

РАЗДЕЛ I. ТРУДЫ УЧЕНЫХ АЛТАЙСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

УДК 533.9.082.5

МЕТОДЫ ОПТИЧЕСКОЙ ДИАГНОСТИКИ ЧАСТИЦ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОТОКАХ

П.Ю. Гуляев, А.В. Долматов, В.А. Попов, Г.Н. Леонов

Статья посвящена разработке обобщенной математической модели оптического прибора для диагностики плазменных потоков. Задача измерения параметров дисперсно-фазной среды приведена к задачам вычислительной диагностики в томографии и дисперсного анализа мутных сред. В модели учтены особенности сканирования частиц дисперсно-фазной среды датчиками в режиме накопления заряда.

Ключевые слова: моделирование, оптический прибор, диагностика, плазменный поток

Введение

В области исследования теплофизических параметров дисперсно-фазных плазменных потоков (ДФПП) методы оптической диагностики призваны решать следующие задачи контроля распределения частиц:

- по температурам;
- по скорости;
- по размерам.

В основе диагностики лежат интегральные измерительные соотношения, которые соответствуют трем типам преобразований светового потока в оптических схемах (ОС) измерений [1, 2]:

- проекционные ОС – интегральное преобразование Радона;
- дифракционно-интерференционные – интегральное преобразование Фурье;
- спектральные – интегральное уравнение Фредгольма.

В общем виде работа виртуального прибора оптической диагностики плазменного потока выглядит следующим образом (рис.1). На входе в прибор излучение ДФПП проходит через ОС и попадает на датчики измерительной системы, которые обеспечивают интегрирование светового потока, работая в режиме накопления заряда. Сигнал с датчиков подается в блок обработки, где редуцируется распределение частиц. Таким образом, входному световому потоку излучения от дисперсно-фазной среды (ДФС) виртуальный прибор ставит в соответствие распределение частиц

в этой среде по параметру, зависящему от вида ОС [3, 4].

Целью настоящей статьи является разработка обобщенной математической модели работы виртуального прибора оптической диагностики плазменных потоков интегральными методами контроля на примере импульсного слабо запыленного потока частиц, поочередно и в случайный момент времени пересекающих измерительный объем. Такая модель так же справедлива для контроля неподвижной ДФС и оптической измерительной системы (ИС) с известным законом сканирования измерительного объема, заполненного случайным образом частицами, размер которых не меньше величины оптической разрешающей способности прибора.

В случае ДФПП сканирование частиц обеспечивается движением потока относительно ИС. Каждой частице соответствует свое значение контролируемого физического параметра z_j , связанного с интенсивностью оптического излучения $\zeta_i(x)$ законом физической оптики $A(z_j, x)$, например дифракционного рассеяния, спектром теплового излучения, лучевой проекции и т.п. При этом x - регистрируемый параметр оптического излучения (угол дифракционного рассеяния, длина волны, координата проекции и т.п.). Фотоприемник и тракт ИС вносят искажения в оптический сигнал, которые описываются соот-

ветствующими аппаратными функциями $k_1(x)$ и $k_2(x)$ (спектральная чувствительность, дифракционный предел разрешающей способности, абберации и т.п.). Тогда, преобразование величины контролируемого параметра z_j в выходной электрический сигнал $g_i(x) = A(z_i, x) k_1(x) k_2(x)$, может быть описано с помощью обобщенной аппаратной функции всего прибора в целом $K(z, x)$, а входной оптический сигнал, зарегистрированный за время полного сканирования всех частиц, в интегральном виде:

$$\zeta(x) = \sum \zeta_i = \int A(z, x) f(z) dz,$$

где $f(z) = di/dz$ – искомая функция распределения контролируемого параметра ДФС.

Решение задачи состоит в определении функции $f(z)$ по выходному сигналу ИС, когда оптический параметр x взаимно однозначно

определяется координатой точки сканируемого изображения, например, когда каждому элементу изображения соответствует своя длина волны, угловой или линейный параллакс световых лучей рассеянных или излучаемых частицами ДФС. В простейшем случае проекционной ОС параметр x может быть просто координатой изображения частицы. Прямую задачу измерения можно записать в интегральном виде:

$$\begin{aligned} g(x) &= k_1(x) k_2(x) \zeta(x) = \\ &= \int [k_1(x) k_2(x) A(z, x)] f(z) dz = \\ &= \int K(z, x) f(z) dz \end{aligned}$$

которая в дискретном виде соответствует операторному уравнению $g = Af$ – для идеального прибора, и $g = Kf$ – для реального прибора.

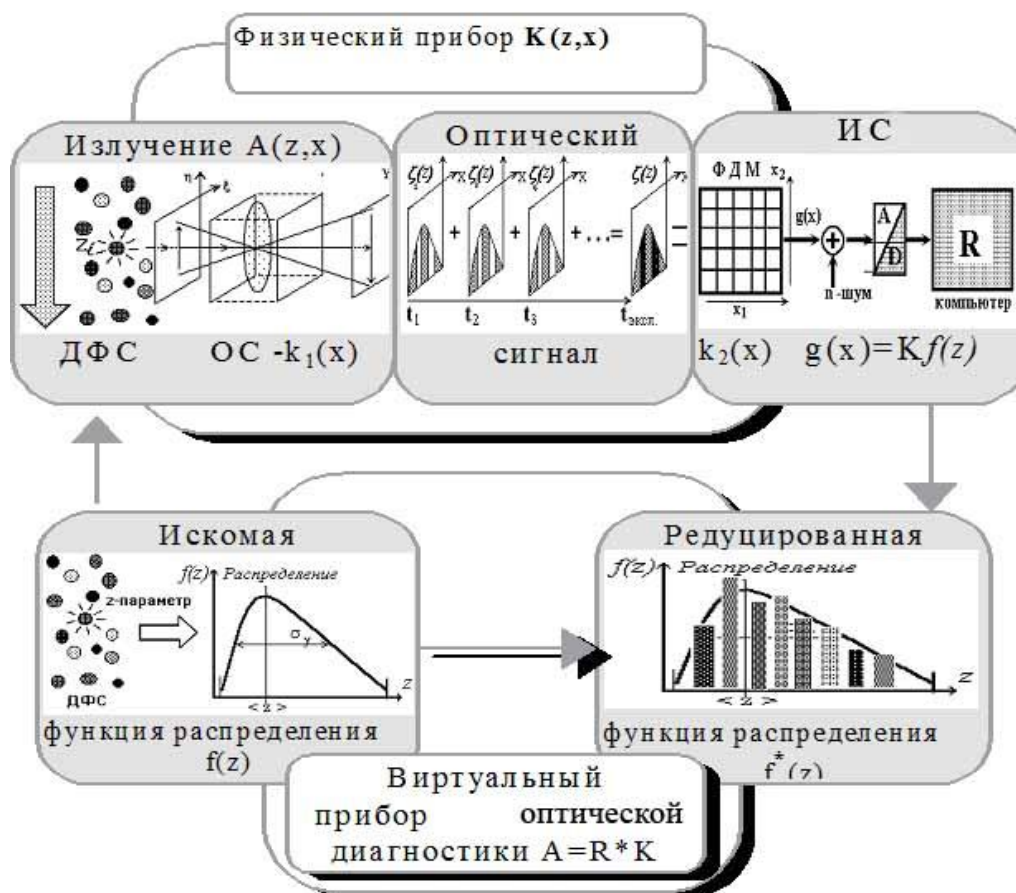


Рисунок 1 – Обобщенная функциональная схема виртуального прибора оптической диагностики плазменных потоков

РАЗДЕЛ I. ТРУДЫ УЧЕНЫХ АЛТАЙСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Рассмотрим задачу определения величины f прибором A по результатам косвенных измерений g . Конкретный вид оператора A определяется физическим методом измерения и аппаратной функцией прибора $k(r, \dots)$, но предполагается выполнение основного интегрального измерительного уравнения диагностики:

$$g = Af; \quad g_i = \int_a^b k_i(r) f(r) dr, \quad (1)$$

На практике истинное значение g никогда не известно, так как оно всегда содержит некоторую экспериментальную ошибку n . Поэтому измеренные данные g_d можно представить в виде

$$g_d = g + n, \quad (2)$$

где g_d - известная матрица размера $M \times 1$, а n - матрица экспериментальных ошибок размера $M \times 1$.

Решение задачи диагностики сводится к процедуре подбора искомой функции f и минимизации следующей положительной величины:

$$U = (g_d - Af)^+ (g_d - Af) + \gamma_1 (f - f_0)^+ (f - f_0) + \gamma_2 (Bf)^+ (Bf), \quad (3)$$

где индекс «+» обозначает комплексное сопряжение и транспонирование, γ_1 и γ_2 - положительные константы, f_0 - «пробная» функция, а B - матрица размера $M \times M$, описывающее некоторое сглаживание f . Первый член в (3) является мерой точности f , даваемой формулой (1). Заметим, что если экспериментальных ошибок нет, то $g_d = g, \gamma_1 = \gamma_2 = 0, U = 0$ - минимальное значение U и решением является $f = A^{-1}g$. Второй член в (3) указывает на отклонение f от пробной функции f_0 , а третий член характеризует отклонение f от идеального сглаживания, соответствующего $(Bf) = 0$. Обычно (Bf) описывает первую или вторую производную.

Рассмотрим случай $\gamma_2 = 0$. Дифференцируя U по f , находим

$$f = (A^+ A + \gamma_1 I)^{-1} (A^+ g_d + \gamma_1 f_0), \quad (4)$$

где I - квадратная матрица размера $N \times N$.

Выбор γ_1 должен быть сделан так, чтобы обеспечить разумный компромисс между первым и вторым членами в (3). Если γ_1 мало, то преобладает первый член, и решение является сильно осциллирующим. Если γ_1 велико, то преобладает второй член, и решение получается сильно сглаженным

В случае $\gamma_1 = 0$ решение имеет вид

$$f = (A^+ A + \gamma_2 B^+ B)^{-1} A^+ g_d \quad (5)$$

Матрица B может быть взята в виде

$$B = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & & \\ 0 & 1 & -2 & 1 & & \\ \vdots & & & & & \\ \vdots & & & & & \\ & 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ & & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

B представляет собой дискретный аналог второй производной f .

Заключение

Таким образом, основная задача измерения параметров ДФС приведена к постановке, аналогичной задачам вычислительной диагностики в томографии и дисперсионном анализе мутных сред по характеристикам рассеянного излучения. Данная постановка сделана в самых общих допущениях относительно свойств ОС измерения и контролируемых параметров. Она охватывает широкий класс физических приборов контроля, благодаря учтенным в модели особенностям сканирования частиц ДФС датчиками ИС, использующими режим накопления заряда. При этом виртуальный прибор как обычный физический прибор можно характеризовать тремя паспортными данными:

$$\begin{cases} H(\varepsilon, \delta) = E \|n\|^2, \\ G(\varepsilon, \delta) = \|K - K_0\|^2 \\ q(\varepsilon, \delta) \leq \delta \end{cases}$$

где $H(\varepsilon, \delta)$ - уровень аппаратных шумов, приведенных ко входу, $G(\varepsilon, \delta)$ - невязка, $q(\varepsilon, \delta)$ - качество прибора K_0 [5].

ВОССОЗДАНИЕ КОНФИГУРАЦИЙ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ НА ОСНОВЕ ЭМПИРИЧЕСКИХ ДАННЫХ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Математические задачи компьютерной томографии / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин, А.А. Тимонов. – М.: Наука, 1988. – 158 с.
2. Залманзон, Л.А. Преобразования Фурье, Уолша, Хаара и их применение в управлении, связи и других областях. – М.: Наука, 1989. – 496 с.
3. Гуляев, П.Ю. Виновский критерий выбора параметров редукции температурного распределения частиц по их суммарному тепловому спектру / П.Ю. Гуляев, В.И. Иордан, И.П. Гуляев, А.А. Соловьев // Изв. вузов. Физика.-2008.– Т. 51, № 9-3. – С. 69 – 76.
4. Гуляев, П.Ю. Оптико-электронная система диагностики двухфазных потоков динамическим методом счета частиц / П.Ю. Гуляев, В.И. Иордан, И.П. Гуляев, А.А. Соловьев // Изв. вузов. Физика.– 2008. – Т. 51, № 9-3. – С. 79 – 87.
5. Гуляев, П.Ю. Моделирование технологических процессов плазменного напыления покрытий наноразмерной толщины/ П.Ю. Гуляев, И.П. Гуляев // Системы управления и информационные технологии.- 2009, № 1.1 (35). – С.144-148.
6. Гуляев, П.Ю. Физические принципы диагностики в технологиях плазменного напыления / П.Ю. Гуляев, А.В. Долматов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук.- 2009.- т. 11, №5(2).- С. 382-385

Д.т.н., профессор Гуляев П.Ю., к.т.н., доцент Долматов А.В., тел. 8-963-492-48-46, - gulyaev1954@mail.ru, Югорский государственный университет; д.ф.-м.н., профессор Попов В.А., д.ф.-м.н., профессор Леонов Г.Н., тел. (3852) 29-08-62 Алтайский государственный технический университет

УДК 539.183.5

ВОССОЗДАНИЕ КОНФИГУРАЦИЙ ЭЛЕКТРОННЫХ ОБОЛОЧЕК АТОМОВ НА ОСНОВЕ ЭМПИРИЧЕСКИХ ДАННЫХ

М.А. Баранов

Представление радиального распределения электронной плотности атома вполне определённой асимптотической функцией с максимумом допускает получение точного аналитического вида потенциала межатомного взаимодействия. Данное обстоятельство оказывается принципиальным как в определении параметров электронных распределений, так и в последующем прогнозировании свойств веществ сложного химического состава.

Ключевые слова: атом, электронная оболочка, потенциал, взаимодействие, химический состав

Введение

Бесконечное разнообразие свойств веществ образованных атомами сравнительно небольшого числа элементов обусловлено, в конечном счёте, законами межатомного взаимодействия, которые, в свою очередь, определяются конфигурациями электронных оболочек атомов. Знание законов взаимодействия атомов произвольного сорта в различных веществах позволяет существенно сократить поиск и создание веществ с заданным набором физико-механических свойств. Наиболее часто применяемый для этого полуэмпирический подход подразумевает задание потенциальной функции из соображений «здравого смысла» и определение её параметров исходя из экспериментальных данных о свойствах тех или иных веществ. Фактические возможности полуэмпирического подхода ограничены хотя бы потому, что построенные таким образом потенциалы оказываются приспособленными для описания взаимодействий атомов только в данном, уже исследованном веществе. При этом начальная цель –

прогнозирование и программирование свойств ранее неизвестных веществ не достигается. Количественное же описание «из первых принципов» может быть проведено лишь для «правильных» структур – изолированных атомов, идеальных кристаллов, простейших молекул.

В этой связи имеет смысл аппроксимировать не потенциальные функции, а функции распределения электронной плотности сопутствующей каждому атому. При этом не обойтись без упрощающих предположений, которые бы, с одной стороны, позволили произвести необходимые расчёты, а с другой – были бы способны обеспечить достаточную адекватность.

Описание модели

Из классических знаний об атоме нам понадобится лишь то, что он представляет собой ядро, окружённое электронными оболочками. Распределение электронов в атоме представим состоящим из двух сферически симметричных недеформируемых оболочек – внутренней и внешней. В силу их сфериче-