ISSN 1727-2769

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

№ 1 (50)
ЯНВАРЬ–МАРТ
2021

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Журнал публикует статьи о новых конкретных результатах законченных оригинальных и особенно имеющих приоритетный характер исследований в области инноваций, а также в области физико-математических и технических наук по группам специальностей (в соответствии с распоряжением Минобрнауки России от 28.12.2018 № 90-р):

Физико-математические науки

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

05.12.04 – Радиотехника, в том числе системы и устройства телевидения

05.12.07 – Антенны, СВЧ устройства и их технологии

05.12.13 – Системы, сети и устройства телекоммуникаций

05.12.14 – Радиолокация и радионавигация

Технические науки

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

01.04.10 – Физика полупроводников

01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

05.09.01 – Электромеханика и электрические аппараты

05.12.04 – Радиотехника, в том числе системы и устройства телевидения

05.12.07 – Антенны, СВЧ устройства и их технологии

05.12.13 – Системы, сети и устройства телекоммуникаций

05.12.14 – Радиолокация и радионавигация

Все рукописи рецензируются, по результатам рецензирования редколлегия принимает решение о целесообразности опубликования материалов. Для авторов публикация является бесплатной.

Редакция журнала «Доклады АН ВШ РФ» просит авторов при подготовке статей строго соблюдать правила, доступные по адресу http://journals.nstu.ru/doklady/rules. Статьи, оформленные с нарушением правил, отклоняются без рецензирования.

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

2021 январь–март № 1 (50)

Выходит четыре раза в год

ISSN 1727-2769

Учредитель

Новосибирский государственный технический университет

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций в 2021 г. (свидетельство ПИ № ФС 77–81374 от 30.06.2021 г.)

Адрес редакции, издателя: 630073, Новосибирск, пр. К. Маркса, 20, НГТУ, корп. 1, ком. 346, телефон: (383) 315-39-42. Email: danvshrf@corp.nstu.ru

S C I E N T I F I C J O U R N A L

PROCEEDINGS OF THE RUSSIAN HIGHER SCHOOL ACADEMY OF SCIENCES

2021 | January – March | № 1 (50)

Journal is published quarterly

ISSN 1727-2769

Journal was established by

Novosibirsk State Technical University

Editor and Publisher Address: Office 346, 20 bld. 1, K. Marx Prospect, Novosibirsk, 630073, Russian Federation. Tel: +7 (383) 346-29-18. Email: danvshrf@corp.nstu.ru

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ

2021 январь–март № 1 (50)

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

PROCEEDINGS OF THE RUSSIAN HIGHER SCHOOL
ACADEMY OF SCIENCES

2021 January – March № 1 (50)

CONTENTS

PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

TECHNICAL SCIENCES

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ
2021 январь–март № 1 (50)

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 531.19, 535.233, 536.3

ФЛУКТУАЦИОННО-ДИССИПАЦИОННАЯ ТЕОРЕМА И АВТОКОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ ТЕПЛОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Е.А. Краснопевцев
Новосибирский государственный технический университет

Представлен новый сравнительно простой вывод флуктуационно-диссипационной теоремы (ФДТ). Обобщенная координата системы изменяется переменным внешним воздействием и выражается при помощи причинной восприимчивости, ее фурье-образа – передаточной функции, обобщенных импеданса и активного сопротивления. Эти характеристики описывают тепловыделение на резисторе, результат обобщается на диссипативную систему, находящуюся под действием макроскопической силы. Флуктуационное напряжение на резисторе получается разложением теплового хаотического движения свободных зарядов вдоль проводника в ряд Фурье. Число стоячих волн и средняя энергия квантового колебательного состояния при фиксированной температуре дают тепловую мощность перемещения зарядов. Путем сравнения с законом Джоуля–Ленца и обобщения результата на произвольную изотермическую систему получаются средний квадрат флуктуирующей силы и дисперсия обобщенной координаты, вызванные тепловым движением. Через рассмотренные характеристики выражаются автокорреляционные функции обобщенной координаты, случайной силы и их спектральные плотности. Содержанием ФДТ является то, что мощность тепловыделения, спектральные плотности флуктуирующей силы и автокорреляции пропорциональны мнимой части передаточной функции системы. Результат применяется для теплового излучения в полости, стенки которой содержат электрические диполи, возбуждаемые тепловым движением. Получены передаточная функция, флуктуирующая сила, действующая на заряд, дисперсия напряженности электрического поля, временная автокорреляция напряженности и ее спектральная плотность. Для комплексной относительной автокорреляции напряженности получены ее вещественная и мнимая составляющие, модуль и фаза, найдено время когерентности.

Ключевые слова: флуктуационно-диссипационная теорема, автокорреляционная функция, тепловое излучение.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-7-18

Введение

Если действие слабой обобщенной силы вызывает у системы макропроцесс, выводящий ее из равновесия и приводящий к диссипации энергии, то согласно ФТД в равновесном изотермическом состоянии существует микропроцесс преобразования тепловой энергии во флуктуации макрохарактеристик. Активности обоих процессов пропорциональны мнимой части передаточной функции, т. е. фурье-образу восприимчивости системы к внешнему воздействию [1]. Теорема описывает тепловые флуктуации в классических и квантовых системах [2–5]. Согласованность между локальными флуктуациями, разделенными интервалом времени, описывается автокорреляционной функцией, определяющей степень интерференции полей. Применение теории к равновесному тепловому излучению, изложенное в [7, 8], рассмотрено в настоящей работе на основе, доступной студенту технического вуза.

1. Флуктуационно-диссипационная теорема

Восприимчивость системы $g_c(t)$ показывает степень влияния причины – слабой обобщенной силы $F(\tau)$ на следствие – обобщенную координату системы

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} g_c(t-\tau) F(\tau)\, d\tau . \tag{1}$$

Принцип причинности означает $g_c(t) = g_c(t)\, H(t)$, где $H(t)$ – функция включения. Применяем к (1) фурье-преобразование

$$g_c(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{g}_c(\omega) e^{-i\omega t} d\omega , \quad \tilde{g}_c(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} g_c(t) e^{i\omega t} dt \tag{2}$$

и аналогичные формулы для $x(t)$ и $F(\tau)$, получаем

$$\tilde{x}(\omega) = \tilde{g}_c(\omega)\, \tilde{F}(\omega) , \quad \tilde{\dot{x}}(\omega) = -i\omega\, \tilde{g}_c(\omega) \tilde{F}(\omega) , \tag{3}$$

где $\tilde{g}_c(\omega)$ – передаточная функция системы; $\dot{x}(t) \equiv dx/dt$. При $|\omega| \to \infty$ система не успевает реагировать на возмущение и $\tilde{g}_c(|\omega| \to \infty) \to 0$. Из (2) и (3) находим

$$\tilde{g}_c(-\omega) = \tilde{g}_c^*(\omega) , \qquad |\, \tilde{g}_c(-\omega)\,|^2 = |\, \tilde{g}_c(\omega)\,|^2 ,$$

$$\operatorname{Re} \tilde{g}_c(-\omega) = \operatorname{Re} \tilde{g}_c(\omega) , \quad \operatorname{Im} \tilde{g}_c(-\omega) = -\operatorname{Im} \tilde{g}_c(\omega) , \tag{4}$$

$$\tilde{g}_c(\omega) = \frac{\tilde{x}(\omega)}{\tilde{F}(\omega)} = \frac{i\, \tilde{\dot{x}}(\omega)}{\omega \tilde{F}(\omega)} . \tag{5}$$

У передаточных функций

$$\tilde{g}_{c;1}(\omega) = \frac{S}{\omega + i\varepsilon} , \quad \tilde{g}_{c;2}(\omega) = \frac{S}{(\omega + i\varepsilon)(\omega + ib)} , \tag{6}$$

где $\varepsilon = +0$; $b > 0$; $S = \text{const}$, отсутствуют особенности в верхней комплексной полуплоскости переменной ω. По теории вычетов получаем соответствующие восприимчивости

$$g_{c;1}(t) = -i\, S\, H(t) , \quad g_{c;2}(t) = -S\, \frac{1 - e^{-bt}}{b} H(t) . \tag{7}$$

Следовательно, в интеграле с причинной функцией множитель ω в знаменателе передаточной функции заменяется на $\omega + i\varepsilon$, где $\varepsilon = +0$, что соответствует сдвигу полюса функции $\tilde{g}_c(\omega)$ в отрицательную сторону мнимой оси.

По аналогии с электрической цепью определяем для системы импеданс и активное сопротивление:

$$Z(\omega) = \frac{\tilde{F}(\omega)}{\tilde{\dot{x}}(\omega)} , \quad R(\omega) = \operatorname{Re} Z(\omega) . \tag{8}$$

Из (5) и (8) находим

$$\tilde{g}_c(\omega) = \frac{i}{\omega Z(\omega)} , \tag{9}$$

тогда

$$\operatorname{Re}\tilde{g}_c(\omega)=\frac{\operatorname{Im}Z(\omega)}{\omega\,|\,Z(\omega)\,|^2},$$

$$\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)=\frac{\operatorname{Re}Z(\omega)}{\omega\,|\,Z(\omega)\,|^2}=\frac{R(\omega)}{\omega\,|\,Z(\omega)\,|^2}, \tag{10}$$

$$R(\omega)=\frac{\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)}{\omega\,|\,\tilde{g}_c(\omega)\,|^2},\quad R(-\omega)=R(\omega),$$

$$\operatorname{Im}Z(\omega)=\frac{\operatorname{Re}\tilde{g}_c(\omega)}{\omega\,|\,\tilde{g}_c(\omega)\,|^2}. \tag{11}$$

Диссипация энергии в макроскопической системе, вызванная действием слабой обобщенной силы $F(t)$, описывается слагаемым гамильтониана $H_I=-xF$, где x – обобщенная координата, канонически сопряженная с $F(t)$ и не зависящая явно от времени. Средняя по времени мощность выделения тепла

$$Q=\frac{d\overline{H_I}}{dt}=-\overline{x\frac{dF}{dt}}=\overline{\frac{dx}{dt}F}. \tag{12}$$

Универсальность связи, устанавливаемой ФДТ, позволяет при ее выводе рассмотреть процесс в конкретной системе и обобщить полученные результаты на другие случаи. Например, для электропроводности резистора $Q=\overline{IU}$. Сравнение с (12) дает соответствия: $F(t)\Rightarrow U(t)$ – напряжение; $dx/dt\Rightarrow dq/dt=I(t)$ – ток; $x\Rightarrow q\equiv\frac{1}{l}\sum_i q_i x_i$ – эффективный заряд резистора протяженностью l, где x_i – расстояние от конца резистора до заряда q_i, находящегося в объеме резистора. С учетом $U(t)=R\,I(t)$ для вещественного $U_\omega(t)$ с периодом $T=2\pi/\omega$ из (12) находим

$$Q_\omega=-\overline{q_\omega\frac{dU_\omega}{dt}}=-R(\omega)\,\overline{q_\omega\frac{dI_\omega}{dt}}\equiv-\frac{R(\omega)}{T}\int_0^T q_\omega(t)\frac{dI_\omega(t)}{dt}dt=$$

$$=\frac{R(\omega)}{T}\int_0^T I_\omega^2(t)\,dt=\frac{R(\omega)}{|\,Z(\omega)\,|^2}\overline{U_\omega^2(t)},$$

где выполнено интегрирование по частям и использовано $I_\omega=U_\omega/Z(\omega)$. Результат обобщаем на произвольную систему с диссипацией, тогда с учетом (10) мощность тепловыделения на частоте ω

$$Q_\omega=\frac{R(\omega)}{|\,Z(\omega)\,|^2}\overline{F_\omega^2}=\omega\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)\,\overline{F_\omega^2}. \tag{13}$$

Поскольку $Q_\omega\ge 0$, то $\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)\ge 0$ при $\omega>0$. Для резистора $Z(\omega)=R$, и из (6), (7), (9) находим $\tilde{g}_c(\omega)=\frac{i}{\omega R}$, $g_c(t)=\frac{1}{R}H(t)$. Следовательно, восприимчивость резистора равна кондактансу $G=1/R$.

Получим флуктуационное напряжение на резисторе при температуре *T*, разлагая хаотические движения микрочастиц в ряд Фурье. Коллективные перемещения свободных зарядов вдоль проводника длиной l рассматриваем как стоячие волны смещений газа от равномерного распределения. Заряды не выходят за пределы проводника и на его концах возникают узлы смещений. В результате продольное смещение газа имеет дискретный спектр в виде стоячих волн $n = 1, 2, 3, \ldots$, показанных на рис. 1. Колеблющийся градиент заряда создает переменный ток и флуктуирующую разность потенциалов на концах проводника. Для гармонической волны на длине *l* укладывается целое число полуволн $n = \dfrac{l}{\lambda/2}$, где λ – длина волны. С учетом кратности вырождения волн с двумя проекциями спина электронов и/или дырок, находим число волн с частотой ω

$$N_\omega = 2n = \frac{4l}{\lambda} = \frac{2l}{\pi V}\omega,$$

где $\lambda = 2\pi V/\omega$; V – скорость волны. При $l >> \lambda$ число волн в интервале частот $(\omega, \omega + d\omega)$ равно $dN_\omega = \dfrac{2l}{\pi V} d\omega$. Волна с частотой ω имеет при температуре T среднюю энергию $\bar{E}(\omega, T)$, тогда энергия волн

$$dE_\omega = \bar{E}(\omega, T)\, dN_\omega = \bar{E}(\omega, T)\frac{2l}{\pi V} d\omega.$$

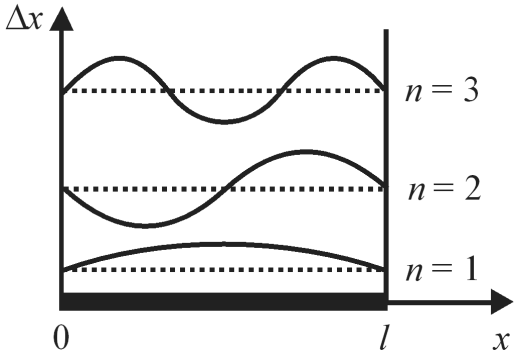


Рис. 1 – Смещения зарядов вдоль проводника

Fig. 1– Displacements of charges along the conductor

Время распространения волны по проводнику $\tau = l/V$. Тепловая мощность перемещения зарядов $dP_\omega = \dfrac{dE_\omega}{\tau} = \dfrac{2}{\pi}\bar{E}(\omega, T)\, d\omega$ связана с напряжением законом Джоуля–Ленца $dP_\omega = \dfrac{1}{R(\omega)}\overline{U_\omega^2}\, d\omega$, где $R(\omega)$ – активное сопротивление проводника. Для спектральной плотности среднего квадрата флуктуационного напряжения с $\overline{U_\omega} = 0$ находим $\overline{U_\omega^2} = \dfrac{2}{\pi} R(\omega)\bar{E}(\omega, T)$. Результат обобщаем на произвольную изотермическую систему, заменяя $U_\omega(t)$ на обобщенную силу $f_\omega(t)$. С учетом (11)

получаем ФДТ для спектральной плотности и среднего квадрата флуктуирующей силы

$$\overline{f_\omega^2} = \frac{2}{\pi} R(\omega)\,\overline{E}(\omega,T) = \frac{2}{\pi}\frac{\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)}{\omega\,|\,\tilde{g}_c(\omega)\,|^2}\,\overline{E}(\omega,T)\,,$$

$$(\delta f)^2 = \overline{f^2} = \int_0^\infty \overline{f_\omega^2}\,d\omega\,. \tag{14}$$

Сравнение (13) и (14) показывает, что мощность диссипации энергии, происходящей под действием обобщенной силы $F(t)$, и спектральная плотность среднего квадрата случайной обобщенной силы $f(t)$, вызванной тепловым движением, пропорциональны мнимой части передаточной функции системы.

Энергия квантового колебательного состояния с частотой ω складывается из тепловой энергии $\overline{E_1}(\omega,T) = \dfrac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1}$ и энергии нулевых колебаний $E_0(\omega) = \hbar\omega/2$:

$$\overline{E}(\omega,T) = \overline{E_1}(\omega,T) + E_0(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2}\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}\,, \tag{15}$$

причем $\overline{E}(-\omega,T) = \overline{E}(\omega,T)$. Из (14) и (15) находим

$$\overline{f_\omega^2} = \frac{\hbar}{\pi}\omega R(\omega)\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT} = \frac{\hbar}{\pi}\frac{\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)}{|\,\tilde{g}_c(\omega)\,|^2}\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}\,,\quad \overline{f_{-\omega}^2} = \overline{f_\omega^2}\,,$$

$$(\delta f)^2 = \frac{\hbar}{\pi}\int_0^\infty \omega R(\omega)\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}\,d\omega\,. \tag{16}$$

Вещественную монохроматическую силу $f_\omega(t) = (f_0\,e^{-i\omega t} + f_0^*\,e^{i\omega t})/2$ усредняем по времени: $\overline{f_\omega} = 0$, $\overline{f_\omega^2} \equiv \dfrac{1}{T}\displaystyle\int_0^T f_\omega^2(t)\,dt = \dfrac{1}{2}|\,f_0\,|^2$. Из (1) и (2) находим реакцию системы на приложенную силу

$$x_\omega(t) = \frac{1}{2}\left(f_0\int_{-\infty}^{\infty} g_c(t-\tau)\,e^{-i\omega\tau}d\tau + f_0^*\int_{-\infty}^{\infty} g_c(t-\tau)\,e^{i\omega\tau}d\tau\right) =$$

$$= \frac{1}{2}\left(f_0\,\tilde{g}_c(\omega)\,e^{-i\omega t} + f_0^*\,\tilde{g}_c^*(\omega)\,e^{i\omega t}\right),$$

$$\overline{x_\omega} = 0\,,\quad \overline{x_\omega^2} = |\,\tilde{g}_c(\omega)\,|^2\,\overline{f_\omega^2}\,. \tag{17}$$

Из (14) и (17) получаем дисперсию обобщенной координаты, вызванную тепловым движением,

$$\overline{x_\omega^2} = \frac{2}{\pi}\frac{\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)}{\omega}\,\overline{E}(\omega,T)\,,\quad \overline{x_{-\omega}^2} = \overline{x_\omega^2}\,,$$

$$\overline{x^2} = \int_0^\infty \overline{x_\omega^2}\,d\omega = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)}{\omega}\,\overline{E}(\omega,T)\,d\omega\,. \tag{18}$$

2. Автокорреляционная функция

Автокорреляция координаты характеризует взаимосвязь ее значений, разделенных промежутком времени τ:

$$K_x(\tau) \equiv \overline{x(t)\,x(t+\tau)}\,. \tag{19}$$

Усреднение ведется по времени t, или по фазовому ансамблю. Состояние равновесное, поэтому усреднение не зависит от начала отсчета t, выполняется

$$K_x(0) = \overline{x^2(t)}\,, \quad K_x(-\tau) = K_x(\tau)\,,$$

$$K_x(0) \geq |\,K_x(\tau > 0)\,|\,, \quad K_x(\tau \to \pm\infty) = 0\,. \tag{20}$$

Из (2) с учетом (20) и (18) получаем

$$K_x(0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{K}_x(\omega)\,d\omega = \overline{x^2} = \int_0^{\infty} \overline{x_\omega^2}\,d\omega\,.$$

Сравнение подынтегральных выражений дает спектральную плотность автокорреляции координаты

$$\tilde{K}_x(\omega) = \pi\,\overline{x_\omega^2} = \pi\,|\,\tilde{g}_c(\omega)\,|^2\,\overline{f_\omega^2} = 2\,\frac{\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)}{\omega}\,\overline{E}(\omega, T)\,,$$

$$\tilde{K}_x(-\omega) = \tilde{K}_x(\omega)\,, \quad [\tilde{K}_x(\omega)]^* = \tilde{K}_x(\omega)\,, \tag{21}$$

где использовано (17) и (18).

Для случайной силы, вызванной тепловым движением, автокорреляция $K_f(\tau) \equiv \overline{f(t)\,f(t+\tau)}$ удовлетворяет

$$K_f(\tau) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{K}_f(\omega)\,e^{-i\omega\tau}d\omega\,, \quad \tilde{K}_f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K_f(\tau)\,e^{i\omega\tau}d\tau\,,$$

$$K_f(0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{K}_f(\omega)\,d\omega = \overline{f^2} = \int_0^{\infty} \overline{f_\omega^2}\,d\omega\,.$$

Из (16) и (21) получаем спектральную плотность автокорреляции силы

$$\tilde{K}_f(\omega) = \pi\,\overline{f_\omega^2} = \frac{\tilde{K}_x(\omega)}{|\,\tilde{g}_c(\omega)\,|^2} = \hbar\,\frac{\operatorname{Im}\tilde{g}_c(\omega)}{|\,\tilde{g}_c(\omega)\,|^2}\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}\,, \tag{22}$$

где

$$\tilde{K}_f(-\omega) = \tilde{K}_f(\omega)\,, \quad [\tilde{K}_f(\omega)]^* = \tilde{K}_f(\omega)\,.$$

Интервал автокорреляции τ_c характеризует длительность согласованности процесса, причем $K_f(\tau \ll \tau_c) \approx K_f(0)$, $K_f(\tau \gg \tau_c) \approx 0$. Следуя [6], определяем

$$\tau_c \equiv \frac{\int_0^{\infty} |\,K_f(\tau)\,|^2\,d\tau}{[K_f(0)]^2} = \frac{\pi}{2}\,\frac{\int_0^{\infty} |\,\tilde{K}_f(\omega)\,|^2\,d\omega}{\left(\int_0^{\infty} \tilde{K}_f(\omega)\,d\omega\right)^2}\,, \tag{23}$$

где использовано

$$\int_0^\infty |K_f(\tau)|^2 d\tau = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty |\tilde{K}_f(\omega)|^2 d\omega, \quad K_f(0) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \tilde{K}_f(\omega) d\omega.$$

3. Тепловое излучение

Перемещения заряженных микрочастиц стенок полости с температурой T и характерным размером L создают равновесное тепловое излучение. Ограничимся дипольным излучением в дальней зоне с длинами волн $\lambda << L$. Заряд q массой m, колеблющийся вдоль оси x относительно второго заряда с обратным знаком, образует диполь. На заряд действуют вдоль оси x: внешняя сила $F(t)$; упругая возвращающая сила $F_1(t) = -m\omega_0^2 x(t)$, где $x(t)$ – смещение заряда от положения равновесия; сила торможения излучением $F_2(t) = q^2\xi \dfrac{d^3x(t)}{dt^3}$, где в СИ $\xi = \dfrac{1}{6\pi\varepsilon_0 C^3}$, в СГС $\xi = \dfrac{2}{3C^3}$, C – скорость света. Закон Ньютона

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -m\omega_0^2 x + q^2\xi\frac{d^3x}{dt^3} + F(t)$$

после фурье-преобразования получает вид

$$\left(-m\omega^2 + m\omega_0^2 - iq^2\xi\omega^3\right)\tilde{x}(\omega) = \tilde{F}(\omega).$$

Из (5) находим передаточную функцию

$$\tilde{g}_c(\omega) = \frac{\tilde{x}(\omega)}{\tilde{F}(\omega)} = \frac{1}{-m\omega^2 + m\omega_0^2 - iq^2\xi\omega^3} =$$

$$= \frac{-m\omega^2 + m\omega_0^2 + iq^2\xi\omega^3}{(m\omega^2 - m\omega_0^2)^2 + (q^2\xi)^2\omega^6}. \tag{24}$$

Из (16) и (24) получаем флуктуирующую силу, действующую на заряд q в вакууме,

$$\overline{f_\omega^2} = \frac{\hbar q^2\xi}{\pi}\omega^3 \operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT} = \frac{\hbar q^2\xi}{\pi}\left(\omega^3 + \frac{2\omega^3}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}\right),$$

$$\overline{f^2} = \frac{\hbar q^2\xi}{\pi}\int_0^\infty \omega^3 \operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT} d\omega. \tag{25}$$

Результат не зависит от упругой связи заряда ω_0, поэтому применим для электрона в металле и в оболочке атома. Действующая на заряд сила создается электрическим полем излучения E_x со средним значением $\overline{E_x} = 0$. Из $f = qE_x$ и (25) для дисперсии проекции напряженности получаем

$$\overline{E_x^2} = \frac{2\xi}{\pi}\int_0^\infty \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}\right)\omega^2 d\omega.$$

С учетом равноправия декартовых направлений находим суммарную напряженность $\overline{E^2} = 3\overline{E_x^2}$ и среднюю плотность энергии излучения

$$\overline{w} = \zeta\overline{E^2} = \int_0^\infty \left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}\right)\frac{\omega^2}{\pi^2 C^3}\,d\omega\,,$$

где в СИ $\zeta = \varepsilon_0$, в СГС $\zeta = \dfrac{1}{4\pi}$. Первое слагаемое содержит «ультрафиолетовую расходимость», вызванную нулевыми колебаниями. Они создаются любыми телами вне зависимости от их температуры, образуют стоячие волны, не вносят вклада в средний поток излучения, дают вклад в плотность энергии излучения, вызывают спонтанные переходы и естественную ширину спектральных линий атома, проявляются в эффекте Казимира, в лэмбовском сдвиге. Второе слагаемое является формулой Планка. Используя плотность состояний в единице объема полости $g(\omega) = \dfrac{\omega^2}{\pi^2 C^3}$ и энергию фотона $\hbar\omega$, в соответствии с $\overline{w} = \int_0^\infty \hbar\omega\,\overline{n(\omega)}\,g(\omega)\,d\omega$ получаем распределение Бозе–Эйнштейна для среднего числа тепловых фотонов в одном состоянии $\overline{n(\omega)} = \dfrac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$.

Из (22) и (25) находим спектральную плотность автокорреляции декартовой составляющей напряженности электрического поля

$$\tilde{K}_E(\omega) = \frac{1}{q^2}\tilde{K}_f(\omega) = \hbar\xi\left(\omega^3 + \frac{2\omega^3}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}\right).$$

Для тепловой части

$$\tilde{K}_E^T(\omega) = 2\hbar\xi\,\frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \tag{26}$$

получаем

$$\int_0^\infty \tilde{K}_E^T(\omega)\,d\omega = \frac{2}{15}\frac{\xi(\pi kT)^4}{\hbar^3}\,, \quad \int_0^\infty \left[\tilde{K}_E^T(\omega)\right]^2 d\omega \cong 25.92\,\frac{\xi^2(kT)^7}{\hbar^5}\,.$$

Использовано [10]

$$\int_0^\infty \frac{x^{m-1}\,dx}{e^{bx} - 1} = \frac{\Gamma(m)}{b^m}\,\zeta(m)\,,$$

$$\int_0^\infty \frac{x^{m-1}\,dx}{(e^{bx} - 1)^2} = \frac{\Gamma(m)}{b^m}\,[\zeta(m-1, 2) - \zeta(m, 2)]\,,$$

где

$$\zeta(6, 2) - \zeta(7, 2) = \sum_{n=1}^\infty \frac{n}{(n+1)^7} = \zeta(6) - \zeta(7) \cong 0.0090\,;$$

$\zeta(m,a) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+a)^m}$, $\zeta(m) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^m}$ – дзета-функция Римана. Из (23) находим время когерентности

$$\tau_c = \frac{5!\cdot 6.075}{\pi^6}\frac{\hbar}{\pi kT} \cong 0.758\frac{\hbar}{\pi kT} = \frac{1.84\cdot 10^{-12}}{T(\mathrm{K})} \text{ с.} \tag{27}$$

В работе [9] численным расчетом получено $\tau_c \cong 1.57\hbar / kT$.

Временная автокорреляция напряженности электрического поля

$$K_E(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{K}_E(\omega)e^{-i\omega t}d\omega = \frac{1}{\pi}\int_0^{\infty} \tilde{K}_E(\omega)e^{-i\omega t}d\omega,$$

вызванная тепловой спектральной плотностью (26)

$$K_E^T(t) \equiv \overline{E(t')E(t'+t)} = \frac{2\hbar\xi}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{\omega^3 e^{-i\omega t}d\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1}, \tag{28}$$

определяет комплексную меру интерференции полей, разделенных интервалом t. Используя [10], находим

$$\int_0^{\infty}\frac{\omega^3 e^{-i\omega t}d\omega}{e^{\pi\tau\omega}-1} = \frac{6}{(\pi\tau)^4}\zeta\left(4, 1+i\frac{t}{\pi\tau}\right),$$

где

$$\tau \equiv \frac{\hbar}{\pi kT}; \quad \zeta(4,c) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(n+c)^4}; \quad \zeta(4,1) = \frac{\pi^4}{90}.$$

Для относительной автокорреляции

$$\gamma_E^T(t) \equiv \frac{K_E^T(t)}{K_E^T(0)} = \frac{\zeta[4, 1+it/(\pi\tau)]}{\zeta(4,1)} = \frac{90}{\pi^4}\zeta\left(4, 1+i\frac{t}{\pi\tau}\right) \tag{29}$$

из (28) и (29) получаем

$$\mathrm{Re}\,\gamma_E^T(t) = 15\int_0^{\infty}\frac{x^3\cos(zx)}{e^{\pi x}-1}dx, \quad \mathrm{Im}\,\gamma_E^T(t) = -15\int_0^{\infty}\frac{x^3\sin(zx)}{e^{\pi x}-1}dx,$$

где $z = t/\tau$; $x = \tau\omega$. Составляющие связаны преобразованием Гильберта

$$\mathrm{Im}\,\gamma_E^T(t) = \frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Re}\,\gamma_E^T(t)}{t'-t}dt' = \mathrm{Re}\,\gamma_E^T(t) * \frac{1}{\pi t},$$

$$\mathrm{Im}\,\tilde{\gamma}_E^T(\omega) = i\,\mathrm{sgn}\,\omega\,\mathrm{Re}\,\tilde{\gamma}_E^T(\omega).$$

Из [10] находим

$$\int_0^{\infty}\frac{x^3\cos(zx)}{e^{\pi x}-1}dx = -\frac{1}{2}\frac{d^3L(z)}{dz^3} = -\frac{3}{z^4} + \frac{2}{\mathrm{sh}^2 z} + \frac{3}{\mathrm{sh}^4 z},$$

где функция Ланжевена $L(z) = 2\int\limits_0^\infty \frac{\sin(zx)}{e^{\pi x}-1}dx = \operatorname{cth} z - \frac{1}{z}$, и получаем

$$\operatorname{Re}\gamma_E^T(z) = 15\left(-\frac{3}{z^4} + \frac{2}{\operatorname{sh}^2 z} + \frac{3}{\operatorname{sh}^4 z}\right). \tag{30}$$

Видность интерференционных полос

$$\left|\gamma_E^T(z)\right| = \left\{\left[\operatorname{Im}\gamma_E^T(z)\right]^2 + \left[\operatorname{Re}\gamma_E^T(z)\right]^2\right\}^{1/2}$$

уменьшается в e раз $\left|\gamma_E^T(z_4 \approx 2.5)\right| = 1/e$ за время $t_4 \approx 0.796\hbar/(kT)$, что близко к (27). Функции $\operatorname{Re}\gamma_E^T(z)$, $\operatorname{Im}\gamma_E^T(z)$, $\left|\gamma_E^T(z)\right|$, $\varphi_E^T(z) \equiv \operatorname{arctg}\left[\operatorname{Im}\gamma_E^T(z)\big/\operatorname{Re}\gamma_E^T(z)\right]$, показаны на рис. 2. При $z > z_5$ колебания происходят в противофазе, корреляция отрицательная. Плотность энергии излучения пропорциональна (26) и по закону Вина максимальна при $\omega_m = 0.898\frac{\pi kT}{\hbar} = \frac{3.18}{t_5}$. Величина t_5 порядка полупериода излучения $T_m/2 \approx t_5$ с наибольшей плотностью энергии. Колебания, разделенные интервалом $0 \le t < t_5$, происходят с близкими фазами, их корреляция положительная, амплитуда увеличивается в результате интерференции, фотоны группируются.

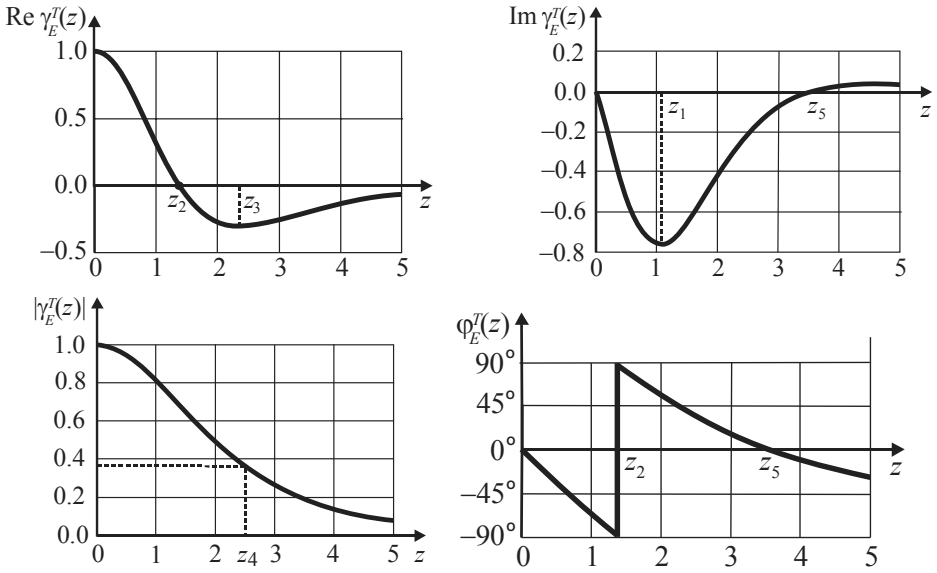


Рис. 2 – Автокорреляция электрического поля E_x теплового излучения:

$z = \pi kTt/\hbar$, $z_1 \cong 1.043$, $z_2 \cong 1.372$, $z_3 \cong 2.361$, $z_4 \approx 2.5$, $z_5 \cong 3.547$

Fig. 2 – Autocorrelation of the E_x electric field of thermal radiation:

$z = \pi kTt/\hbar$, $z_1 \cong 1.043$, $z_2 \cong 1.372$, $z_3 \cong 2.361$, $z_4 \approx 2.5$, $z_5 \cong 3.547$

Заключение

Приведен вывод ФДТ, который может использоваться в вузовских курсах статистической физики. Для зарядов, создающих дипольное излучение, получена передаточная функция, тепловая флуктуирующая сила, действующая на заряд, напряженность электрического поля теплового излучения и временная автокорреляционная функция.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Callen H.B., Welton T.A.** Irreversibility and generalized noise // Physical Review. – 1951. – Vol. 83, N 1. – P. 34–40.
2. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Статистическая физика. Ч. 1. – Изд. 5-е, стер. – М.: Физматлит, 2010. – 616 с. – (Теоретическая физика; т. 5).
3. **Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.** Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния. – М.: Физматлит, 2015. – 440 с. – (Теоретическая физика; т. 9).
4. **Левин М.Л., Рытов С.М.** Теория равновесных тепловых флуктуаций в электродинамике. – М.: Наука, 1967. – 309 с.
5. **Рытов С.М.** Введение в статистическую радиофизику. Ч. 1. Случайные процессы. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Наука, 1976. – 494 с.
6. **Мандель Л., Вольф Э.** Оптическая когерентность и квантовая оптика. – М.: Наука: Физматлит, 2000. – 896 с.
7. **Bourret R.C.** Coherence properties of black body radiation // Nuovo Cimento. – 1960. – Vol. 18, N 2. – P. 347–356.
8. **Kano Y., Wolf E.** Temporal coherence of black body radiation // Proceedings of the Physical Society. – 1962. – Vol. 80, N 518. – pp. 1273–1276.
9. **Donge A.** The coherence length of black body radiation // European Journal of Physics. – 1998. – Vol. 19. – P. 245–249.
10. **Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И.** Интегралы и ряды. Т. 1. Элементарные функции. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2003. – 632 с.

THE FLUCTUATION- DISSIPATION THEOREM AND THE AUTOCORRELATION FUNCTION OF THERMAL RADIATION

Krasnopevtsev E.A.
Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

A new relatively simple derivation of the fluctuation-dissipation theorem (FDT) is presented. The generalized coordinate of the system is changed by an external force and is expressed by means of causal susceptibility, its Fourier transform – the transfer function, generalized impedance and active resistance. These characteristics describe heat dissipation on the resistor and the result is generalized to the dissipative system which is under the action of macroscopic force. The fluctuation voltage on the resistor is obtained by decomposing the thermal chaotic motion of free charges along the conductor into a Fourier series. The number of standing waves and the average energy of the quantum oscillation state at a fixed temperature give the thermal power of charge transfer. By comparing with the Joule-Lenz law and by generalizing the result to an arbitrary isothermal system, the mean square of the fluctuating force and dispersion of the generalized coordinate caused by the thermal motion are obtained. The autocorrelation functions of the generalized coordinate and the random force, and their spectral densities are expressed through the considered characteristics. The content of FDT is that the power of heat release, the spectral densities of the fluctuating force and the autocorrelation are proportional to the imaginary part of the transfer function of the system. The result is used for thermal radiation in a cavity the walls of which contain electric dipoles excited by thermal motion. The transfer function, the fluctuating force acting on the charge, the dispersion of the electric field strength, time autocorrelation of the electric field strength and its spectral density are obtained. Real and imaginary compo-

nents, the modulus and phase are found for complex relative autocorrelation of the electric field strength and the coherence time is determined.

Keywords: fluctuation-dissipation theorem, autocorrelation function, thermal radiation.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-7-18

REFERENCES

1. Callen H.B., Welton T.A. Irreversibility and generalized noise. *Physical Review*, 1951, vol. 83, no. 1, pp. 34–40.
2. Landau L.D., Lifshits E.M. *Statisticheskaya fizika*. Ch. 1 [Statistical physics. Pt. 1]. 5th ed. Moscow, Fizmatlit Publ., 2010. 616 p.
3. Lifshits E.M., Pitaevskii L.P. *Statisticheskaya fizika*. Ch. 2. *Teoriya kondensirovannogo sostoyaniya* [Statistical зhysics. Pt. 2. Theory of condensed state]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2015. 440 p.
4. Levin M.L., Rytov S.M. *Teoriya ravnovesnykh teplovykh fluktuatsii v elektrodinamike* [Theory of equilibrium thermal fluctuations in electrodynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1967. 309 p.
5. Rytov S.M. *Vvedenie v statisticheskuyu radiofiziku*. Ch. 1. *Sluchainye protsessy* [Introduction to Statistical Radiophysics. Pt. 1. Random processes]. 2nd ed. Moscow, Nauka Publ., 1976. 494 p.
6. Mandel L., Wolf E. *Optical coherence and quantum optics*. Cambridge University Press, 1995. 1190 p. (Russ. ed.: Mandel' L., Vol'f E. *Opticheskaya kogerentnost' i kvantovaya optika*. Moscow, Nauka Publ., Fizmatlit Publ., 2000. 896 p.).
7. Bourret R.C. Coherence properties of black body radiation. *Nuovo Cimento*, 1960, vol. 18, no. 2, pp. 347–356.
8. Kano Y., Wolf E. Temporal coherence of black body radiation. *Proceedings of the Physical Society*, 1962, vol. 80, no. 518, pp. 1273–1276.
9. Donge A. The coherence length of black body radiation. *European Journal of Physics*, 1998, vol. 19, pp. 245–249.
10. Prudnikov A.P., Brychkov Yu.A., Marichev O.I. *Integraly i ryady*. T. 1. *Elementarnye funktsii* [Integrals and series. Vol. 1. Elementary functions]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2003. 632 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Краснопевцев Евгений Александрович – д-р техн. наук, доцент, профессор кафедры полупроводниковых приборов и микроэлектроники Новосибирского государственного технического университета. Основное научное направление исследований – квантовая статистическая физика. Имеет более 80 публикаций, в том числе 10 учебных пособий. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: krasnopevcev@corp.nstu.ru).

Krasnopevtsev Evgeniy Aleksandrovich – Doctor of Sciences (Eng.), Senior lecturer, Professor of the Department of Semiconductor Devices and Microelectronics at the Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on quantum statistical physics. He is author of more than 80 publications, including 10 teaching textbooks. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: krasnopevcev@corp.nstu.ru).

Статья поступила 12 января 2021 г.
Received January 12, 2021

To reference:

Krasnopevtsev E.A. Fluktuatsionno-dissipatsionnaya teorema i avtokorrelyatsionnaya funktsiya teplovogo izlucheniya [The fluctuation-dissipation theorem and the autocorrelation function of thermal radiation]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2021, no. 1 (50), pp. 7–18. DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-7-18.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ
2021 январь–март № 1 (50)

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 533.5, 533.15

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ РАЗРЕЖЕННЫХ ГАЗОВ СТОХАСТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ*

В.Я. Рудяк[1,2], Е.В. Лежнев[2], Д.Н. Любимов[2]
[1] *Новосибирский государственный университет*
[2] *Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет*

Прямое молекулярное моделирование физических систем, явлений и процессов уже более полувека является одним из главных трендов развития различных разделов физики. Постоянно растущая доступная вычислительная мощность современных компьютеров позволяет решать все более сложные задачи. Прямое молекулярное моделирование фактически является одним из немногих методов описания соответствующих процессов или явлений из первых принципов. С другой стороны, оно способствует существенной экономии времени и материальных ресурсов по сравнению с проведением экспериментальных исследований. Наконец, таким образом появляется возможность исследовать процессы и явления, в которых прямые измерения в силу тех или иных причин невозможны.

Наиболее распространенным методом прямого молекулярного моделирования является метод молекулярной динамики. Этот метод, однако, все еще недоступен для моделирования процессов переноса разреженных газов, поскольку требует использования огромного числа молекул. В нормальных условиях при расчетах в ячейке моделирования должны находиться десятки или даже сотни миллионов молекул. Вместе с тем известно, что численная реализация метода молекулярной динамики не позволяет получить истинные фазовые траектории рассматриваемой системы. В моделируемой системе имеет место динамический хаос. Данная работа посвящена развитию метода стохастического молекулярного моделирования (СММ) процессов переноса в разреженных газах. В этом методе фазовые траектории молекулярной системы имитируются стохастически. Все наблюдаемые, включая коэффициенты переноса, получаются усреднением по большому числу таких независимых фазовых траекторий. Ранее работоспособность метода СММ была продемонстрирована расчетом коэффициентов самодиффузии, диффузии и вязкости различных разреженных газов. Вместе с тем до сих пор не рассматривалась возможность моделирования методом СММ самого сложного процесса переноса – процесса переноса энергии. Целью данной работы и является моделирование методом СММ коэффициента теплопроводности. Рассматривались как одноатомные (Ar, Kr, Ne, Xe), так и многоатомные газы (CH_4, O_2). Показано, что метод СММ дает вполне приемлемые результаты, сопоставимые с данными измерений, даже при использовании сравнительно небольшого числа молекул. Изучена точность моделирования. Установлено, что она монотонно растет с увеличением числа молекул и фазовых траекторий, по которым проводится усреднение.

Ключевые слова: молекулярное моделирование, процессы переноса, разреженный газ, теплопроводность.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-19-29

Введение

Одним из главных успехов кинетической теории газов является явное вычисление коэффициентов переноса разреженных газов [1, 2]. Решение кинетического уравнения Больцмана методом Чепмена–Энскога позволило позднее Барнетту [3] развить последовательный метод расчета коэффициентов переноса. Метод этот,

* Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 19-01-00399 и № 20-01-00041).

однако, не прост. Он требует решения ряда интегральных уравнений. Эти уравнения решаются обычно методом разложения по полиномам Сонина. Для определения различных коэффициентов переноса, вообще говоря, необходимо использовать разное число членов такого разложения. Наибольшие проблемы возникают при расчете коэффициента теплопроводности, особенно для многоатомных газов. Помимо этого, при использовании различных потенциалов необходимо систематически вычислять так называемые Ω-интегралы, что само по себе является достаточно сложной задачей. По этой причине актуально и прямое численное молекулярное моделирование процессов переноса разреженных газов, в частности расчет их коэффициентов переноса.

Хорошо известным методом такого моделирования является метод молекулярной динамики (см., например, [4, 5]). Этот метод уже более шестидесяти лет с успехом используется для моделирования самых разных процессов и явлений в физике, механике, химии и биологии. К сожалению, до сих пор этот метод недоступен для моделирования процессов переноса разреженных газов. Действительно, характерный размер ячейки моделирования в этом случае должен быть много больше (или хотя бы больше!) длины свободного пробега молекул моделируемого газа. Нетрудно оценить, что в нормальных условиях в такой ячейке должны находиться десятки или даже сотни миллионов молекул.

Вместе с тем ясно, что численная реализация метода молекулярной динамики сопровождается систематическим появлением ошибок (из-за неточности задания начальных данных для динамических переменных молекул моделируемой системы, ошибок округления, конечно-разностной аппроксимации уравнений Ньютона и т. п.). Это приводит к развитию локальной неустойчивости фазовых траекторий в молекулярных системах, что является причиной появления динамического хаоса [5, 6]. Очевидно поэтому, что при таком моделировании не вычисляются истинные фазовые траектории рассматриваемой системы, определяемые системой уравнений Ньютона. Актуальные результаты моделирования получаются лишь усреднением по большому числу независимых фазовых траекторий. Поэтому, естественным образом, возникает идея разработки метода моделирования процессов переноса, в котором фазовые траектории не вычисляются на основе законов Ньютона, а имитируются, и далее используются для расчета любых наблюдаемых. В работах [7, 8] развит метод стохастического молекулярного моделирования (СММ) процессов переноса разреженного газа, где эта идея и была реализована. Работоспособность метода СММ была продемонстрирована расчетом коэффициентов самодиффузии, диффузии и вязкости как одноатомных газов, так и многоатомных газов [9]. Вместе с тем до сих пор не рассматривалась возможность моделирования методом СММ самого сложного процесса переноса – процесса переноса энергии. Целью данной работы и является моделирование методом СММ коэффициента теплопроводности. Рассматривались как одноатомные (Ar, Kr, Ne, Xe), так и многоатомные газы (CH_4, O_2).

1. СММ метод

Основная идея прямого численного моделирования процессов переноса, в частности методов молекулярной динамики и СММ, состоит в расчете фазовых траекторий рассматриваемых систем в последовательные моменты времени. Затем, используя эту информацию, методами неравновесной статистической механики [5, 8] можно вычислить все наблюдаемые. В частности, коэффициенты переноса вычисляются с помощью флуктуационно-диссипационных теорем (ФДТ), которые представляют их как интегралы по времени от соответствующих двухвременных корреляционных функций [5, 10–12]. В разреженном газе взаимодействие молекул не дает вклада в коэффициенты переноса и в уравнение состояния.

Такие вклады появляются лишь в следующем приближении по плотности [13, 14]. Коэффициенты переноса разреженного газа определяются лишь эволюцией молекул в пространстве скоростей (импульсов.) В частности, коэффициент теплопроводности разреженного газа определяется следующей ФДТ:

$$\lambda = \frac{k}{3VT^2}\int_0^{\tau_p}\langle \mathbf{j}(0)\cdot\mathbf{j}(t)\rangle\, dt = \frac{k}{3VT^2}\int_0^{\tau_p}\chi(0,t)\, dt,$$
$$j(t) = 0.5\sum_i m_i \mathbf{v}_i\, \mathrm{v}_i^2(t). \qquad (1)$$

Здесь V – объем; k – постоянная Больцмана; $\mathbf{v}_{ij}$ – вектор относительной скорости молекул i и j соответственно.

Эквивалентность ФДТ, и в частности (1), традиционно используемым в кинетической теории газов для вычисления коэффициентов переноса формулам доказана в работах [15, 16] (см. также [5]). Входящая в (1) двухвременная корреляционная функция $\chi = \langle \mathbf{j}(0)\cdot\mathbf{j}(t)\rangle$ вычисляется по равновесной функции распределения и зависит только от скоростей молекул. Поэтому для ее расчета (а значит, и соответствующих коэффициентов переноса) необходимо имитировать динамику системы молекул лишь в пространстве скоростей. Используемый для этого алгоритм метода СММ подробно описан в работах [7, 8], ниже кратко приводятся его основные моменты.

Рассматривается равновесное состояние газа с заданной плотностью ρ и температурой T. В начальный момент времени N молекулы равномерно распределяются по объему моделирования так, чтобы средняя плотность газа равнялась ρ. Затем каждой молекуле присваивается скорость $\mathbf{v}_i$, для этого скорости разыгрываются согласно распределению Максвелла при заданной температуре T. Суммарный импульс всех N молекул делается равным нулю. Таким образом, в начальный момент времени t молекулы имеют скорости $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, ..., \mathbf{v}_N$. После того как сформировано начальное состояние системы, определяется интервал времени t_s, в течение которого система будет моделироваться. В разреженном газе все корреляционные функции затухают экспоненциально с характерным временем порядка времени свободного пробега τ_λ. Это означает, что для времени расчета должно выполняться соотношение $t_s \gg \tau_\lambda$. Затем время расчета делится на интервалы длительностью $\tau_n = \sigma / v_{n,\max}$ где σ – эффективный диаметр молекул, а $v_{n,\max}$ – максимальная из скоростей молекул в данный момент времени (на интервале n). Далее по начальным значениям скоростей всех молекул в момент времени t необходимо найти их значения в момент времени $(t+\tau_1)$. Скорости молекул могут измениться только в результате соударений. Поэтому на основе кинетической теории вычисляется вероятность соударения за время τ_1 каждой из молекул системы с любой другой: $P_{c1} = 4\tau_1\rho\sigma^2\sqrt{\pi RT/m}$ [1]. Если молекула сталкивается с какой-либо другой молекулой, тогда случайным образом из оставшихся $(N-1)$ молекул определяется пара для соударения с данной, для которой такое соударение должно произойти. В результате скорости этих двух столкнувшихся молекул изменятся в соответствии с законами сохранения импульса и энергии

$$\mathbf{v}_1' = \mathbf{v}_1 + (\mathbf{v}_{1j}\cdot\mathbf{e})\mathbf{e}, \quad \mathbf{v}_j' = \mathbf{v}_j + (\mathbf{v}_{j1}\cdot\mathbf{e})\mathbf{e}.$$

Молекулы, которые не сталкивались за время τ_1, своих скоростей не меняют. После выполнения описанной процедуры формируется полный список новых фазовых переменных системы (скоростей) в момент времени $(t+\tau_1)$, и подобная процедура реализуется для следующего момента времени $(t+\tau_2)$. Этот процесс повторяется до тех пор, пока не закончится заданное время расчета t_s. Таким образом, получаем набор динамических переменных всех молекул моделируемой системы в последовательные моменты времени.

Используя полученный набор динамических переменных моделируемой системы, далее можно вычислить любые ее наблюдаемые. Их значения получаются усреднением по l независимым фазовым траекториям системы. Получаемые в процессе имитации динамики соударений скорости молекул в общем случае зависят от потенциалов межмолекулярного взаимодействия. В данной работе использовался потенциал Леннарда–Джонса [6–12].

2. Расчет коэффициента теплопроводности

Вычисление коэффициента теплопроводности разреженных газов до сих пор остается достаточно сложной проблемой кинетической теории. Если для вычисления коэффициентов диффузии и вязкости обычно достаточно первого приближения разложения по полиномам Сонина, то для теплопроводности это не так. Ниже в этом разделе представлены данные моделирования коэффициента теплопроводности нескольких разреженных газов методом СММ. Расчет проводится с помощью ФДТ (1). Усреднение проводилось по тысяче независимых фазовых траекторий.

Поскольку газ разреженный, то корреляционная функция χ, по которой вычисляется коэффициент (1), должна затухать экспоненциально, что и показывают данные расчета, приведенные на рис. 1, *а*. Здесь представлен расчет нормированной на начальные значения корреляционной функции $\chi_j(t)$ для ксенона при температуре 300 К и атмосферном давлении, время нормировано на среднее время свободного пробега молекулы. Затухание корреляционной функции происходит за несколько времен свободного пробега.

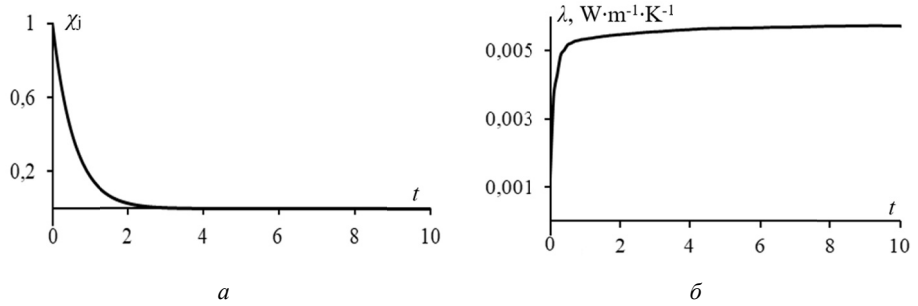


Рис. 1 – Эволюция нормированной корреляционной функции тепловых потоков ксенона (*а*) и соответствующего коэффициента теплопроводности (*б*)

Fig. 1 – Evolution of the normalized correlation function of the heat fluxes of xenon (*a*) and the corresponding coefficient of thermal conductivity (*b*)

Экспоненциальное затухание корреляционной функции означает достаточно быстрый выход на платовое значение соответствующего коэффициента переноса – коэффициента теплопроводности. Рис. 1, *б* и иллюстрирует это, выход на плато-

вое значение происходит за 8–10 времен свободного пробега молекул. Это платовое значение собственно и определяет экспериментально измеримое значение коэффициента теплопроводности.

Систематические данные расчета коэффициентов теплопроводности для всех указанных выше газов приведены в табл. 1. Все данные получены при атмосферном давлении и температуре 300 К. Использовалось 3000 молекул, усреднение проводилось по 1000 независимым фазовым траекториям. Полученные методом СММ значения коэффициента теплопроводности оказываются вполне сопоставимыми с экспериментальными λ_e, здесь и ниже использовались экспериментальные данные [17]. Для аргона, криптона и ксенона расчетные данные получены в пределах точности измерения, которая обычно и составляет 2–3 %. Для трех оставшихся газов точность несколько хуже.

Таблица 1 / Table 1

Сравнение коэффициентов теплопроводности λ и λ_e при 300 К и атмосферном давлении

	Ar	Kr	Ne	Xe	O_2	CH_4
λ, W/m · K	0.0175	0.0098	0.051	0.0055	0.028	0.0328
λ_e, W/m · K	0.0177	0.0096	0.049	0.0057	0.0267	0.0342
погр., Δ %	1.23	2.52	3.36	3.17	4.48	3.92

Сопоставление данных расчетов методом СММ с экспериментальными, приведенное в табл. 1, показало, что в ряде случаев точность моделирования оказывается несколько ниже обычно имеющей место в экспериментах. Причем это имеет место не только для многоатомных, но и для одноатомных газов. Поэтому важнейший вопрос, требующий ответа при применении метода СММ: можно ли повысить его точность? Вообще говоря, точность любого молекулярного моделирования, включая и метод СММ, зависит от нескольких факторов. Прежде всего, она зависит от выбора использующегося потенциала взаимодействия молекул (частиц). Строго говоря, здесь нельзя сформулировать универсальных рецептов их выбора. Все, прежде всего, зависит от решаемой задачи. При расчете интегральных характеристик флюидов ситуация несколько упрощается. Здесь можно выбирать достаточно простые потенциалы. Успешность расчета коэффициента вязкости воды [18], когда с помощью потенциала Леннарда–Джонса удалось получить высокую точность, это подтверждает. Правда, успех здесь в значительной мере определяется выбором параметров потенциала. К этому надо относиться очень внимательно. Определяя, например, параметры потенциала по данным о диффузии, трудно ожидать получения высокой точности моделирования вязкости. Тем не менее можно констатировать, что метод СММ достаточно консервативен относительно такого выбора. Высокую точность удается получить, даже используя известные параметры потенциала Леннарда–Джонса, которые получались по самым разным экспериментальным данным.

На точность расчета оказывает влияние и число используемых молекул, и число независимых траекторий, по которым проводится затем усреднение. В данной работе систематически изучено влияние обоих факторов на точность расчета коэффициента теплопроводности. В качестве примера на рис. 2 приведена зависимость рассчитанных значений коэффициента теплопроводности ксенона от числа молекул. В расчетах использовалось 750, 1500, 3000 и 6000 молекул, расчетным данным на рис. 2 соответствуют ромбы. Погрешность расчета с увеличением

числа молекул систематически снижается и хорошо (коэффициент корреляции равен 0.97) описывается зависимостью $\Delta = 175.17/\sqrt{N}$, которой на рис. 2 соответствует непрерывная кривая.

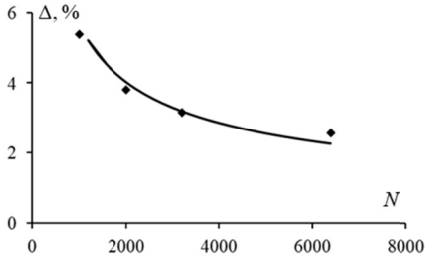


Рис. 2 – Зависимость относительной погрешности Δ расчета коэффициента теплопроводности ксенона от числа молекул

Fig. 2 – Dependence of the relative error Δ for calculating the thermal conductivity of xenon on the number of molecules

Высокую точность вычисления коэффициента теплопроводности удается получить и для многоатомных молекул. Это иллюстрируют данные табл. 2. При использовании в расчетах 6400 молекул погрешность определения коэффициента теплопроводности оказывается меньше одного процента (усреднение проводилось по 1000 фазовым траекториям).

Таблица 2 / Table 2

Точность расчета коэффициента теплопроводности кислорода и метана при числе молекул $N = 6440$

	O_2	CH_4
λ, W/m · K	0.0269	0.0034
Δ, %	0.93	0.67

Вторым важным обстоятельством, определяющим время расчета, является число членов ансамбля (число независимых фазовых траекторий), по которому производится усреднение полученных данных. Ансамбль, по которому проводится усреднение, – это типичный гиббсовский ансамбль, характеризуемый разными начальными фазовыми состояниями молекул при заданных средних значениях макроскопических наблюдаемых. Точность моделирования коэффициента теплопроводности с ростом числа членов ансамбля также растет. На рис. 3 приведена зависимость относительной погрешности, полученной при расчете коэффициента теплопроводности ксенона. Здесь во всех случаях число использованных молекул равнялось 3000, а число траекторий изменялось от 250 до 1000 (ромбы). С увеличение числа фазовых траекторий относительные ошибки монотонно уменьшаются и хорошо описываются зависимостью $\Delta_l = 91.29/\sqrt{L}$ (коэффициент корреляции равен 0.98). Чтобы получить точность порядка процента при вычислении коэффициента теплопроводности при использовании 3000 молекул, необходимо использовать около 8000 траекторий.

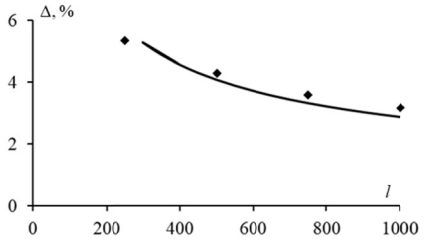


Рис. 3 – Зависимость относительной погрешности коэффициента теплопроводности от числа траекторий

Fig. 3 – Dependence of the relative error of the thermal conductivity coefficient on the number of trajectories

Заключение

В данной работе методом СММ выполнено моделирование теплопроводности благородных газов, а также кислорода и метана при 300 К и атмосферном давлении. Показано, что этот метод позволяет вполне удовлетворительно моделировать теплопроводность даже при использовании сравнительно небольшого числа молекул (около 3000). Метод СММ достаточно прост и вполне воспроизводим практически любым пользователем.

Систематически изучена точность моделирования и ее зависимость от числа используемых для усреднения траекторий и числа молекул. Показано, что относительная ошибка моделирования $\Delta \sim 1/\sqrt{lN}$. Это соответствует и оценкам, полученным при моделировании других коэффициентов переноса (см. [7–9]). То, что ошибка обратно пропорциональна корню из произведения числа траекторий и числа молекул, дает определенную свободу в выборе и того, и другого для достижения заданной точности. В общем случае время моделирования линейно растет с увеличением числа молекул. Его можно уменьшать, «разменивая» на число фазовых траекторий.

Следующим важным фактором, определяющим точность и эффективность алгоритма, является выбор длительности шага τ_i. В приведенных примерах оно выбиралось достаточно малым. Для разреженного газа это условие можно существенно ослабить. Важно, однако, чтобы выполнялось условие $\tau_i \ll \tau_\lambda$.

Наконец, важной характеристикой является время расчета одной фазовой траектории t_s. В представленных данных это время варьировалось и обычно составляло десятки времен среднего свободного пробега. При выборе интервала моделирования важно, чтобы он был не меньше времени выхода на платовые значения данной моделируемой характеристики: $t_s > t_p$. Однако важно понимать что системы с различным числом частиц могут иметь (и имеют!) различные платовые значения. Платовые значения различны и для разных коэффициентов переноса.

Для моделирования коэффициентов переноса в общем случае достаточно рассмотреть пространственно-однородную систему. Однако, строго говоря, определение скоростей молекул после соударения требует знания вектора $\mathbf{e}_{ij} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)/|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$, определяющего угол рассеяния молекул i и j, здесь $\mathbf{r}_i$, $\mathbf{r}_j$ – радиус-векторы этих молекул соответственно. Существует два разных пути определения этих векторов на каждом шаге по времени. В первом случае в каждый момент времени должны определяться все координаты молекул $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N)$. Тогда на данном временном интервале τ_n координаты молекулы i меняются в соответствие с законом: $\boldsymbol{r}_i(t_{n-1} + \tau_n) = \boldsymbol{r}_i(t_{n-1}) + \boldsymbol{v}_1(t_{n-1})\tau_n$. В этом случае результатом вычисления будет полный ряд и скоростей, и координат молекул в каждый момент времени. Во втором случае для определения векторов $\mathbf{e}_{ij}$ можно использовать начальные пространственные фазы молекул. Ясно, что второй путь значительно экономичнее. Обе описанные процедуры использовались в наших расчетах и показано, что точность моделирования коэффициентов переноса в обоих случаях практически одинакова.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Chapman S., Cowling T.G.** The mathematical theory of non-uniform gases. – Cambridge: Cambridge University Press, 1990. – 423 p.

2. **Гиршфельдер Дж., Кертис Ч., Берд Р.** Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: Иностранная литература, 1961. – 928 с.
3. **Burnett D.** The distribution of velocities in a slightly non-uniform gas // Proceedings of the London Mathematical Society. – 1935. – Vol. 39 (1). – P. 385–430.
4. **Rapaport D.C.** The art of molecular dynamics simulation. – Cambridge: Cambridge University Press, 1995. – 548 p.
5. **Рудяк В.Я.** Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 2. Гидромеханика. – Новосибирск: НГАСУ, 2005. – 320 с.
6. **Норман Г.Э., Стегайлов В.В.** Стохастическая теория метода классической молекулярной динамики // Математическое моделирование. – 2012. – Т. 24, № 6. – С. 3–44.
7. **Рудяк В.Я., Лежнев Е.В.** Стохастический метод моделирования коэффициентов переноса разреженного газа // Математическое моделирование. – 2017. – Т. 29, № 3. – С. 113–122.
8. **Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V.** Stochastic algorithm for simulating gas transport coefficients // Journal of Computational Physics. – 2018. – Vol. 355. – P. 95–103. – DOI: 10.1016/j.jcp.2017.11.001.
9. **Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V.** Stochastic molecular modeling the transport coefficients of rarefied gas and gas nanosuspensions // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. – 2020. – Vol. 46. – P. 51–54. – DOI: 10.17586/2220-8054-2020-11-3-285-293.
10. **Зубарев Д.Н.** Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 415 с.
11. **Allen M.P., Tildesley D.J.** Computer simulation of liquids. – Oxford: Oxford University Press, 1987. – 385 p.
12. **Rudyak V.Ya**. Fluctuation-dissipation theorems and transport coefficients of the gases, liquids and nanofluids // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – Vol. 1560. – P. 012002. – DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012002.
13. **Климонтович Ю.Л.** Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы. – М.: Наука, 1975. – 352 с.
14. **Рудяк В.Я.** Статистическая теория диссипативных процессов в газах и жидкостях. – Новосибирск: Наука, 1987. – 271 с.
15. **Ernst M.H.** Formal theory of transport coefficients to general order in the density // Physica. – 1966. – Vol. 32, N 2. – P. 209–243. – DOI: 10.1016/0031-8914(66)90055-3.
16. **Хонькин А.Д.** Уравнения для пространственно-временных и временных корреляционных функций и доказательство эквивалентности результатов методов Чепмена–Энскога и временных корреляционных функций // Теоретическая и математическая физика. – 1970. – Т. 5, № 1. – С. 125–135.
17. **Григорьев И.С., Мейлихова Е.З.** Физические величины. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1234 с.
18. Molecular dynamics simulation of water based nanofluids viscosity / V.Ya. Rudyak, S.L. Krasnolutskii, A.A. Belkin, E.V. Lezhnev // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2020. – DOI: 10.1007/s10973-020-09873-8.

SIMULATION OF THERMAL CONDUCTIVITY OF RARE GASES BY THE STOCHASTIC METHOD

Rudyak V.Ya.[1], Lezhnev E.V.[2], Ljubimov D.N.[2]
[1]*Novosibisrak State Technical University, Novosibirsk, Russia*
[2] *Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering, Novosibirsk, Russia*

One of the main successes of the kinetic theory of gases is the explicit calculation of the transport coefficients of rarefied gases. However, the greatest problems arise when calculating the thermal conductivity coefficient, especially for polyatomic gases. Also, when using different potentials, it is necessary to systematically calculate the so-called Ω-integrals, which in itself is

a rather difficult task. For this reason, direct numerical molecular modeling of the processes of transfer of rarefied gases, in particular, the calculation of their transfer coefficients, is also relevant.

A well-known method for such modeling is the molecular dynamics method. Unfortunately, until now this method is not available for modeling the processes of rarefied gas transfer. Under normal conditions, the simulation cell should contain tens or even hundreds of millions of molecules during calculations.

At the same time, the numerical implementation of the molecular dynamics method is accompanied by a systematic appearance of errors, which is the reason for the appearance of dynamic chaos. With this simulation, the true phase trajectories of the system under consideration cannot be obtained. Therefore, naturally, the idea of developing a method for modeling transport processes arises, in which phase trajectories are not calculated based on Newton's laws, but are simulated, and then are used to calculate any observables. In our works, we developed a method of stochastic molecular modeling (STM) of rarefied gas transfer processes, where this idea was implemented. The efficiency of the SMM method was demonstrated by calculating the coefficients of self-diffusion, diffusion, and viscosity of both monoatomic gases and polyatomic gases. At the same time, the possibility of modeling the most complex transfer process - the energy transfer process - has not yet been considered. This work aims to simulate the thermal conductivity coefficient by the SMM method. Both monoatomic (Ar, Kr, Ne, Xe) and polyatomic gases (CH_4, O_2) were considered.

Keywords: molecular modelling, rarefied gas, transport coefficients, thermal conductivity.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-19-29

REFERENCES

1. Chapman S., Cowling T.G. *The mathematical theory of non-uniform gases.* Cambridge, Cambridge University Press, 1990. 423 p.
2. Hirschfelder J.O., Curtiss Ch.F., Bird R.B. *Molecular theory of gases and liquids*. New York, John Wiley and Sons, London, Chapman and Hall, 1954. 342 p. (Russ. ed.: Girshfel'der Dzh., Kertis Ch., Berd R. *Molekulyarnaya teoriya gazov i zhidkostei*. Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1961. 928 p.).
3. Burnett D. The distribution of velocities in a slightly non-uniform gas. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 1935, vol. 39 (1), pp. 385–430.
4. Rapaport D.C. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge, Cambridge University Press, 1995. 548 p.
5. Rudyak V.Ya. *Statisticheskaya aerogidromekhanika gomogennykh i geterogennykh sred*. T. 2. *Gidromekhanika* [Statistical aerohydromechanics of homogeneous and heterogeneous media. Vol. 2. Hydromechanics]. Novosibirsk, NSUACE Publ., 2005. 320 p.
6. Norman G.E., Stegailov V.V. Stokhasticheskaya teoriya metoda klassicheskoi molekulyarnoi dinamiki [Stochastic theory of the classical molecular dynamics method]. *Matematicheskoe modelirovanie = Mathematical Models and Computer Simulations*, 2012, vol. 24, no. 6, pp. 3–44. (In Russian).
7. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stokhasticheskii metod modelirovaniya koeffitsientov perenosa razrezhennogo gaza [Stochastic method for modeling rarefied gas transport coefficients]. *Matematicheskoe modelirovanie = Mathematical Models and Computer Simulations*, 2017, vol. 29, no. 3, pp. 113–122. (In Russian).
8. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic algorithm for simulating gas transport coefficients. *Journal of Computational Physics*, 2018, vol. 355, pp. 95–103. DOI: 10.1016/j.jcp.2017.11.001.
9. Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V. Stochastic molecular modeling the transport coefficients of rarefied gas and gas nanosuspensions. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2020, vol. 46, pp. 51–54. DOI: 10.17586/2220-8054-2020-11-3-285-293.
10. Zubarev D.N. *Neravnovesnaya statisticheskaya termodinamika* [Nonequilibrium statistical thermodynamics]. Moscow, Nauka Publ., 1971. 415 p.]
11. Allen M.P., Tildesley D.J. *Computer simulation of liquids*. Oxford, Oxford University Press, 1987. 385 p.

12. Rudyak V.Ya. Fluctuation-dissipation theorems and transport coefficients of the gases, liquids and nanofluids. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, vol. 1560, p. 012002. DOI: 10.1088/1742-6596/1560/1/012002.
13. Klimontovich Yu.L. *Kineticheskaya teoriya neideal'nogo gaza i neideal'noi plazmy* [Kinetic theory of non-ideal gases and non-ideal plasmas]. Moscow, Nauka Publ., 1975. 352 p.
14. Rudyak V.Ya. *Statisticheskaya teoriya dissipativnykh protsessov v gazakh i zhidkostyakh* [Statistical theory of dissipative processes in gases and liquids]. Novosibirsk, Nauka Publ., 1987. 271 p.
15. Ernst M.H. Formal theory of transport coefficients to general order in the density. *Physica*, 1966, vol. 32, no. 2, pp. 209–243. DOI: 10.1016/0031-8914(66)90055-3.
16. Khon'kin A.D. Uravneniya dlya prostranstvenno-vremennykh i vremennykh korrelyatsionnykh funktsii i dokazatel'stvo ekvivalentnosti rezul'tatov metodov Chepmena–Enskoga i vremennykh korrelyatsionnykh funktsii [Equations for space-time and time correlation functions and proof of the equivalence of results of the Chapman–Enskog and time correlation methods]. *Teoreticheskaya i matematicheskaya fizika = Theoretical and Mathematical Physics*, 1970, vol. 5, no. 1, pp. 125–135. (In Russian).
17. Grigor'ev I.S., Meilikhova E.Z. *Fizicheskie velichiny* [Physical values]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 1234 p.
18. Rudyak V.Ya, Krasnolutskii S.L., Belkin A.A., Lezhnev E.V. Molecular dynamics simulation of water based nanofluids viscosity. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2020. DOI: 10.1007/s10973-020-09873-8.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Рудяк Валерий Яковлевич – родился в 1945 году, д-р физ.-мат., профессор, заслуженный работник высшей школы РФ, действительный член МАН ВШ, действительный член Американского нанообщества (American Nano Society), главный научный сотрудник НГАСУ (Сибстрин), профессор кафедры нанокомпозитных материалов НГУ. Основные научные направления исследований: неравновесная статистическая механика, кинетическая теория газов, теплофизика процессов переноса, физика наножидкостей, гидромеханика, ламинарно-турбулентный переход, математическое моделирование. Имеет более 500 публикаций, в том числе 7 монографий. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).

Rudyak Valery Ya. (b. 1945) – Doctor of Sciences (Phys & Math.), Professor, Honored Worker of Higher School of Russia, member of the MAS HS, member of the American Nano Society, Chief Scientist of NSUACE and professor of the Nanocomposite Material Department of NSU. His research interests are currently focused on: non-equilibrium statistical mechanics, kinetic theory of gases, thermal transfer processes, nanofluids physics, fluid mechanics, laminar-turbulent transition, mathematical modeling. He is author of more than 500 publications, including 7 monographs. (Address: 113, Leningradskaya st., Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: valery.rudyak@mail.ru).

Лежнев Евгений Васильевич – родился в 1976 году, кандидат технических наук, доцент кафедры теоретической механики НГАСУ (Сибстрин). Основное научное направление исследований: моделирование процессов переноса. Имеет более 20 публикаций. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: lionlev@yandex.ru).

Lezhnev Evgenii Vasil'evich (b. 1976) – Candidate of Sciences (Eng.), assistant professor of theoretical physics NSUACE (Sibstrin). His research interests are currently focused on: modeling of transport processes. He is author of 15 scientific publications. (Address: 113, Leningradskaya st., Novosibirsk, 630008, Russia. E-mail: lionlev@yandex.ru).

Любимов Даниил Николаевич – родился в 1996 году, магистрант НГАСУ (Сибстрин). Основное научное направление исследований: моделирование процессов переноса. Имеет две публикации. (Адрес: 630008, Россия, г. Новосибирск, Ленинградская, 113. E-mail: danillch@mail.ru).

Ljubimov Daniil Nikolaevich (b. 1996) – master of science, NSUACE (Sibstrin). His research interests are currently focused on: modeling of transport processes. He is author of 2 scientific publications. (Address: 113, Leningradskaya st., Novosibirsk, 630008, Russia, e-mail: danillch@mail.ru).

Статья поступила 06 февраля 2021 г.
Received February 06, 2021

To Reference:

Rudyak V.Ya., Lezhnev E.V., Ljubimov D.N. Modelirovanie teploprovodnosti razrezhennykh gazov stokhasticheskim metodom [Simulation of thermal conductivity of rare gases by the stochastic method]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2021, no. 1 (50), pp. 19–29. DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-19-29.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ
2021 январь–март № 1 (50)

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 621.396.9

СТРУКТУРА И АЛГОРИТМ РАБОТЫ МОДУЛЯ СБОРА ДАННЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО КАЛОРИМЕТРА СУПЕР С-Т ФАБРИКИ

А.А. Глушак[1,2]
[1] *Новосибирский государственный технический университет*
[2]*Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН*

Работа посвящена разработке модуля сбора данных электромагнитного калориметра коллайдера Супер с-τ фабрики. Модуль сбора данных является одной из основных частей регистрирующей аппаратуры электромагнитного калориметра. Он предназначен для аналоговой и цифровой обработки сигналов сцинтилляционных счетчиков, вычисления их основных характеристик: амплитуды, времени появления и качества подгонки, участвует в запуске работы системы сбора данных детектора. Для создания модуля разрабатывается его прототип, на котором будет произведена отладка работы модуля и выполнена проверка алгоритма работы устройства. Алгоритм работы модуля включает в себя определение характеристик сигналов и формирование пакетов для передачи данных. Характеристики сигнала вычисляются аппроксимацией функцией, определенной либо методом наименьших квадратов, либо методом минимизации функции χ^2. В ходе математического эксперимента было выявлено, что метод минимизации функции χ^2 дает точность вычислений лучше, чем метод наименьших квадратов, но требует проведения эксперимента со сцинтилляционными счетчиками для определения необходимых коэффициентов. Поэтому в прототипе коэффициенты аппроксимирующей кривой определяются методом наименьших квадратов, а в самом модуле используется метод минимизации функции χ^2. На основании полученных результатов был составлен алгоритм работы модуля, который после был реализован в программируемой пользователем вентильной матрице Altera Cyclone 10GX.

Ключевые слова: электромагнитный калориметр, система сбора данных, сцинтилляционные счетчики, регистрирующая аппаратура, алгоритм обработки сигналов.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-30-40

Введение

Основным инструментом проведения экспериментов по физике высоких энергий являются ускорительные комплексы на встречных пучках. Для их создания применяются последние достижения науки и техники во многих областях. Одной из основных частей ускорительного комплекса является детектор. Он предназначен для регистрации и идентификации частиц, а также определения их основных характеристик: энергии, импульса, траектории движения и других [1]. Для накопления и обработки большого числа данных об исследуемых процессах в детекторах применяются электронные системы регистрации.

Для измерения энергий частиц в детекторах используют калориметрические системы, главной задачей которых являются эффективное поглощение энергии частиц и ее преобразование в пропорциональные электрические сигналы. В электромагнитных калориметрах энергия регистрируемой частицы идет на образование каскадных электромагнитных ливней в материале калориметра. В качестве такого материала используют сцинтилляторы, которые могут быть неорганическими, органическими и газовыми. Преимуществом неорганических кристаллов является высокое время высвечивания (10-1000 нс) [2].

В настоящее время в Институте ядерной физики (ИЯФ) СО РАН работают два электрон-позитронных комплекса со встречными пучками – ВЭПП-4 с детекто-

ром КЕДР [3] и ВЭПП-2000 с детекторами КМД-3 [4] и СНД [5]. Во всех трех детекторах есть калориметры на основе неорганических кристаллов. Аппаратуру для работы этих установок разрабатывал и изготавливал коллектив ИЯФ СО РАН. Также на протяжении длительного периода сотрудники ИЯФ в рамках международного сотрудничества участвуют в нескольких экспериментах по физике высоких энергий, в частности с детектором Belle II (коллайдер SuperKEKB, Япония) [6]. Опыт разработки компонентов детекторов используется не только в модернизации существующих, но и в создании новых электрофизических установок.

Проведенные эксперименты на существующих установках показали, что высокие загрузки (0.1 МГц на кристалл) для сцинтилляторов с большим временем высвечивания могут привести к большой вероятности наложения фонового и полезного сигналов. Это происходит из-за увеличения скорости регистрации полезных событий, которое может привести к увеличению вероятности наложения сигналов от соседних по времени событий. В качестве решения этой проблемы было предложено использовать кристаллы с маленьким временем высвечивания, например чистый CsI, с временем высвечивания 30 нс [7].

Быстрые неорганические кристаллы йодистого цезия (CsI) планируется использовать для регистрации и измерения энергии γ-квантов в электромагнитном калориметре ускорительно-накопительного комплекса Супер с-τ фабрики [8]. Использование таких кристаллов позволяет предотвратить наложение полезного и фонового сигналов, но и в то же время накладывает жесткие требования на компоненты калориметрической системы, в том числе и на считывающую аппаратуру электромагнитного калориметра. Считывающая аппаратура должна обрабатывать сигналы при высокой частоте появления сигналов (30 МГц) с точностью не менее 10^{-3}.

В связи с этим была поставлена задача разработки модуля сбора данных, удовлетворяющего новым условиям работы с входными сигналами, а также алгоритму взаимодействия с остальными компонентами канала регистрации и всей системой сбора данных в целом.

Стоит отметить, что для разработки модуля сбора данных используется опыт создания регистрирующей электронной аппаратуры детекторов Belle II и СНД. Но в отличие от аппаратуры этих детекторов в модуле сбора данных калориметра Супер с-τ фабрики заложены предельные параметры времени формирования сигналов и частоты оцифровки.

1. Структура считывающей аппаратуры калориметра

Система регистрации сигналов сцинтилляционных счетчиков состоит из полупроводникового фотодиода и зарядочувствительного предусилителя (ЗЧУ), которые расположены непосредственно на кристалле формирующего усилителя и аналогово-цифрового преобразователя, вынесенных на отдельную плату. Платы считывающей аппаратуры с быстрыми АЦП расположены в непосредственной близости от кристаллов, что позволяет проводить обработку сигналов сразу после появления события.

Основными задачами разрабатываемой аппаратуры являются формирование сигналов с минимальным уровнем электронного шума, оцифровка сигналов с анализом их формы, формирование пакетов для передачи на следующий уровень системы сбора данных. Техническими особенностями являются следующие.

1. Оцифровка импульсов с кристаллов калориметра длительностью 30 нс производится на частоте 100 МГц.

2. Использование двух диапазонов оцифровки для обеспечения точности определения амплитуды и времени появления сигнала не менее 10^{-3}.

3. Алгоритм обработки сигналов должен обеспечивать обработку сигналов с 16 каналов одной платы формирователей-оцифровщиков-анализаторов с частотой появления сигналов не менее 300 кГц.

4. Вклад когерентных шумов при суммировании 16 каналов должен быть существенно ниже некогерентных шумов.

Структура регистрирующей аппаратуры представлена на рис.1. Она состоит из модулей сбора данных (плат формирователей-оцифровщиков-анализаторов, ФОА) и модулей коллекторов. Задачами модулей сбора данных являются формирование и оцифровка сигналов с кристаллов калориметра, анализ формы сигнала и вычисление характеристик: амплитуда, время появления и оценка качества подгонки. Также платы ФОА формируют сигнал для триггера первого уровня L1. Основной задачей коллектора являются получение данных с плат ФОА и их передача на следующий уровень системы сбора данных. Кроме этого, с помощью коллектора синхронизируется работа плат ФОА и выполняется их калибровка.

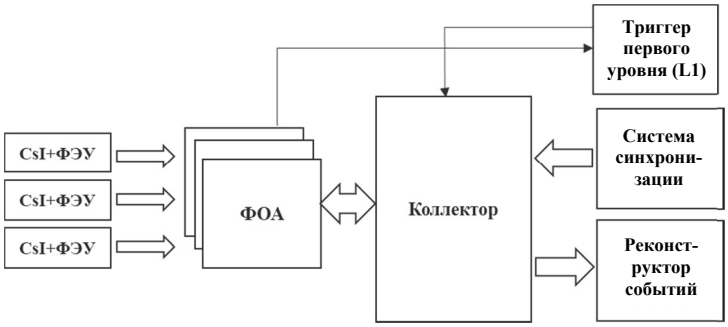


Рис. 1 – Структура системы сбора данных калориметра

Fig.1 – Structure of the data acquisition system of the calorimeter

2. Структура прототипа модуля сбора данных

Для отладки работы модуля сбора данных создается его прототип. Структура четырехканального прототипа модуля сбора данных приведена на рис. 2. С помощью прототипа проводится отладка работы платы и передача данных между модулем сбора данных и коллектором.

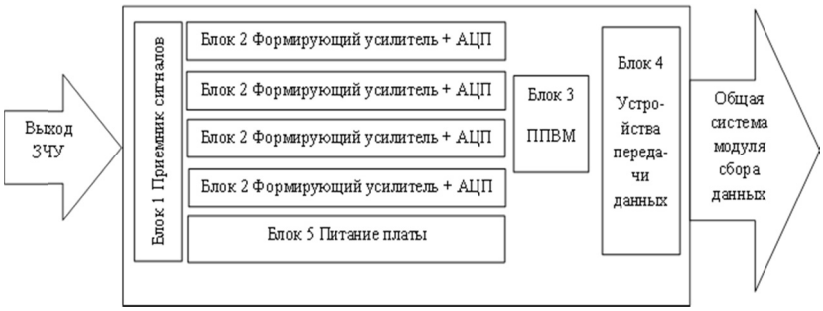


Рис. 2 – Блок-схема устройства прототипа модуля сбора данных

Fig. 2 – Block diagram of the data acquisition module prototype

Каждый канал устройства принимает сигналы с предусилителя, которые обрабатываются аналоговым формирователем сигналов – формирующим усилителем.

На выходе формирующего усилителя образуются два сигнала с разными коэффициентами передачи для расширения динамического диапазона. Сформированные сигналы оцифровываются 14-битными АЦП LTC2267_14. Далее цифровые сигналы обрабатываются в программируемой пользователем вентильной матрице (ППВМ, FPGA) Altera Cyclone 10GX. Интерфейс передачи данных между ППВМ и модулем коллектора осуществляется передачей данных по оптическому волокну. Управляющие сигналы передаются с помощью интерфейса Ethernet по кабелю с четырьмя витыми парами.

3. Алгоритм определения амплитуды и времени

В модуле сбора данных сигналы со счетчиков CsI непрерывно оцифровываются АЦП. После оцифровки данные записываются в кольцевой буфер и по мере готовности цифрового процессора используются для определения амплитуды и времени появления. Для вычислений используется 31 последовательное значение, где первые пятнадцать значений определяют пьедестал, следующие 16 являются выборками сигнала. Как показано на рис. 3, сигнал условно начинается между 15 и 16 выборкой. Эти значения используются в процедуре подгонки, описанной далее.

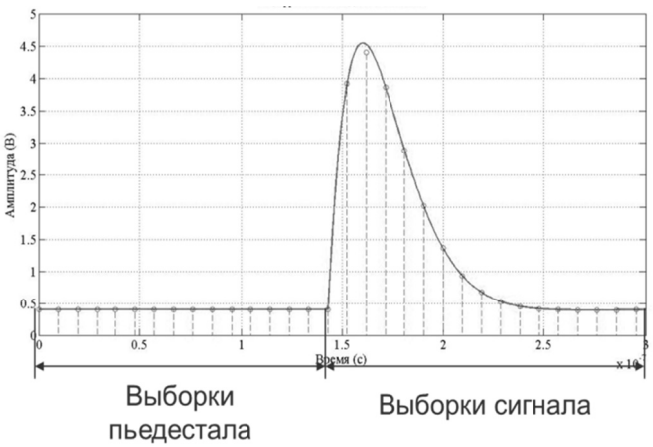


Рис. 3 – Выходной сигнал формирующего усилителя

Fig. 3 – Output signal of the forming amplifier

Аппроксимация сигнала производится одним из двух способов. Первый способ – метод наименьших квадратов [9], второй – метод минимизации функции χ^2 [10]. Если между получаемыми значениями нет корреляции, ошибки имеют гауссовское распределение, то используется метод наименьших квадратов. Аппроксимирующая функция F в этом случае имеет вид (1):

$$F = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (AF(t_i - t_0) + P) \right)^2, \tag{1}$$

где $y_i = AF(t_i - t_0) + P$ – величина выборки; A – амплитуда; P – пьедестал.

Если значения коррелированы, ошибки не имеют гауссова распределения, то лучше для вычисления параметров аппроксимирующей функции использовать метод минимизации функции χ^2. Функция χ^2 вычисляется по следующей формуле (2):

$$\chi^2 = \left(y_i - Af(t_i - t_0) - P\right) S_{ij} \left(y_j - Af(t_j - t_0) - P\right), \qquad (2)$$

где S_{ij} – матрица ошибок. Так как для работы с методом минимизации функции χ^2 требуется получение коэффициентов матрицы ошибок, то в прототипе модуля сбора данных поиск параметров аппроксимирующей функции осуществляется с помощью метода наименьших квадратов. В итоговом модуле сбора данных будет использоваться метод минимизации функции χ^2.

Для минимизации функции F функция $f(t_i)$ по малому параметру Δt раскладывается в ряд Тейлора до первого порядка (3). Значения f и f' вычислены в делениях сетки и записаны в блок памяти ППВМ. В результате уравнение (2) переписывается в формулу (4), решение которого переписывается в систему из трех уравнений (5). Из нового времени вычисляется следующее приближение и повторяется процесс минимизации.

$$Af(t_i - t_1 - \Delta t) = Af(t_i - t_1) - A\Delta t f'(t_i - t_1) = Af(t_i - t_1) + Bf'(t_i - t_1); \qquad (3)$$

$$F(A,B,P) = \sum_{i,j}^{n} \left(y_i - Af_i^m - Bf_i'^m - P\right)^2; \qquad (4)$$

$$\begin{aligned} &\sum y_i f(t_i) - A\sum f(t_i) f(t_i) - B\sum f'(t_i) f(t_i) - P\sum f(t_i) = 0, \\ &\sum y_i f'(t_i) - A\sum f(t_i) f'(t_i) - B\sum f'(t_i) f(t_i) - P\sum f'(t_i) = 0, \\ &\sum y_i - A\sum f(t_i) - B\sum f'(t_i) - PN = 0. \end{aligned} \qquad (5)$$

Для проверки правильности вычисления коэффициентов аппроксимирующей кривой и оценки точности работа алгоритмов вычисления методом наименьших квадратов и методом минимизации функции χ^2 была промоделирована с помощью математического пакета MATLAB (студенческая версия). Для оценки погрешности параметров использовался метод Монте-Карло [11]. Результаты работы метода Монте-Карло были отсортированы с помощью программы Excel, после которого были проанализированы с помощью метода гистограмм [12].

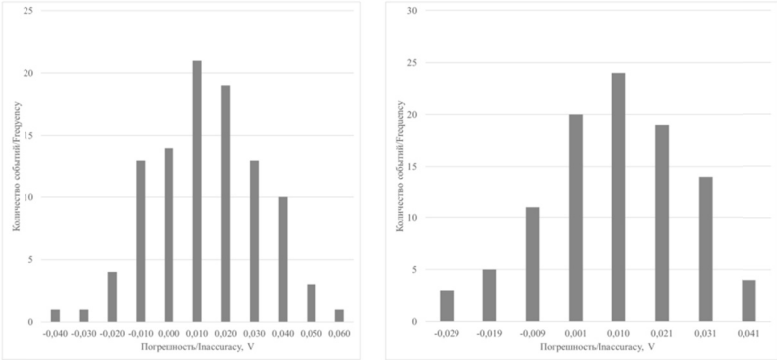
На рис. 4 и 5 приведены гистограммы выборочного распределения погрешности расчета амплитуды и времени появления зашумленных сигналов. Неточности приведенных гистограмм имеют нормальное распределение. Точность расчета амплитуды для первой гистограммы рис. 4 составляет 0,01 В, для второй – 0,01 В. Точность расчета времени появления для первой гистограммы рис. 5 составляет 0,218 нс, для второй – 1,15 нс. Результаты исследования показали, что оба метода дают хорошую точность расчета, но для реальных сигналов лучше использовать метод минимизации функции χ^2. Также было установлено, что трех итераций достаточно для завершения процесса минимизации.

Найденные параметры A, B, P могут быть представлены как сумма оцифрованных значений y_i, умноженных на соответствующие коэффициенты (6). Коэффициенты a_i, b_i, p_i – коэффициенты, которые будут записаны в блок памяти ППВМ. Они определяются из их вклада в сумму соответствующего параметра. Так, для определения параметра A вклад первых 15 значений будет минимальным, и он не учитывался. Для параметра B необходим учет производной аналитической формулы сигнала, поэтому вклад в сумму будут давать с 16 по 32 значения. Для параметра P веса каждого элемента выборки одинаковы:

$$A = \sum a_i y_i$$

$$B = \sum b_i y_i \Rightarrow t_0 = \frac{-B}{A} \qquad (6)$$

$$P = \sum p_i y_i$$



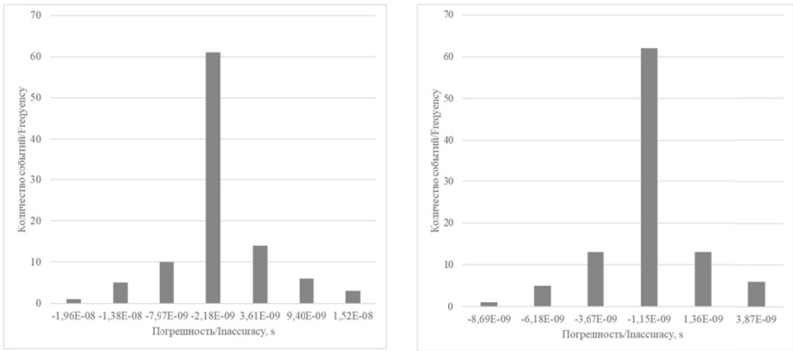
а *б*

Рис. 4 – Гистограммы выборочного распределения погрешности расчета амплитуды:

а – расчет методом наименьших квадратов; *б* – расчет методом минимизации функции χ^2

Fig. 4 – Sample distribution histograms for the amplitude calculation inaccuracy:

a – is amplitude calculation by the method of least squares; *b* – is amplitude calculation by the method of minimizing χ^2 function



а *б*

Рис. 5 – Гистограммы выборочного распределения погрешности расчета времени появления:

а – расчет методом наименьших квадратов; *б* – расчет методом минимизации функции χ^2

Fig. 5 – Sample distribution histograms for the calculation inaccuracy of time appearance:

a – is calculation by the method of least squares; *b* – is calculation by the method of minimizing χ^2 function

Для оценки качества подгонки обычно используют либо сумму квадратов из-за ошибки (SSE), либо вычисление коэффициента R-квадрат [13]. R-квадрат выглядит наиболее привлекательным критерием для оценки качества подгонки, но в данной работе не применим из-за большого числа вычисляемых значений. Поэтому оценка качества подгонки вычисляется как сумма квадратов из-за ошибки (SSE).

Оценка качества подгонки в FPGA производится следующим образом. После вычисления коэффициентов A, B, P вычисляется подгонка согласно формуле (7).

$$Q = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - Af(i) - Bf'(i) - P \right)^2. \qquad (7)$$

Эта величина сравнивается с ожидаемой $Q = (\alpha + \beta)A^2$, где α, β – коэффициенты, определяемые из данных, при их вычислении учитываются свойства регистрирующей аппаратуры калориметра (нелинейность, шум). Когда амплитуда сигнала мала, отклонения описываются шумом электронных устройств, при больших значениях амплитуды – нелинейностью.

Далее представлены некоторые детали аппаратной реализации вычислений в модуле сбора данных.

4. Реализация алгоритма работы модуля с помощью ППВМ

После разработки алгоритма обработки значений со счетчиков CsI и отладки вычислений с помощью математического моделирования алгоритм был адаптирован для вычисления в ППВМ. На рис. 6 представлена блок-схема проекта цифровой обработки сигналов для прототипа.

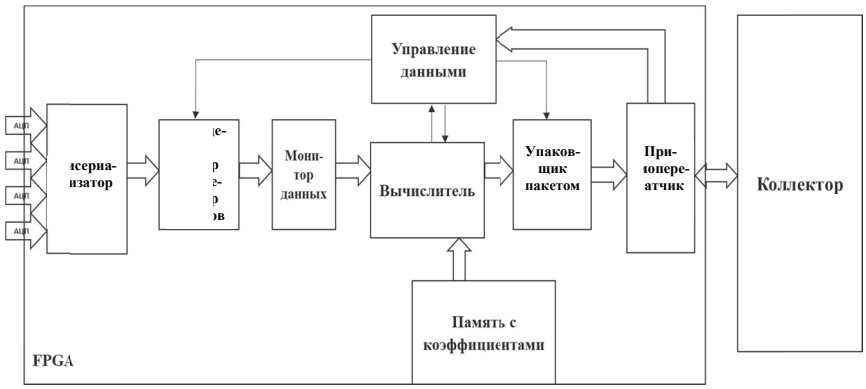


Рис. 6 – Проект цифровой обработки сигналов

Fig. 6 – Digital signal processing project

Данные с АЦП в последовательном виде поступают на вход ППВМ, где они переписываются в параллельный код и записываются в кольцевой буфер, емкость которого составляет 1024 слова для каждого канала. В буфере данных есть генератор адресов, с помощью которого определяются адреса, по которым уже записаны данные.

Когда появляется сигнал первичного триггера, коллектор передает через приемопередатчик в блок управления данными сигнал первичного триггера и номер сработавшего триггера. Блок управления данными обрабатывает полученный пакет и запускает работу генератора адресов в кольцевом буфере и определяет

очередность обработки каналов в вычислителе. Перед обработкой сигналов в вычислителе данные фильтруются с помощью монитора данных. Сигналы, не превышающие заданного порога, отбрасываются. После этого пакет оцифрованных значений по сигналу готовности вычислителя передается в блок вычислителя, где определяются характеристики сигналов (амплитуда, время появления и качество подгонки). Затем данные упаковываются и передаются в приемопередатчик, с помощью которого они передаются в коллектор.

На рис. 7 представлена структура проекта обработки данных в ППВМ Altera Cyclone 10GX. На вход ППВМ в последовательном виде подаются двухфазные сигналы с АЦП (dco, frame, out_a_1, out_a_2, out_b_1, out_b_2), где они в приемниках-преобразователях inp_buf_clk и in_buf (расположен в канале подготовки данных) преобразуются в однофазные сигналы. Далее в блоке channel_config по появлению сигнала триггерной системы блока coll_rec сигналы out_a_1, out_a_2, out_b_1, out_b_2 предварительно обрабатываются и записываются в буфер FIFO в блоке управления данными (data_manager). По мере готовности вычислителя DSP (dsp_block) сигналы передаются в блок вычислителя, где с помощью коэффициентов, записанных в блок памяти coef_memory, определяются характеристики сигналов (A, t_0, Q, P). После этого характеристики вместе с маской сработавших каналов передаются в блок phy_packer, где формируется пакет для передачи данных по оптической линии. Блок coll_rec обрабатывает пакеты данных с коллектора.

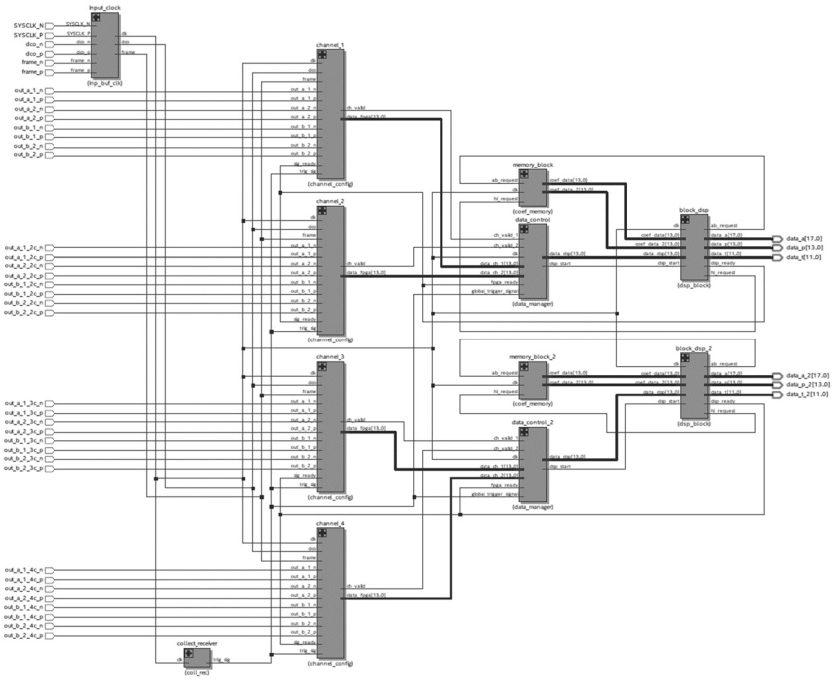


Рис. 7 – Структура обработки сигналов в ППВМ

Fig. 7 – Structure of signal processing in FPGA

Проект вычисления характеристик сигнала был написан на языке описания аппаратуры VHDL в программном обеспечении Quartus Prime Pro, промоделирован и отлажен с помощью среды ModelSim INTEL FPGA STARTER EDITION. На данный момент ведется разработка интерфейсов передачи данных по оптическому волокну и JTAG интерфейсу.

Заключение

Для электромагнитного калориметра детектора нового коллайдера Супер с-τ фабрики разрабатывается новый модуль сбора данных. Он строится на базе конвейерной архитектуры в соответствии с требованиями, предъявляемыми к считывающей аппаратуре калориметра и системе сбора детектора в целом.

На данный момент ведется работа по разработке прототипа модуля сбора данных. Ожидается изготовление электронных схем модулей, на данный момент ведется разработка программного обеспечения и его отладка с помощью компьютерного моделирования и симулирования.

Опыт разработки модуля сбора данных может использоваться в действующих и будущих ускорительно-накопительных комплексах, в которых предполагается использование быстрых кристаллов в электромагнитных калориметрах.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Групен К.** Детекторы элементарных частиц. – Новосибирск: Сибирский хронограф, 1999. – 408 с.
2. **Онучин А.П.** Экспериментальные методы ядерной физики: учебное пособие. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2010. – 220 с.
3. Триггер детектора КЕДР / С.Е. Бару, А.А. Талышев, В.И. Тельнов, Ю.Г. Украинцев, Ю.В. Усов, Л.И. Шаманаева, А.Г. Шамов // Приборы и техника эксперимента. – 2011. – № 3. – С. 46–61.
4. Архитектура системы регистрации и запуска детектора КМД-3 / В.М. Аульченко, Д.А. Епифанов, А.Н. Козырев, И.Б. Логашенко, А.С. Попов, А.А. Рубан, А.Н. Селиванов, А.А. Талышев, В.М. Титов, Ю.В. Юдин, Л.Б. Эпштейн // Автометрия. – 2015. – Т. 51, № 1. – С. 31–38.
5. Программное обеспечение системы сбора данных детектора СНД / М.Н. Ачасов, А.Г. Богданчиков, В.П. Дружинин, А.А. Король. – Новосибирск, 2003. – 31 с. – (Препринт / Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН; ИЯФ 2003-39).
6. **Шебалин В.Е.** Электромагнитный калориметр детектора Belle-II // Физика элементарных частиц и атомного ядра. – 2018. – Т. 49, вып. 4. – С. 1392–1400.
7. **Прохорова Е.С.** Разработка прототипа электромагнитного калориметра на основе сцинтилляционных кристаллов CsI и кремниевых лавинных фотодиодов для Супер Чарм-тау фабрики: ВКР бакалавра / Новосибирский государственный университет. – Новосибирск, 2018. – 33 с.
8. Супер Чарм–Тау фабрика. Концептуальный проект. Ч. 1 (физическая программа, детектор) / В.В. Анашин, А.В. Анисёнков, В.М. Аульченко и др. – Новосибирск: ИЯФ СО РАН, 2018. – 136 с.
9. **Гринкевич В.А.** Идентификация устройства на основе элемента Пельтье методом наименьших квадратов // Доклады АН ВШ РФ. – 2020. – № 1–2 (46–47). – С. 17–27. – DOI: 10.17212/1727-2769-2020-1-2-17-27.
10. **Лемешко Б.Ю.** Критерий согласия типа хи-квадрат при проверке нормальности // Измерительная техника. – 2015. – № 6. – С. 3–9.
11. **Семенов К.К.** Достоверность результатов применения метода Монте-Карло в задачах интервального анализа // Вычислительные технологии. – 2016. – Т. 21, № 2. – С. 42–52.
12. **Солонин С.И.** Метод гистограмм: учебное электронное текстовое издание. – Екатеринбург: УрФУ, 2014. – 98 с.
13. **Миронов Э.Г., Ордуянц Г.Ж.** Новый метод погрешностей средств измерений // Ural Radio Engineering Journal. – 2017. – Т. 1, № 1. – С. 120–126.

STRUCTURE AND OPERATION ALGORITHM OF THE DATA COLLECTION MODULE OF THE SUPER C-T FACTORY ELECTROMAGNETIC CALORIMETER

Glushak A.A.[1,2]
[1]*Novosibirsk State Technical University*
[2]*Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences*

The study is devoted to the development of a data collection module of the electromagnetic calorimeter of the Super c-τ factory collider. The data collection module is one of the main parts of the data acquisition system of the electromagnetic calorimeter. It is designed for analog and digital signal processing of scintillation counters, calculating its main characteristics (amplitude, time of occurrence and quality of fitting), and participates in the launch of the detector data acquisition system. A prototype of the module on which the module will be debugged and the algorithm of the device will be checked is being developed. The algorithm of the module includes the calculation of signal characteristics and the formation of packets for data transmission. Signal characteristics are calculated by approximating a function defined either by the least squares method or by the method of χ^2 function minimization. In the course of a mathematical experiment, it was found that the method of χ^2 function minimization gave more accurate calculation values than the least squares method. However, it requires an experiment with scintillation counters to determine the necessary coefficients. Therefore, the coefficients of the approximating curve are determined by the least squares method in the prototype and the method of χ^2 function minimization is used in the module. Based on the results obtained, an algorithm of the module operation was compiled, which was then implemented in the field-programmable gate array Altera Cyclone 10GX.

Keywords: electromagnetic calorimeter, data acquisition system, scintillation counters, least squares method, method of χ^2 function minimization.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-30-40

REFERENCES

1. Grupen C. *Particle detectors*. Cambridge, Cambridge University Press, 1996 (Russ. ed.: Grupen K. *Detektory elementarnykh chastits*. Novosibirsk, Sibirskii khronograf Publ., 1999. 408 p.).
2. Onuchin A.P. *Eksperimental'nye metody yadernoi fiziki* [Experimental methods of nuclear physics]. Novosibirsk, NSTU Publ., 2010. 220 p.
3. Baru S.E., Talyshev A.A., Telnov V.I., Ukraintsev Yu.G., Usov Yu.V., Shamanaeva L.I., Shamov A.G. Trigger detektora KEDR [Trigger of the KEDR detector]. *Pribory i tekhnika eksperimenta = Instruments and Experimental Techniques*, 2011, no. 3, pp. 46–61. (In Russian).
4. Aulchenko V.M., Epifanov D.A., Kozyrev A.N., Logashenko I.B., Popov A.S., Ruban A.A., Selivanov A.N., Talyshev A.A., Titov V.M., Yudin Y.V., Epshteyn L.B. Arkhitektura sistemy registratsii i zapuska detektora KMD-3 [Architecture of the registration and triggering system of the KMD-3 detector]. *Avtometriya = Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2015, vol. 51, no. 1, pp. 31–38. (In Russian).
5. Achasov M.N., Bogdanchikov A.G., Druzhinin V.P., Korol' A.A. Programmnoe obespechenie sistemy sbora dannyh detektora SND [Software of the SND detector data collection system]. Novosibirsk, Budker Institute of Nuclear Physics, 2003. 31 p.
6. Shebalin V.E. Elektromagnitnyi kalorimetr detektora Belle-II [Electromagnetic calorimeter of Belle-II detector]. *Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra = Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei*, 2018, vol. 49, iss. 4, pp. 1392–1400.
7. Prokhorova E.S. *Razrabotka prototipa elektromagnitnogo kalorimetra na osnove stsintillyatsionnykh kristallov CsI i kremnievykh lavinnykh fotodiodov dlya Super Charm-tau fabriki* [Development of a prototype of an electromagnetic calorimeter based on CsI scintillation crys-

tals and silicon avalanche photodiodes for the Super Charm-Tau factory]. Final qualifying work: bachelor's degree. Novosibirsk State University, 2018. 33 p.
8. Anashin V.V., Anisenkov A.V., Aul'chenko V.M., et al. *Super Charm–Tau fabrika. Kontseptual'nyi proekt*. Ch. 1 (*fizicheskaya programma, detektor*) [Super Charm – Tau Factory. Conceptual project. Pt. 1 (physical program, detector)]. Novosibirsk, INP SB RAS Publ., 2018. 136 p.
9. Grinkevich V.A. Identifikatsiya ustroistva na osnove elementa Pel't'e metodom naimen'shikh kvadratov [The identification of a device based on a Peltier element by the least squares method]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2020, no. 1–2 (46–47), pp. 17–27. DOI: 10.17212/1727-2769-2020-1-2-17-27.
10. Lemeshko B.Yu. Kriterii soglasiya tipa khi-kvadrat pri proverke normal'nosti [A chi-square goodness-of-fit criterion for checking normality]. *Izmeritel'naya tekhnika = Measuring Techniques*, 2015, no. 6, pp. 3–9. (In Russian).
11. Semenov K.K. Dostovernost' rezul'tatov primeneniya metoda Monte-Karlo v zadachakh interval'nogo analiza [Reliability of the results of using the Monte Carlo method in problems of interval analysis]. *Vychislitel'nye tekhnologii = Computational Technologies*, 2016, vol. 21, no. 2, pp. 42–52.
12. Solonin S.I. *Metod gistogramm* [Method of histograms]. Educational electronic text edition. Ekaterinburg, UrFU Publ., 2014. 98 p.
13. Mironov E.G., Orduyants G.Zh. Novyi metod pogreshnostei sredstv izmerenii [New statistical approach to the valuation of measuring instruments errors]. *Ural Radio Engineering Journal*, 2017, vol. 1, no. 1, pp. 120–126.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Глушак Анастасия Андреевна – родилась в 1997 году, старший лаборант сектора 3-12 Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук, магистрант кафедры электрофизических установок и ускорителей НГТУ. Опубликовано пять научных работ. (Адрес: 630090, Россия, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 11. E-mail: aaglushak@mail.ru).

Glushak Anastasia Andreevna (b. 1997) – a senior laboratory assistant of the sector 3-12 BINP SB RAS, a master's student at the department of electrical installations and accelerators, NSTU. She is the author of 5 scientific papers. (Address: 11, Academician Lavrentyev Prospekt, Novosibirsk, 630090, Russia,. E-mail: aaglushak@mail.ru).

Статья поступила 04 января 2021 г.
Received January 04, 2021

To Reference:

Glushak A.A. Struktura i algoritm raboty modulya sbora dannykh elektromagnitnogo kalorimetra Super c-τ fabriki [Structure and operation algorithm of the data collection module of the Super c-τ factory electromagnetic calorimeter]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2021, no. 1 (50), pp. 30–40. DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-30-40.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ
2021 январь–март № 1 (50)

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 62-835

ОПТИМИЗАЦИЯ ПУЛЬСАЦИЙ МОМЕНТА ДВИГАТЕЛЯ В ЭЛЕКТРОПРИВОДЕ С ПРЯМЫМ УПРАВЛЕНИЕМ

А.А. Кромм[1], Г.М. Симаков[2], В.В. Топовский[2]
[1]*Linde Material Handling GmbH, Ашаффенбург, Германия*
[2]*Новосибирский государственный технический университет*

В статье рассматриваются особенности синтеза гибридного способа управления трехфазным преобразователем в электрических приводах переменного тока с классическим вариантом прямого управления момента двигателя. Прямое управление предполагает использование релейных контуров потокосцепления и момента двигателя. Показано, что выходное напряжение полупроводникового преобразователя на базе трехфазного инвертора сформировано только шестью базовыми векторами (исключая нулевой вектор). Сказано также, что при классическом варианте прямого управления двигателя пульсации момента на валу двигателя значительно выше, чем в системах с широтно-импульсной модуляцией. Произведен анализ решения гибридного способа коммутации его ключей, позволяющего уменьшить амплитуду пульсаций момента двигателя. На основе анализа предложенного решения представлен закон гибридного управления преобразователя посредством формирования дополнительных векторов его выходного напряжения без каких-либо тригонометрических функций в опорном сигнале.

К достоинствам метода следует отнести простоту управления приводом, реализация которого осуществляется исключительно программным продуктом. Отсутствие итерационных методов математики снижают ресурсы микропроцессорных блоков управления, что делает данный метод еще более привлекательным в стоимости привода. Приведены осциллограммы координат электропривода с прямым управлением момента для базовых векторов выходного напряжения преобразователя. Привод с прямым управлением момента сформирован при гибридном способе коммутации силового преобразователя.

Ключевые слова: прямое управление моментом, релейные контуры, оптимизация пульсаций момента, гибридное управление преобразователем, алгоритм формирования векторов, идентификатор активации, осциллограммы привода.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-41-53

Введение

Точность воспроизведения задающих воздействий в приводах переменного тока с полупроводниковыми преобразователями зависит от многих факторов, перечисление которых в одной статье невозможно. Однако известно, что значительное влияние на качество управляющих воздействий в канале управления двигателем оказывает алгоритм управления силового преобразователя. Выбор рационального способа управления преобразователем – сложная задача при разработке оптимизации привода. Использование хорошо изученной широтно-импульсной модуляции (ШИМ) по стоимости привода не всегда оправданно. Эффективность использования энергетических ресурсов звена постоянного тока и затраты на наладку и техническое обслуживание привода дают проигрыш по стоимости преобразователя. Первая проблема связана с недоиспользованием напряжения звена постоянного тока [1–3], а вторая – со сложностью программного продукта, который должен

обеспечить прецизионное формирование модуля и угла вектора выходного напряжения преобразователя.

Желание упростить систему управления преобразователем и привода в целом привело к созданию таких алгоритмов, как прямое управление моментом двигателя (ПУМ). Прямое управление в классическом варианте использует исключительно базовый закон коммутации ключей преобразователя. Наряду с простотой технической реализации базового закона он способен создать в приводе динамичные процессы формирования тока, потокосцепления и момента двигателя [2, 4–6]. При классической ПУМ не требуется прямого и обратного преобразователей координат. Релейные регуляторы момента и потокосцепления двигателя в сочетании с фиксированной таблицей истинности управления делают систему управления приводом весьма конкурентоспособной на мировом рынке.

К достоинствам приводов с ПУМ следует отнести:

– не требует контура тока в классическом варианте привода с ПУМ [2, 7];

– отпадает необходимость увеличения индекса модуляции преобразователя (в сравнении с ШИМ) [2] посредством методов „Flat-Top-Modulation“ (FTM) [2,8];

– не нужно запаса напряжения в звене постоянного тока для формирования желаемой динамики привода [2, 9].

Так, например, в [9] показано, что для большего индекса модуляции следует выбирать такой метод FTM, который в зависимости от характера нагрузки инвертора обеспечивал бы минимальные потери в силовой части привода. Там же предложена одна из реализаций FTM, при которой увеличение индекса модуляции осуществляется на основе задания векторов напряжения преобразователя без применения каких-либо тригонометрических функций в опорном сигнале.

Недостатки привода с ПУМ, которые препятствуют их доминированию над системами с ШИМ, хорошо изучены. В первую очередь, к ним можно отнести следующие:

– классическое исполнение приводов с ПУМ базируется на релейном принципе управления. Такие структуры отличаются переменной частотой коммутации силовых ключей инвертора. Наличие значительных пульсаций в электромагнитном моменте и потокосцеплении двигателя при малых значениях нагрузки снижает точность регулирования, повышает энергопотребление, увеличивает акустический шум двигателя [2, 4, 11]. Например, в [4] предлагается устранение отмеченных недостатков введением в систему управления преобразователем синусоидальной ШИМ или пространственно-векторной ШИМ. Оба варианта позволяют формировать импульсы управления ключей инвертора с постоянной частотой коммутации и, как следствие, уменьшить амплитуду пульсаций потокосцепления и момента двигателя. Данное решение не находит широкого распространения на практике из-за усложнений системы управления преобразователем и приводит к неполному использованию напряжения звена постоянного тока;

– в классическом приводе с ПУМ отсутствует явно выраженный контур регулирования фазных токов двигателей. При этом есть вероятность локального насыщения магнитопровода статора. Частичное насыщение магнитопровода не является препятствием для разработки и внедрения привода. Такая синусоидальная форма тока двигателя выходного напряжения невозможна с использованием базисных векторов [11]. В работе отмечается, что увеличение частот дискретизации при расчетах алгоритма ПУМ позволяет приблизиться к характеристикам систем только векторного управления с ШИМ. Там же приведены сравнительные кривые токов и моментов электрического двигателя;

– существенно изменены амплитуды и формы пульсаций тока, потокосцепления и момента двигателя релейных регуляторов; они связаны с проблемами оптимизации желаемого закона управления приводом.

1. Постановка задачи

В электрических приводах переменного тока с классическим вариантом прямого управления двигателя релейные контуры потокосцепления и момента возможны только при реализации шести базовых векторов выходного напряжения преобразователя (исключая нулевой вектор) [1, 2]. При использовании базового закона коммутации преобразователя не всегда возможно создание желаемого вектора напряжения двигателя, и, как следствие, дальнейшая оптимизация пульсаций потокосцепления и момента двигателя. Применение ШИМ в приводе с ПУМ решает проблему желаемых векторов. При этом разработка и наладка привода в целом является проигрышной не только по эффективности использования напряжения звена постоянного тока, но и по временным затратам. Кроме того, для синхронных реактивных двигателей ПУМ является приоритетным алгоритмом управления электроприводом [2, 10].

С учетом постановки задачи могут быть сформулированы следующие вопросы:

– нужно доказать, что при классическом варианте привода с ПУМ амплитуда пульсаций потокосцепления и момента на валу двигателя действительно выше, чем в системах ПУМ сравнительно с ШИМ;

– провести анализ решения, которое бы позволило в рамках базовой коммутации снизить пульсации потокосцепления и момента двигателя;

– на основе предложенного решения необходимо сформировать условия гибридного способа коммутации преобразователя, например, посредством идентификатора активации;

– предложенный алгоритм должен без труда интегрироваться в привод с микропроцессорным управлением, обеспечивая полную совместимость с векторными системами управления. Изменения или дополнения схемотехнических решений силовой части привода исключаются;

– алгоритм гибридного способа управления преобразователем должен реализовываться в оптимизированных по стоимости микропроцессорах, не обладающих «больших ресурсами»;

– представить результаты исследований путем сравнения координат и характеристик привода в системах гибридного и классического управления преобразователем.

Целью работы является минимизация амплитуды пульсаций потокосцепления и момента электрического привода переменного тока в системах прямого управления двигателем. В системе прямого управления с релейными контурами за счет модифицированного (гибридного) способа инвертора осуществляется формирование базовых векторов преобразователя. При этом параметры релейных регуляторов в процессе работы привода остаются фиксированными. Гибридный способ коммутации ключей инвертора требует синтезированных векторов напряжения преобразователя. Введение же идентификатора для гибридного управления преобразователя внесло бы значительные отклонения базовых векторов от желаемых.

Рассмотренный в статье гибридный способ управления преобразователем ориентирован на практическое применение. Прозрачность способа и простота его реализации устраняют необходимость изменений или дополнений в силовой части привода. Снижение временных затрат на разработку программного продукта и наладку улучшает стоимостные показатели электропривода.

2. Синтез гибридного способа коммутации преобразователя

На основе анализа технических решений приводов с ПУМ следует отметить, пожалуй, два самых важных достоинства, которые дают толчок дальнейшим исследованиям в этой области: высокая скорость динамических процессов в контуре регулирования моментом двигателя и простота реализации системы управления в ее классической версии. Как уже отмечалось, одна из главных причин ПУМ, порождающая многие недостатки – это отсутствие формирования желаемого вектора напряжения статора двигателя (по модулю и углу) посредством коммутации ключей базового закона преобразователя (БЗП). Ниже будет рассмотрен один из модифицированных способов управления силовым преобразователем. Это позволяет существенно улучшить качество управления приводом в целом, основой которого является БЗП.

Для того чтобы показать целесообразность применения гибридного способа преобразователя (ГСП), предлагается оценить его положительное влияние на амплитуду пульсаций момента с использованием математического аппарата. Итак, связь момента, потокосцепления и тока статора электрического двигателя в векторно-матричной форме может быть выражена следующей зависимостью:

$$M = k\left(\boldsymbol{\psi}_S^T \mathbf{D}\mathbf{I}_S\right),$$

где M – электромагнитный момент двигателя; $\boldsymbol{\psi}_S$ – вектор потокосцепления статора двигателя; $\mathbf{D}$ – классическая матрица преобразования, формирующая векторное произведение векторов; $\mathbf{I}_S$ – вектор тока статора; k – константа пропорциональности момента.

С присвоением индекса (*bl*) моменту и потокосцеплению привода с классическим ПУМ, а также индекса (*qo*) моменту и потокосцеплению двигателя с некоторым желаемым управлением преобразователя (например, с ШИМ) форма записи моментов примет следующий вид:

$$M_{bl} = k\left(\boldsymbol{\psi}_{bl}^T \mathbf{D}\mathbf{I}_S\right);\ M_{qo} = k\left(\boldsymbol{\psi}_{qo}^T \mathbf{D}\mathbf{I}_S\right). \tag{1}$$

Из (1) может быть определен коэффициент соотношений моментов M_{bl} и M_{qo} в функции отклонения модуля потокосцепления в приводах с ПУМ от желаемого:

$$k_{bq} = M_{bl} / M_{qo} = (M_{qo} + \Delta M_{bl}) / M_{qo} =$$

$$= k\left(\left(\boldsymbol{\psi}_{qo}^T + \Delta\boldsymbol{\psi}_{bl}^T\right)\mathbf{D}\mathbf{I}_S\right) / k\left(\boldsymbol{\psi}_{qo}^T \mathbf{D}\mathbf{I}_S\right), \tag{2}$$

где k_{bq} – коэффициент, характеризующий отклонение момента двигателя от желаемого в случае привода с классическим ПУМ; ΔM_{bl} – отклонение момента двигателя от желаемого; $\Delta\boldsymbol{\psi}_{bl}$ – вектор отклонения потокосцепления статора от желаемого. (Замечание: использование в формуле только знака «плюс» объясняется максимально возможным выходным напряжением преобразователя при реализации БЗП.)

Для равных токов статора двигателя формула (2) может быть представлена в следующем виде:

$$k_{bq} = (M_{qo} + \Delta M_{bl}) / M_{qo} = \left(\boldsymbol{\psi}_{qo}^T + \Delta\boldsymbol{\psi}_{bl}^T\right) / \boldsymbol{\psi}_{qo}^T = 1 + \Delta\boldsymbol{\psi}_{bl}^T / \boldsymbol{\psi}_{qo}^T . \qquad (3)$$

Последняя зависимость хоть и дает общее преставление о влиянии нежелательного вектора $\Delta\boldsymbol{\psi}_{bl}$ на момент двигателя, модуль которого определяется как $\left|\Delta\boldsymbol{\psi}_{bl}\right| = \left(\Delta\boldsymbol{\psi}_{bl} \cdot \Delta\boldsymbol{\psi}_{bl}^T\right)^{1/2}$, однако не дает «прямой привязки» к напряжению базовых векторов полупроводникового преобразователя. Кроме того, расчет величины k_{bq} по соотношениям (2, 3) корректен только для синфазных векторов потокосцеплений. Для уточнения и дополнения результатов исследования целесообразно воспользоваться хорошо известной зависимостью [1, 2, 7], часто используемой для оценок потокосцеплений в приводах с ПУМ при нулевых начальных условиях:

$$\boldsymbol{\psi}_s = \int \left(U_s - I_s R_s\right) dt ,$$

где U_s – напряжение, подводимое к статору двигателя; I_s – ток статора двигателя; R_s – омическое сопротивление обмотки статора двигателя.

С учетом допущения $R_s = 0$ [1, 2, 7] и представлением напряжения статора двигателя и, следовательно, выходного напряжения преобразователя вектором на комплексной плоскости, потокосцепление статора двигателя может быть записано следующим образом:

$$\boldsymbol{\psi}_s = \int \left|U_s\right| e^{j\omega t} dt = \frac{1}{j\omega}\left|U_s\right| e^{j\theta} , \qquad (4)$$

где U_s – модуль вектора выходного напряжения преобразователя; ω – круговая частота; $\Theta = \omega t$ – угловое положение вектора выходного напряжения преобразователя.

На основании (4) комплексный коэффициент соотношения потокосцеплений (k_{bq}^*) при БЗП и некотором желаемом управлении с учетом описанных индексов может быть представлен в следующем виде:

$$k_{bq}^* = \frac{\boldsymbol{\psi}_{bl}}{\boldsymbol{\psi}_{qo}} = \frac{\left|U_{bl}\right|}{\left|U_{qo}\right|} e^{j\left(\Theta_{bl} - \Theta_{qo}\right)} = \left(1 + \frac{\left|\Delta U_{bl}\right|}{\left|U_{qo}\right|}\right) e^{j\left(\Theta_{qo} \pm \Delta\Theta_{bl}\right) - j\Theta_{qo}} ,$$

где $|U_{bl}|$, $|U_{qo}|$ – модули векторов выходного напряжения преобразователя при БЗП и желаемом управлении соответственно; $|\Delta U_{bl}|$ – модуль вектора отклонения напряжения преобразователя при БЗП от желаемого; Θ_{bl} – угол одного из шести базовых векторов напряжения, определяемых как $\Theta_{bl} = n\pi/3$, $n \in [1,6]$; n – номер базовых векторов преобразователя в приводе с ПУМ (нумерация общепринятая [1, 2]); Θ_{qo} – угол желаемого вектора напряжения в соответствующем секторе шестиугольника, образованного концами базовых векторов; $\Delta\Theta_{bl}$ – отклонение угла базового вектора от желаемого.

После несложных преобразований коэффициент отклонения потокосцепления двигателя можно записать в функции модулей и фаз напряжений преобразователя в случае желаемого и классического способов управления привода с ПУМ:

$$\Delta k_{bq}^{*} = \frac{|\Delta U_{bl}|}{|U_{qo}|} e^{\pm j\Delta\Theta_{bl}}, \tag{5}$$

или через векторы напряжений преобразователя, при представлении последних в форме вектор-столбцов:

$$\Delta k_{bq}^{*} = \left(\frac{\Delta U_{bl}^{T} \cdot \Delta U_{bl}}{U_{qo}^{T} \cdot U_{qo}}\right)^{1/2} e^{\pm j \arccos\left(\frac{U_{bl}^{T} \cdot U_{qo}}{\left(\left(U_{bl}^{T} \cdot U_{bl}\right) \cdot \left(U_{qo}^{T} \cdot U_{qo}\right)\right)^{1/2}}\right)}. \tag{6}$$

Таким образом, из (5), (6) можно сделать вывод о том, что амплитуда пульсаций момента и потокосцепления двигателя переменного тока зависит не только от величины $|\Delta U_{bl}|$, но и от рассогласования углового положения базового вектора преобразователя от желаемого. В случае совпадения желаемого вектора с базовым $|U_{bl}| = |U_{qo}|$ и $\Delta\Theta_{bl} = 0$ пульсации момента двигателя при фиксированных параметрах релейных регуляторов потокосцепления и момента в системе с ПУМ будут идентичны и минимальны.

Проверка базовых векторов, являются ли они желаемыми, не представляет сложности, однако очевидно, что вероятность их совпадения весьма низка. Поэтому предлагается в рамках БЗП реализовать гибридное управление преобразователем с применением еще шести дополнительных векторов, образованных переключением двух «соседних» базовых векторов в соответствующем секторе плоскости их реализаций. Дополнительно образованные векторы синтезируются без использования ШИМ, т. е. без применения каких-либо тригонометрических функций в опорном сигнале преобразователя. Обеспечивая равенство временных интервалов активации «соседних» базовых векторов, положение дополнительных векторов опишется как

$$\Theta_{dop}(n) = n\pi/3 - \pi/6, \quad n \in [1,6],$$

где Θ_{dop} – угол дополнительных векторов в соответствующем секторе шестиугольника.

Формирование дополнительных векторов можно осуществить через «прямое» переключение с вектора на вектор или через нулевой вектор минимальной длительности, что эквивалентно граничному режиму ШИМ с углами $\Theta_{dop}(n)$. (Замечание: подробное описание наиболее распространенных способов коммутации ключей инвертора представлено в [1, 2, 7].) Закон формирования дополнительных векторов в преобразователе с ГСП может быть записан в следующем виде:

$$U_{bl}^{a}\left(\frac{n\pi}{3}\right) \to U_{bl}^{a}\left(\frac{\left(n-\mathrm{sign}(\omega^{U})\right)\pi}{3}\right) \to U_{bl}^{a}\left(\frac{n\pi}{3}\right), \quad n \in [1,6], \tag{7}$$

где U_{bl}^{a} – активный базовый вектор преобразователя с соответствующим угловым положением; $\mathrm{sign}(\omega^{U})$ – знак направления вращения вектора напряжения в неподвижных координатах привода.

Для реализации гибридного управления необходим идентификатор, который бы в зависимости от рассогласования углового положения векторов при БЗП и желаемом управлении активировал алгоритм (7). Функционально идентификатор может быть реализован следующим образом:

$$F(\Theta) = \begin{cases} 1, \ (\left|\Theta_{bl} - \Theta_{w}\right| \geq \Theta_{ref}), \\ 0, \ (\left|\Theta_{bl} - \Theta_{w}\right| < \Theta_{ref}), \end{cases}$$

где Θ_{w} – желаемое положение вектора напряжения преобразователя, сформированное, например, микропроцессорным блоком управления привода; Θ_{ref} – некоторый опорный угол.

В случае $F(\Theta)$ = 1 идентификатор активирует ГСП, в противном случае формируется классический БЗП.

3. Результаты экспериментального исследования

Базисом для экспериментального исследования предложенного способа выбран оптимизированный по стоимости привод насосной станции мобильной подъемно-транспортной платформы с трехфазным синхронным реактивным двигателем номинальной мощностью около 3.0 кВт. Регуляторы потокосцепления и момента двигателя – релейные, причем для большей устойчивости привода в релейные характеристики регуляторов введена зона нечувствительности [1–3].

Для анализа динамических характеристик и свойств привода была разработана прецизионная модульная имитационная модель привода в среде моделирования MATLAB/Simulink. Причем для связи силовой части привода с микропроцессорной системой управления использован интерфейс на базе блока S-Function [12, 13] с фиксированным шагом «обработки», длительность интерфейса которого строго соответствует длительности контроллерного цикла управления приводом. Такое построение модели позволило без изменений перенести программный продукт системы микропроцессорного управления привода (ANSIC-Code) в оболочку S-Function и воспользоваться компилятором MinGW-w64. Сертифицированный фирмой Math Works создан прецизионный и «высоко-

скоростной» объектный модуль с расширением * .mexw64. Модульный принцип значительно упростил структуру модели в целом. Компиляция C-Code обеспечила не только высокую скорость и точность моделирования, но и селективность алгоритмов управления без каких-либо изменений основной части модели.

На рис. 1. представлена имитационная модель электропривода, позволяющая за счет переключения алгоритмов управления преобразователем в S-Function сравнивать координаты привода со следующими способами коммутации преобразователем: БЗП в приводе с классическим ПУМ, ШИМ в приводе с ПУМ и предложенный гибридный способ.

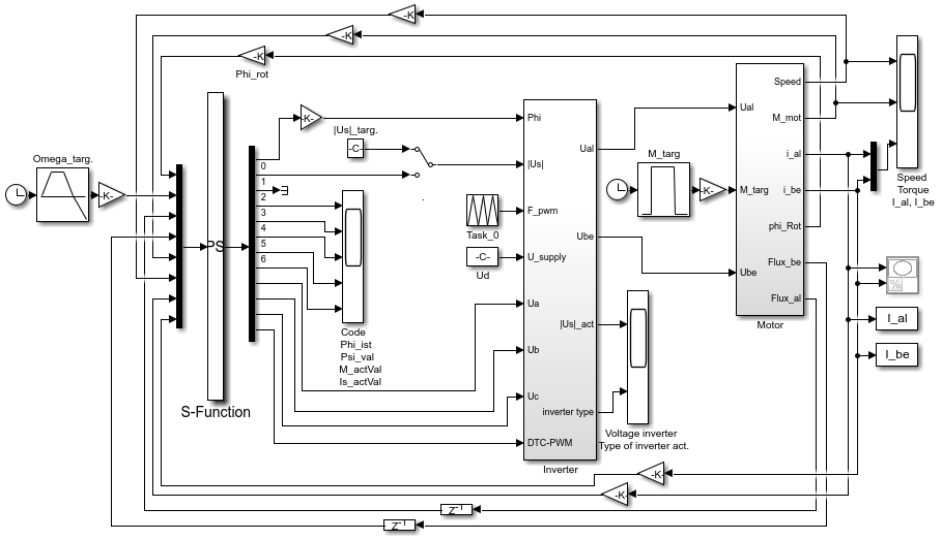


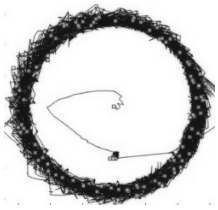
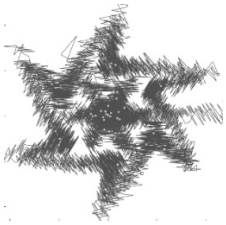
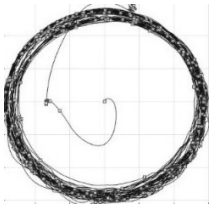
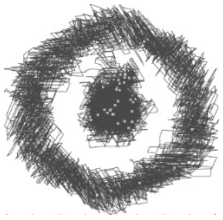
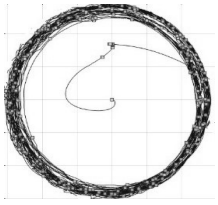
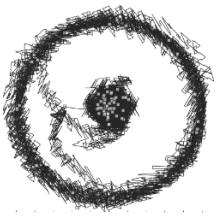
Рис. 1. – Имитационная модель электропривода с трехфазным синхронным реактивным двигателем

*Fig. 1.*Simulation model of an electric drive with a three-phase synchronous reluctance motor

Эффективность гибридного способа управления преобразователем предлагается оценить по разнице частот переключения релейного регулятора потокосцепления (РРП) в классическом приводе с ПУМ и в приводе с ГСП. В случае уменьшения частоты РРП в приводе с ГСП появляется возможность редуцирования зоны нечувствительности регулятора и тем самым – уменьшения амплитуды пульсаций потокосцепления. Если же зону нечувствительности РРП оставить без изменения, то при редуцированной частоте за счет более пологих градиентов потокосцепления пульсации момента двигателя становятся более «гладкими» [2, 11]. Второй ожидаемый положительный эффект в приводе с ГСП это улучшенный спектральный состав тока статора двигателя, за счет формирования более точного углового положения вектора напряжения силового преобразователя, способного приблизить ток двигателя к синусоидальному. Так как частота переключения релейного регулятора в различных режимах работы привода с ПУМ непостоянна [1, 11], интересна оценка усредненной частоты в контуре РРП для всех сравниваемых способов в случае идентичной тахограммы электропривода, состоящей из участков ускорения двигателя до номинальной скорости, реверса и торможения.

Некоторые результаты моделирования привода с ПУМ приведены в таблице.

Результаты моделирования электропривода с ПУМ
Results of simulation of an electric drive with DMC

Система управления приводом	Частота переключения РРП, Гц	Форма потокосцепления двигателя в неподвижной системе координат привода	Форма тока статора двигателя в неподвижной системе координат привода
Классический привод с ПУМ (базовый закон коммутации преобразователя)	$f_{P\_\text{ПУМ}} = 4379$		
Привод с ПУМ и предложенным гибридным управлением при $\Theta_{ref} = \pi/10$	$f_{P\_\text{ГСП}} = 3762$		
Привод с ПУМ и ШИМ в преобразователе	$f_{P\_\text{ШИМ}} = 3406$		

Из экспериментальных данных (см. таблицу) следует, что при выбранном угле $\Theta_{ref} = \pi/10$ для ПУМ с ГСП частота в контуре регулирования потокосцепления уменьшилась более чем на 14 % в сравнении с приводом, реализующим классический вариант ПУМ и «только» на 9 % больше, чем в приводе с ПУМ, использующем ШИМ в силовом преобразователе.

При разработке привода с ГСП может встать вопрос о выборе некоторого, отличного от рассмотренного, угла Θ_{ref}. Для этого на рис. 2 представлена кривая изменения частоты переключения РРП в приводе с ГСП в зависимости от величины выбранного опорного угла в диапазоне $\Theta_{ref} = [0, \pi/10]$, приведенного к частоте переключения РРП в классическом ПУМ.

Результаты исследования подтверждают, что пульсации потокосцепления и тока статора двигателя в приводе с ГСП имеют меньшие градиенты, что позволяет «двойным эффектом» оптимизировать пульсации момента. Кроме того, дальнейшая оптимизация пульсаций момента возможна за счет уменьшения зоны нечувствительности РРП, при котором частота в контуре регулирования потокосцепления была бы равна частоте в приводе с классическим ПУМ.

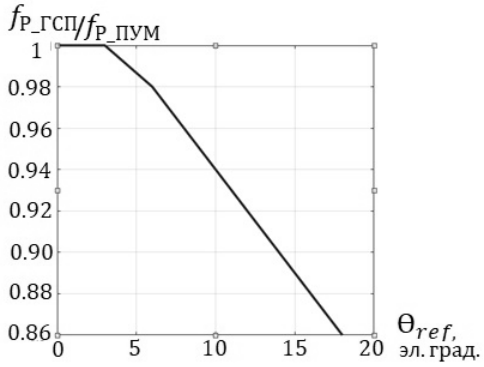


Рис. 2 – Зависимость нормированной частоты переключения релейного регулятора потокосцепления в приводе с ГСП от величины выбранного опорного угла Θ_{ref}

Fig. 2. Dependence of normalized switching frequency of the relay flux linkage controller in the electric drive with HCM on the value of the selected reference angle Θ_{ref}

ЛИТЕРАТУРА

1. **Шрейнер Р.Т.** Математическое моделирование электроприводов переменного тока с полупроводниковыми преобразователями частоты. – Екатеринбург: УРО РАН, 2000. – 654 с.
2. **Schroeder D.** Elektrische antriebe, regelung von antriebssystemen. – Berlin: Springer-Verlag, 2009. – 1336 p. – DOI: 10.1007/978-3-540-89613.
3. **Crastan V.** Elektrische Energieversorgung 1. – Berlin: Springer-Verlag, 2015. – DOI: 10.1007/978-3-662-45985-0.
4. **Карасев А.В., Смирнов В.М.** Математическая модель прямого управления моментом асинхронного привода // Электроника и информационные технологии. – 2009. – Спец. вып. (6). – URL: http://fetmag.mrsu.ru/2009-2/pdf/direct_torque_control.pdf (дата обращения: 26.05.2021).
5. **Симаков Г.М.** Системы автоматического управления электроприводов металлорежущих станков. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2007. – 299 с.
6. **Merzoug M.S., Naceri F.** Comparison of field-oriented control and direct torque control for permanent magnet synchronous motor (PMSM) // International Journal of Electrical and Computer Engineering. – 2008. – Vol. 2, N 9. – P. 1797–1802.
7. **Усольцев А.А.** Частотное управление асинхронными двигателями. – СПб.: СПбГУ ИТМО, 2006. – 94 с.
8. Flat-top space-vector modulation implemented on a fixed-point DSP / N.S. Preda, I.I. Incze, M. Imecs, C. Szabo // 2009 5th International Symposium on Applied Computational Intelligence and Informatics. – Timisoara, Romania, 2009. – P. 153–158. – DOI: 10.1109/SACI. 2009.5136231.
9. Predictive current trajectory control for PMSM at voltage limit / G. Pei, L. Li, X. Gao, J. Liu, R. Kennel // IEEE Access. – 2020. – Vol. 8. – P. 1670–1679. – DOI: 10.1109/ACCESS. 2019.2962742.
10. **Гуляев И.В., Тутаев Г.М.** Системы векторного управления электроприводом на основе асинхронизированного вентильного двигателя. – Саранск: Изд-во Мордов. ун-та, 2010. – 200 с.
11. Сравнительный анализ векторного управления и прямого управления моментом синхронного электродвигателя с постоянными магнитами / А.Э.В.А. Рефки, А.С. Каракулов, Ю.Н. Дементьев, С.Н. Кладиев // Известия Томского политехнического университета. – 2011. – Т. 319, № 4. – С. 93–99.

12. MATLAB, Simulink, Stateflow: Grundlagen, Toolboxen, Beispiele / A. Angermann, M. Beuschel, M. Rau, U. Wohlfarth. – 9. Aufl. – Berlin ; Boston : De Gruyter Oldenbourg, 2017. – 561 p.
13. **Черных И.В.** Simulink: среда создания инженерных приложений. – М.: Диалог-МИФИ, 2003. – 496 с.

OPTIMIZATION OF TORQUE RIPPLES IN DIRECT TORQUE CONTROL DRIVES

Kromm A.A.[1], Simakov G.M.[2],Topovsky V.V.[2]
[1]*Linde Material Handling GmbH, Aschaffenburg, Germany*
[2]*Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia*

The article discusses the features of the synthesis of a hybrid method for commutation of a three-phase inverter in a classic version of drives with direct torque control (DTC), which involves the use of relay characteristics in the flux- and torque control blocks. It is proved that the output voltage of a converter based on a B6-inverter formed by only six basic vectors (excluding the zero vector) limits further optimization of flux- and torque ripples in the electrical motors. It has also been proven that with the classical drives with direct torque control, the torque ripples on the motor shaft are indeed higher than in systems with pulse width modulation. An analysis of the method was carried out which could allow reducing the amplitude of the torque ripples when drives with direct torque control are applied for motors supplied with only basic vectors of the inverter due to the modified (hybrid) method of inverter commutation,. The conditions under which the hybrid control method of the inverter is really capable of reducing the amplitude of the motor flux- and torque ripples are considered. Based on the analysis of the proposed solution, the law of hybrid control of the inverter is presented by means of the formation of additional vectors of its output voltage via basic vectors of the inverter. The advantages of the method include the simplicity of drive control under development or in the existing drive control system, the implementation of which is carried out exclusively by a software product. With the absence of iterative methods of mathematics, the resources of microprocessor control units are reduced, which makes this method even more attractive in low-budget electrical drives that do not claim to be "high-end" of control blocks. The oscillograms are shown of a flux and current of motor with direct torque control motor application only with six base vectors of the output voltage of a semiconductor inverter and a drive with direct torque control bythea hybrid method with additional voltage vectors based on the basic vectors of the inverter.

Keywords: Direct torque control, flux- and torque control loop, torque ripples optimization, inverter with hybrid control, features of hybrid control, activation conditions, oscillograms of drive.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-41-53

REFERENCES

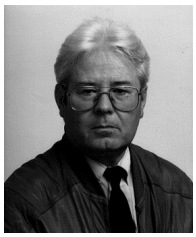
1. Shreiner R.T. *Matematicheskoe modelirovanie elektroprivodov peremennogo toka s poluprovodnikovymi preobrazovatelyami chastoty* [Mathematical modeling of alternating current electric drives with semiconductor frequency converters]. Ekaterinburg, URO RAN Publ., 2000. 654 p.
2. Schroeder D. *Elektrische antriebe, regelung von antriebssystemen*. Berlin, Springer-Verlag, 2009. 1336 p. DOI: 10.1007/978-3-540-89613.
3. Crastan V. *Elektrische Energieversorgung 1*. Berlin, Springer-Verlag, 2015. DOI: 10.1007/978-3-662-45985-0.
4. Karasev A.V., Smirnov V.M. Matematicheskaya model' pryamogo upravleniya momentom asinkhronnogo privoda [Mathematical model of direct torque control of an induction motor drive]. *Elektronika i informatsionnye tekhnologii = Electronics and information technologies*, 2009, Spec. iss. (6). Available at: http://fetmag.mrsu.ru/2009-2/pdf/direct_torque_control.pdf (accessed 26.05.2021).

5. Simakov G.M. *Sistemy avtomaticheskogo upravleniya elektroprivodov metallorezhushchikh stankov* [Automatic control systems for electric drives of metal-cutting machines]. Novosibirsk, NSTU Publ., 2007. 299 p.
6. Merzoug M.S., Naceri F. Comparison of field-oriented control and direct torque control for permanent magnet synchronous motor (PMSM). *International Journal of Electrical and Computer Engineering*, 2008, vol. 2, no. 9, pp. 1797–1802.
7. Usol'tsev A.A. *Chastotnoe upravlenie asinkhronnymi dvigatelyami* [Frequency control of induction motors]. St. Petersburg, SPbGU ITMO Publ., 2006. 94 p.
8. Preda N.S., Incze I.I., Imecs M., Szabo C. Flat-top space-vector modulation implemented on a fixed-point DSP. *2009 5th International Symposium on Applied Computational Intelligence and Informatics*, Timisoara, Romania, 2009, pp. 153–158. DOI: 10.1109/SACI. 2009.5136231.
9. Pei G., Li L., Gao X., Liu J., Kennel R. Predictive current trajectory control for PMSM at voltage limit. *IEEE Access*, 2020, vol. 8, pp. 1670–1679. DOI: 10.1109/ACCESS. 2019.2962742.
10. Gulyaev I.V., Tutaev G.M. *Sistemy vektornogo upravleniya elektroprivodom na osnove asinkhronizirovannogo ventil'nogo dvigatelya* [Vector control systems for an electric drive with asynchronized BLDC motor]. Saransk, Mordovia State University Publ., 2010. 200 p.
11. Refki A.E.V.A., Karakulov A.S., Dement'ev Yu.N., Kladiev S.N. Sravnitel'nyi analiz vektornogo upravleniya i pryamogo upravleniya momentom sinkhronnogo elektrodvigatelya s postoyannymi magnitami [Comparative analysis of vector control and direct torque control of a permanent magnet synchronous motor]. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta = Bulletin of the Tomsk Polytechnic University*, 2011, vol. 319, no. 4, pp. 93–99.
12. Angermann A., Beuschel M., Rau M., Wohlfarth U. *MATLAB, Simulink, Stateflow: Grundlagen, Toolboxen, Beispiele.* Berlin, Boston, De Gruyter Oldenbourg, 2017. 561 p.
13. Chernykh I.V. *Simulink: sreda sozdaniya inzhenernykh prilozhenii* [Simulink – environment for creating engineering applications]. Moscow, Dialog-MIFI Publ., 2003. 496 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Кромм Андрей Артурович – родился в 1960 году, канд. техн. наук, инженер высшей квалификации в компании Linde Material Handling, GmbH, Ашаффенбург, Германия. Область научных интересов: автоматизированный электропривод постоянного и переменного тока с переменной структурой. Опубликовано более 15 научных работ. (Адрес: 630099, Россия, г. Новосибирск, Депутатская 60/39. E-mail: galand@gmx.net).

Kromm Andrey Arturovich (b. 1960), Candidate of Scienses (Eng.), professor, highly qualified engineer at Linde Material Handling, GmbH, Aschaffenburg, Germany. His research interests are currently focused on automated electric drive with a variable structure. He is an the author of more than 15 scientific publications. (Address: 60/39, Deputatskaya Street., Novosibirsk, 630099, Russia. E-mail: galand@gmx.net).



Симаков Геннадий Михайлович – родился в 1942 году, д-р техн. наук, профессор, профессор кафедры ЭАПУ, НГТУ. Область научных интересов: автоматизация систем автоматизированного электропривода. Опубликовано более 150 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: Simakov44_86@mail.ru).

Simakov Gennady Mikhailovich (b. 1942). Doctor of Sciences (Eng.), professor, professor at the Electric Drives and Automation Department, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on automation of control systems of electric drives. He is the author of more than 150 scientific publications. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: Simakov44_86@mail.ru).

Топовский Валерий Валерьевич – родился в 1992 году, ст. преподаватель кафедры ЭАПУ, НГТУ. Область научных интересов: алгоритмы управления электроприводов. Опубликовано более 10 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: topovskij.2013@corp.nstu.ru).

Topovsky Valery Valerievich (b. 1992), assistant professor at the Electric Drives and Automation Department, Novosibirsk State Technical University. His research interests are currently focused on control algorithms of electric drives. He is the author of more than 10 scientific publications. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: topovskij.2013@corp.nstu.ru).

Статья поступила 29 декабря 2020 г.
Received December 29, 2020

To Reference:

Kromm A.A., Simakov G.M., Topovsky V.V. Optimizatsiya pul'satsii momenta dvigatelya v elektroprivode s pryamym upravleniem [Optimization of torque ripples in direct torque control drives]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2021, no. 1 (50), pp. 41–53. DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-41-53.

ДОКЛАДЫ АН ВШ РФ
2021 январь–март № 1 (50)

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 004.023

ИССЛЕДОВАНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ ВОРОНЬЕГО АЛГОРИТМА ПОИСКА ДЛЯ ЗАДАЧ ОПТИМИЗАЦИИ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ПОКРЫТИЯ

Г.Н. Тырин, В.Д. Фроловский
Новосибирский государственный технический университет

Задача геометрического покрытия является частным случаем задачи оптимального проектирования и принадлежит к классу задач «раскроя и упаковки». Задача заключается в том, что требуется расположить некоторые геометрические объекты на покрываемой поверхности таким образом, чтобы вся поверхность была покрыта целиком. Сложность рассматриваемых задач обусловлена их принадлежностью к классу *NP*-трудных задач, что исключает возможность их решения точными методами и требует построения приближенных оптимизационных методов и алгоритмов. В данной статье рассматривается задача геометрического покрытия области кругами из заданного набора радиусов. Для решения задачи геометрического покрытия используется метод покрытия гексагональной сеткой с оптимизацией метаэвристическим алгоритмом. В качестве такого алгоритма выступает вороний алгоритм поиска, который является относительно новым метаэвристическим алгоритмом, основанным на интеллектуальном поведении ворон в стае. Вороний алгоритм поиска включает в себя два регулирующих параметра: вероятность осведомленности и длина полета. Для исследования метода решения и проверки эффективности была смоделирована задача на основе реального проекта систем автоматического полива, а также приведены результаты экспериментов с различными значениями регулирующих параметров.

Ключевые слова: задача оптимизации, геометрическое покрытие, гексагональная сетка, метаэвристический алгоритм, вороний алгоритм поиска.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-54-61

Введение

Задача геометрического покрытия относится к классу задач «раскроя и упаковки». Научное начало исследованию данной проблематики было заложено Л.В. Канторовичем, В. А. Залгаллером, работа которых была опубликована в 1951 году и переиздана в 2012 [1]. Развитие методов раскроя-упаковки получило в работах И.В. Романовского, Э.А. Мухачевой, Ю.Г. Стояна и других. Актуальность задачи геометрического покрытия обусловлена ее принадлежностью к классу *NP*-трудных задач с дискретно-непрерывной структурой. Область применения описанной задачи велика и включает системы безопасности, противопожарные системы, агротехнические системы полива, воздушное и космическое наблюдение, химию, разработку компьютерных игр и прочие. Все известные точные методы для решения подобных задач имеют экспоненциальную вычислительную сложность. В результате возникает проблема разработки приближенных и эвристических методов, позволяющих находить субоптимальные решения. Метаэвристические алгоритмы объединяют один или более эвристических методов и основаны на поисковой стратегии высокого уровня. Использование метаэвристических алгоритмов является эффективным решением данной проблемы [2, 3].

На сегодняшний день задача геометрического покрытия все еще остается малоизученной. С каждым годом интерес к данной задаче возрастает с появлением новых алгоритмов, призванных эффективно решать данный класс задач и находить оптимальное решение с минимальными временными затратами.

1. Постановка задачи исследования

Рассматривается задача геометрического покрытия, математическая постановка которой формулируется следующим образом. Дана область A ширины W и длины L. На области A определено множество точек $P = \{P_1, P_2, \ldots, P_n\}$, где n – количество точек, $P_i = \left\langle p_x^i, p_y^i \right\rangle$, $i = 1, \ldots, n$, p_x^i и p_y^i – координаты точки. Множество точек P формирует на области A запретные участки. Требуется покрыть область $A \setminus P$ наименьшим числом кругов из заданного множества радиусов $\{r_1, \ldots, r_n\}$. Решение будет являться допустимым, если вся область $A \setminus P$ покрыта кругами, центры кругов располагаются внутри области A, но ни один центр круга не располагается внутри множества точек P.

2. Методы решения

Для решения задачи покрытия используется метод покрытия гексагональной сеткой с оптимизацией метаэвристическим алгоритмом. Вычисление решения происходит в три шага.

1. Построение гексагональной сетки кругами с максимальным радиусом из множества $\{r_1, \ldots, r_n\}$ без учета запретных участков множества P.

2. Определение и удаление кругов, если координаты центра круга находятся в запретных участках множества P.

3. Покрытие случайным образом оставшихся участков области A кругами с радиусами из множества $\{r_1, \ldots, r_n\}$, использование подходящих кругов в порядке убывания их радиусов и нахождение оптимального варианта покрытия при помощи метаэвристики.

Также в решении используется регулируемый коэффициент пересечений кругов $coef$, где с помощью расстояния между центрами кругов и их радиусами определяется степень их пересечения. Допустимое расстояние между кругами определяется неравенством (1)

$$\sqrt{(X_1 - X_2)^2 + (Y_1 - Y_2)^2} \le \frac{(R_1 + R_2)}{coef}, \tag{1}$$

где X, Y – координаты кругов; R – их радиусы.

В экспериментах значение коэффициента пересечений равно 1,7. Данное значение было подобрано таким образом, чтобы соблюсти баланс между числом используемых кругов в покрытии и общей занимаемой площадью покрытия.

Поскольку задача геометрического покрытия является *NP*-трудной задачей, для нахождения оптимального решения могут использоваться метаэвристические алгоритмы. Одним из таких алгоритмов является crow search algorithm (CSA), который был первоначально предложен Askarzadeh [4]. Далее в статье будет использоваться русский вариант названия «вороний алгоритм поиска». Вороний алгоритм поиска (ВАП) имитирует социальный интеллект стаи ворон и их процесс сбора пищи и в конечном итоге может использоваться как альтернативный метод для решения сложных инженерных задач оптимизации. Это относительно новый и малоизученный метаэвристический алгоритм, который имеет некоторую схожесть с методом роя частиц (МРЧ), но при этом обладает некоторыми преимуществами по сравнению с остальными метаэвристическими алгоритмами.

В природе вороны имеют тенденцию проникать в пищевые запасы других видов, включая других ворон в стае. Фактически, каждая ворона пытается скрыть свою избыточную пищу в укрытии, чтобы достать спрятанную пищу при необходимости. Другие члены стаи, у которых есть свои собственные места для хране-

ния пищи, пытаются следить друг за другом, чтобы найти чужие укрытия и разграбить запасы. Тем не менее если ворона почувствует, что ее преследуют другие члены стаи, чтобы сбросить слежку и обмануть грабителя, она маневрирует своим путем в ложное укрытие [5]. Из этого следуют основные принципы ВАП, в которых каждая ворона исследует пространство решений для укрытий с лучшими продовольственными ресурсами, т. е. глобальные оптимумы с точки зрения оптимизации. Таким образом, движение каждой вороны представлено двумя основными особенностями.

1. Обнаружение мест укрытия других членов стаи.
2. Защита своих собственных укрытий.

Так как любой эффективный алгоритм оптимизации должен быть совместим с произвольными размерами и каждый произвольный размер представляет собой переменную решения, для пространства поиска предполагается d-мерная среда. Первоначально предполагается, что N ворон занимают позицию в d-мерном пространстве случайным образом. Положение вороны i на итерации t в пространстве поиска представлено x_i^t, которое фактически является допустимым массивом переменных решения. Кроме того, каждая ворона может запоминать местоположение наиболее подходящего места укрытия. На итерации t позиция укрытия вороны i представлена m_i^t, являющейся наилучшей позицией, которую пока заметила ворона.

В стандартном ВАП стая ворон распространяется и ведет поиск по всему пространству решений для поиска идеальных мест укрытия. Также эффективный метаэвристический алгоритм должен обеспечивать хороший баланс между диверсификацией и интенсификацией. В ВАП интенсификация и диверсификация в основном контролируются двумя параметрами: длина полета fl и вероятность осведомленности AP. Уменьшая вероятность осведомленности, вероятность обнаружения мест укрытия членами вороньей стаи будет увеличиваться. В результате ВАП имеет тенденцию фокусировать поиск по окрестностям укрытий. Таким образом, можно предположить, что меньшие значения AP будут усиливать аспект интенсификации. С другой стороны, увеличивая AP, стая ворон, скорее всего, будет искать пространство для принятия решений случайным образом, поскольку такое действие уменьшит вероятность обнаружения настоящих укрытий со стороны грабителей. В результате большее значение AP усилило бы аспект диверсификации.

Для эффективной реализации метаэвристического алгоритма также необходимо правильно настроить параметры алгоритма. Однако установка параметров – это трудоемкий процесс. Таким образом, алгоритмы с ограниченным числом параметров легче реализовать в различных задачах оптимизации. Вышеупомянутое относится к одному из основных преимуществ ВАП по сравнению со многими традиционными метаэвристическими алгоритмами. Для ВАП требуется только два основных параметра, требующих настройки: длина полета и вероятность осведомленности. После настройки параметров также устанавливаются размер стаи N и максимальное количество итераций T.

Первый шаг – разместить случайным образом N ворон в d-мерном пространстве решений. Оптимизация достигается путем поиска оптимального значения начального положения (x, y) для построения. Пространство решений ВАП представляет собой квадрат со стороной $\frac{r_{\max}}{2}$, где $r_{\max}$ – максимальный радиус круга из множества $\{r_1, \ldots, r_n\}$.

Так как вороны не имеют опыта на начальной итерации, предполагается, что они спрятали свои запасы в своих начальных положениях. После первого шага алгоритм перемещает каждую ворону, к примеру ворону i, следующим образом:

ворона i возьмет на себя роль грабителя для случайно выбранного члена стаи, вороны j. Используя уравнение (2) вычисляется новое положение вороны i.

$$x_i^{(t+1)} = \begin{cases} (x_i^t + r_i \cdot fl_i^t \cdot \left(m_j^t - x_i^t\right), \text{если } r_j \geq AP_i^t, \\ \text{иначе, движение в случайную позицию,} \end{cases} \quad (2)$$

где AP_i^t – вероятность осведомленности; fl_i^t – длина полета; r_i, r_j – случайные числа в диапазоне [0, 1]; m_j^t – локально лучшее решение j-й вороны.

Чтобы избежать невозможных решений, в стандартном ВАП предлагается проверить возможность нового местоположения в пространстве принятия решений. Если в последнем процессе создается невозможное место, ворона должна оставаться неподвижной. Альтернативой такой процедуре является выполнение функции штрафа за невозможные решения. В любом случае ворона обновляет свое локальное решение по уравнению (3):

$$m_i^{(t+1)} = \begin{cases} x_i^t, \text{если } f\left(x_i^t\right) \text{ лучше, чем } f\left(m_i^t\right), \\ m_i^t, \text{иначе.} \end{cases} \quad (3)$$

Эти шаги повторяются до тех пор, пока не будет выполнен критерий завершения. В этот момент наилучшее положение, полученное членами стаи, указывается как оптимальное решение.

Для исследования метода и проверки эффективности была смоделирована задача на основе реального проекта систем автоматического полива Артек [6]. Основным критерием эффективности алгоритма служит результирующее число кругов. Так же, как дополнительный критерий, рассматривается их общая площадь на покрываемой области A. Критерием останова алгоритма для ВАП служит достижение заданного максимального числа итераций. На рис. 1 показан пример решения задачи до и после оптимизации алгоритмом ВАП.

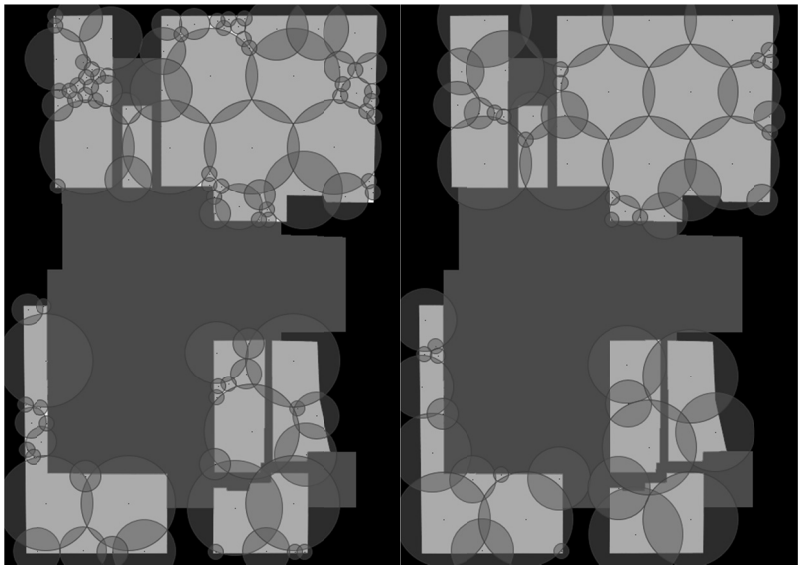


Рис. 1 – Пример решения до и после оптимизации с использованием ВАП

Fig. 1 – An example of solution before and after optimization

В экспериментах, каждый из которых проводился по пять раз для получения средних результатов, использовался метод покрытия гексагональной сеткой с последующим покрытием пустых участков.

Для покрытия области использовалось множество кругов с радиусами $\{10, 20, 30, 40, 50, 60\}$. Значение коэффициента пересечений $coef = 1,7$. В табл. 1 и на рис. 2 представлены результаты покрытия без оптимизации ВАП.

Таблица 1 / Table 1

Результаты решения задачи без оптимизации ВАП

Results of solving the problem without CSA optimization

Номер эксперимента	Количество кругов	Площадь кругов
1	89	298137
2	89	277402
3	80	306933
4	78	289340
5	73	312274
Среднее	81,8	296817,2

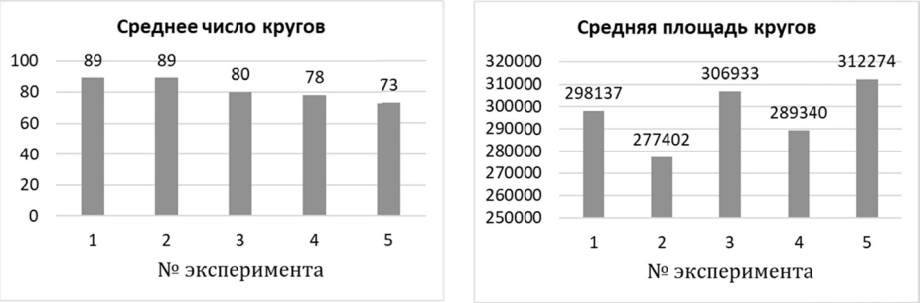


Рис. 2 – Результаты решения задачи без оптимизации ВАП

Fig. 2 – Results of solving the problem without CSA optimization

Дальнейшие эксперименты выполнялись с оптимизацией алгоритмом ВАП. Размер стаи для ВАП равен 10, а число итераций 20.

В табл. 2 и на рис. 3 представлены результаты работы алгоритма при различных значениях коэффициента *AP*. Для эксперимента значение длины полета $fl = 1,2$.

Таблица 2 / Table 2

Результаты решения задачи при различных значениях *AP*

Results of solving the problem with different values of *AP*

AP	Число кругов (K_1)	Улучшение (K_1)	Площадь кругов (K_2)	Улучшение (K_2)
0,1	62,2	23,96 %	278345	6,22 %
0,3	60,6	25,92 %	278847	6,05 %
0,5	63,2	22,74 %	272941	8,04 %
0,7	63,8	22,00 %	269171	9,31 %
0,9	65,2	20,29 %	266972	10,06 %

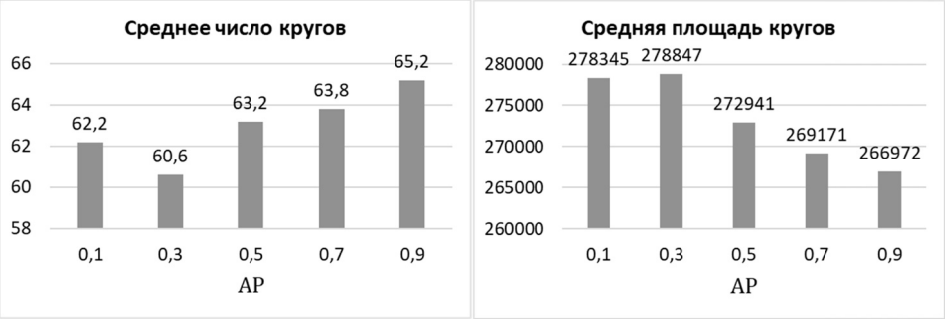


Рис. 3 – Результаты при различных значениях *AP* и *fl* = 1,2

Fig. 3 – Results with different values of *AP* и *fl* = 1,2

В табл. 3 и на рис. 4 представлены результаты работы алгоритма при различных значениях коэффициента *fl*. Значение *AP* было взято за 0,3 как лучшее значение по числу кругов из предыдущего эксперимента. По критериям K_1 и K_2 произведено сравнение со средними результатами экспериментов без оптимизации ВАП (табл. 1).

Таблица 3 / Table 3

Результаты решения задачи при различных значениях *fl* и *AP* = 0,3

Results of solving the problem with different values of *fl* and *AP* = 0,3

fl	Число кругов (K_1)	Улучшение (K_1)	Площадь кругов (K_2)	Улучшение (K_2)
0,3	60	26,65 %	270805	8,76 %
0,7	56,6	30,81 %	277025	6,67 %
1	61,2	25,18 %	273758	7,77 %
1,3	60,6	25,92 %	275077	7,32 %
1,7	59	27,87 %	276082	6,99 %

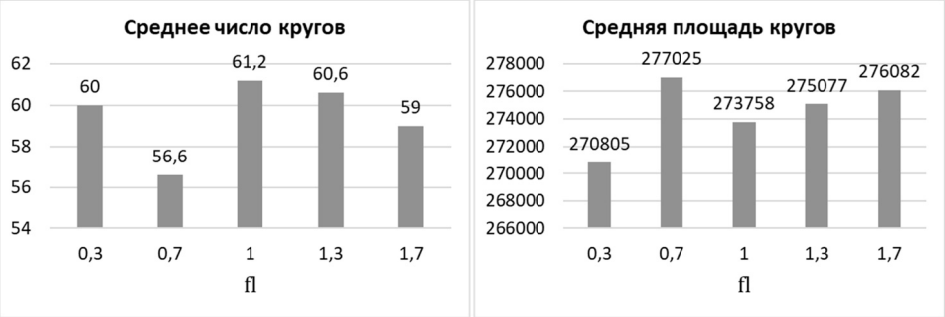


Рис. 4 – Результаты при различных значениях *fl* и *AP* = 0,3

Fig. 4 – Results with different values of *fl* and *AP* = 0,3

Заключение

Для исследования ВАП смоделирована задача на основе реального проекта систем автоматического полива Артек. При решении задачи использовался метод покрытия гексагональной сеткой. Сначала эксперименты были проведены без оптимизации, после чего с оптимизацией алгоритмом ВАП. Эксперименты с оптимизацией ВАП проводились при различных значениях коэффициентов *AP* и *fl*.

Проведенные исследования и результаты вычислительных экспериментов показали, что ВАП по числу кругов улучшил результаты по сравнению с неоптимизированным покрытием в среднем на 30,81% при $AP = 0{,}3$ и $fl = 0{,}7$. В остальных случаях, при различных значениях AP и fl, ВАП показывает улучшение до 27,87 %. На сегодняшний день существует не так много работ с применением ВАП для решения задач геометрического покрытия, поэтому может быть целесообразным проведение дальнейших исследований эффективности алгоритма в решении задач геометрического покрытия, более детальное изучение воздействия коэффициентов AP и fl на результаты для подбора наиболее оптимальной комбинации, а также нахождение способов модификации ВАП для увеличения его эффективности, к примеру: создание гибридных алгоритмов, алгоритмов с самообучением и т. д.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Канторович Л.В., Заллгаллер В.А.** Рациональный раскрой промышленных материалов. – Изд. 3-е, испр. и доп. – СПб.: Невский диалект, 2012. – 304 с.
2. **Фроловский В.Д., Забелин Л.Ю., Забелин С.Л.** Применение бионических моделей и методов для решения оптимизационных задач проектирования агротехнических систем полива // Вестник СибГУТИ. – 2018. – № 4 (44). – С. 20–29.
3. **Телицкий С.В., Филиппова А.С.** Комплексный подход к решению задачи покрытия области заготовками неопределенных размеров // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика. Телекоммуникации. Управление. – 2012. – Т. 2 (145). – С. 61–67.
4. **Askarzadeh A.** A novel metaheuristic method for solving constrained engineering optimization problems: crow search algorithm // Computers and Structures. – 2016. – Vol. 169. – P. 1–12.
5. **Clayton N., Emery N.** Corvid cognition // Current Biology. – 2005. – Vol. 15 (3). – P. 80–81.
6. Аквабаланс. Проекты 2018 года – Артек (вар. 1). – URL: https://www.aquabalance.ru/proekt2018-8/ (дата обращения: 26.05.2021).

RESEARCH AND APPLICATION OF THE CROW SEARCH ALGORITHM FOR GEOMETRIC COVERING OPTIMIZATION PROBLEMS

Tyrin G.N., Frolovsky V.D.
Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russia

The problem of geometric covering is a special case of the optimal design problem and belongs to the class of cutting and packing problems. The challenge is to position some geometric objects on the surface to be coated so that the entire surface is covered. The complexity of the problems under consideration is due to their belonging to the class of NP-hard problems, which excludes the possibility of solving them by exact methods and requires the development of approximate optimization methods and algorithms. This article discusses the problem of geometric covering of an area with circles from a given set of radii. To solve the problem of geometric covering, a hexagonal grid coverage method with optimization by a metaheuristic algorithm is used. The crow search algorithm is such an algorithm, which is a relatively new metaheuristic algorithm based on the intelligent behavior of crows in a flock. The crow search algorithm includes two control parameters: the awareness probability and the flight length. To study the solution method and check the efficiency, a problem was modeled on the basis of a real design of automatic irrigation systems, and the results of experiments with different values of control parameters were presented.

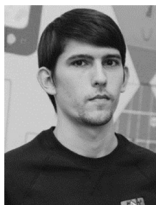
Keywords: optimization problem, geometric covering, hexagonal grid, metaheuristic algorithm, crow search algorithm.

DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-54-61

REFERENCES

1. Kantorovich L.V., Zallgaller V.A. *Ratsional'nyi raskroi promyshlennykh materialov* [Rational cutting of industrial materials]. 3rd. ed. St. Petersburg, Nevskii dialect Publ., 2012. 304 p.
2. Frolovsky V.D., Zabelin L.Yu., Zabelin S.L. Primenenie bionicheskikh modelei i metodov dlya resheniya optimizatsionnykh zadach proektirovaniya agrotekhnicheskikh sistem poliva [Application of bionic models and methods for solving optimization problems of designing agrotechnical irrigation systems design]. *Vestnik SibGUTI*, 2018, no. 4 (44), pp. 20–29.
3. Telitskii S.V., Filippova A.S. Kompleksnyi podkhod k resheniyu zadachi pokrytiya oblasti zagotovkami neopredelennykh razmerov [An integrated approach to solving the problem of covering an area with blanks of indefinite dimensions]. *Nauchno-tekhnicheskie vedomosti Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo politekhnicheskogo universiteta. Informatika. Telekommunikatsii. Upravlenie = St. Petersburg State Polytechnic University Journal. Computer science. Telecommunications and Control Systems*, 2012, vol. 2 (145), pp. 61–67.
4. Askarzadeh A. A novel metaheuristic method for solving constrained engineering optimization problems: Crow search algorithm. Computers & Structures, 2016, vol. 169, pp. 1–12.
5. Clayton N., Emery N. Corvid cognition. *Current Biology*, 2005, vol. 15 (3), pp. 80–81.
6. Aquabalance. Projects 2018 – Artek (option 1). (In Russian). Available at: https://www.aquabalance.ru/proekt2018-8/ (accessed 26.05.2021).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ



Тырин Григорий Николаевич – родился в 1994 году, аспирант кафедры автоматизированных систем управления Новосибирского государственного технического университета. Опубликовано семь научных работ. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: kron3110@mail.ru).

Tyrin Grigory Nikolaevich (b. 1994), a postgraduate student at the department of automated control systems in the Novosibirsk State Technical University. He has published 7 research papers. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: kron3110@mail.ru).

Фроловский Владимир Дмитриевич – родился в 1952 году, д-р техн. наук, профессор кафедры автоматизированных систем управления Новосибирского государственного технического университета. Область научных интересов: моделирование и автоматизация процессов геометрического проектирования. Опубликовано более 150 научных работ. (Адрес: 630073, Россия, г. Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20. E-mail: vdf-nstu@yandex.ru).

Frolovsky Vladimir Dmitrievich (b. 1952), Doctor of Sciences (Eng.), professor at the department of automated control systems in the Novosibirsk State Technical University. The field of his research includes modeling and automation of geometric design processes. (Address: 20, Karl Marx Av., Novosibirsk, 630073, Russia. E-mail: vdf-nstu@yandex.ru).

Статья поступила 19 февраля 2021 г.
Received 19 February 2021

To Reference:

Tyrin G.N., Frolovsky V.D. Issledovanie i primenenie voron'ego algoritma poiska dlya zadach optimizatsii geometricheskogo pokrytiya [Research and application of the crow search algorithm for geometric covering optimization problems]. *Doklady Akademii nauk vysshei shkoly Rossiiskoi Federatsii = Proceedings of the Russian higher school Academy of sciences*, 2021, no. 1 (50), pp. 54–61. DOI: 10.17212/1727-2769-2021-1-54-61.

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК
ВЫСШЕЙ ШКОЛЫ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Выпуск 1 (50) январь–март 2021

Выпускающий редактор *И.П. Бровановa*
Корректор *И.Е. Семенова*
Компьютерная верстка *Н.В. Гаврилова*

Налоговая льгота – Общероссийский классификатор продукции
Издание соответствует коду 95 2000 ОК 005-93 (ОКП)

Подписано в печать 30.06.2021. Выход в свет 08.07.2021. Бумага офсетная. Формат 70×108 1/16
Тираж 300 экз. Уч.-изд. л. 5,6. Печ. л. 4,0. Изд. № 101. Заказ № 630. Цена свободная

Отпечатано в типографии
Новосибирского государственного технического университета
630073, Новосибирск, пр. К. Маркса, 20

16+

Индекс журнала в Роспечати
82961