтём анизотропию частиц с помощью потенциала Гей-Берне (Gay-Berne) – модификации потенциала Леннард-Джонса для моделирования стерического отталкивания между мягкими эллипсоидами. Потенциал Гей-Берне позволит нам изменять аспектное отношение анизотропичных частиц в широком диапазоне. Также будет исследована роль магнитного диполь-дипольного взаимодействия между частицами, которое в данной работе не учитывалось.

Список литературы

1. *Hucke B., Lucke M.* Magnetic properties of colloidal suspensions of interacting magnetic particles // *Reports on Progress in Physics*. 2004. Vol. 67 (10). P. 1731–1768.
2. *Shuai M., Klitnick A., Shen Y., et al.* Spontaneous liquid crystal and ferromagnetic ordering of colloidal magnetic nanoplates // *Nature Communications*. Vol. 7. 10394.
3. *Frenkel D., Eppenga R.* Monte Carlo study of the isotropic-nematic transition in a fluid of thin hard disks // *Physical review letters*. 1982. Vol. 49 (15). P. 1089–1092.
4. *Vieillard-Baron J.* The equation of state of a system of hard spherocylinders // *Molecular Physics*. 1974. Vol. 28 (3). P. 809–818.
5. *Weeks J. D., Chandler D., Andersen H. C.* Role of repulsive forces in determining the equilibrium structure of simple liquids // *The Journal of chemical physics*. 1971. Vol. 54 (12). P. 5237–5247.
6. *Limbach H.-J., Arnold A., Mann B. A., Holm C.* ESPResSo – An extensible simulation package for research on soft matter systems // *Computer Physics Communications*. 2006. Vol. 174 (9). P. 704–727.
7. *Розенцвейг Р.* Феррогидродинамика. М.: Мир, 1989. 357с.

Научное издание

Физика для Пермского края

Материалы региональной научно-практической конференции
студентов, аспирантов и молодых ученых

Выпуск 12

Издается в авторской редакции

Техническая подготовка и обработка материалов:
Н. Н. Картавых

Объем данных 14 Мб
Подписано к использованию 05.09.2019

Размещено в открытом доступе
на сайте www.psu.ru
в разделе НАУКА / Электронные публикации
и в электронной мультимедийной библиотеке ELiS

Издательский центр
Пермского государственного
национального исследовательского университета
614990, Пермь, ул. Букирева, 15