

результатов измерения, а также качественное выполнение уравнильных вычислений этих результатов [5].

Литература

1. Геодезия и маркшейдерия. /Под ред. В.Н. Попова, В.А. Букринского: учебник для вузов. 2-е изд.стер. – М.: изд.во «Горная книга» 2007. – 453 с.
2. Технический регламент «О производстве маркшейдерских работ» [Электронный ресурс]. – Режим доступа:

<http://www.geomarkservis.ru/indexs/doc/gost/general/mark%20regl.htm>, свободный.

3. Теория измерений. Учеб. пособие/ Т.И. Мурашкина, В.А. Мещеряков, Е.А. Бадеева и др. – М.:Высш.шк., 2007. – 151 с.: ил.
4. Основы уравнильных вычислений: Учеб. пособие для вузов. – М.: Недра, 1990. –240 с. :ил.
5. Применение маркшейдерии. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.trimble-ts635.ru/Mark>, свободный

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНТЕЗА ПОКРЫТИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНТЕЗА В ТВЕРДОЙ ФАЗЕ

Шампиева А.Т.

Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр–т Ленина, 30
E-mail: albina_shampiyeva@hotmail.com

Введение

Синтез в твердой фазе, обладает широкими возможностями для получения материалов различных типов. Использование энергии электронного луча (ЭЛ) зарекомендовало себя во многих областях, в том числе при термической обработке и нанесении покрытий. Комбинированный метод ЭЛ обработки материала [1, 2] с предварительно нанесенным слоем, в ходе которой осуществляется синтез покрытия, позволяет реализовать преимущества ЭЛ обработки и превращений в конденсированной фазе с целью получения покрытий с требуемыми свойствами.

Ниже предложена и исследуется математическая модель процесса синтеза покрытия системы $TiNi_3+Ti$ с превращениями в конденсированной фазе на основу из железа с использованием электронно-лучевого нагрева. Заметим, что в процессе синтеза покрытия на подложке редко происходит формирование соединения или переходной зоны между материалами. Для формирования переходной зоны требуется дополнительная термическая обработка. Но подложка, отнимающая тепло из зоны нагрева, может оказывать существенное влияние на режимы иницирования реакции, на режимы послойного распространения реакции в конденсированной фазе аналогично тому, как влияют на режимы превращения в подобных системах инертные включения; инертный стержень или соединяемые материалы.

Цель настоящей работы заключается в исследовании синтеза покрытия с учетом влияния полей напряжений и деформаций возникающих в процессе синтеза.

Математическая постановка

Предположим, что на тонкую пластину из железа тонким слоем нанесено покрытие из смеси $TiNi_3+Ti$. Перераспределение элементов по толщине пластины с покрытием в первом приближе-

нии можно не рассматривать, полагая, что это существенно более медленный процесс происходит после того, как произойдет синтез покрытия, т. е. на стадии остывания. Пластина свободна от действия внешних сил, то можно считать [3], что такая пластина находится в плоском напряженном состоянии. Предположим, что внешний источник энергии, перемещающийся по поверхности образца со скоростью V , таков, что нагрев поверхности в направлении, перпендикулярном направлению движения, можно считать равномерным. Указанные условия реализуются при использовании в качестве источника энергии сканирующего электронного луча, развернутого в линию, при условии, что ширина сканирования перекрывает ширину образца. Под воздействием внешнего источника энергии в покрытии происходит иницирование химических реакций. В этом случае мы приходим к одномерной постановке задачи [4], которая включает уравнение теплопроводности

$$c_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\lambda_{T,b} (\delta(k_{\lambda,T} - 1) + 1) \frac{\partial T}{\partial x_1} \right) - D(A - 3B) \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial t} - \sigma_0 \varepsilon_{\text{eff}} \left(\frac{T^4 - T_0^4}{h_c + h_b} + \frac{q_e(t, x_1)}{h_c + h_b} + W_{\text{eff}} \right);$$

и систему кинетических уравнений для системы $TiNi_3+Ti$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_1}{\partial t} &= -y_1 \varphi_1, & \frac{\partial y_2}{\partial t} &= -y_2 y_3 \varphi_2 - y_2 y_4 \varphi_3, \\ \frac{\partial y_3}{\partial t} &= 2y_1 \varphi_1 - y_2 y_3 \varphi_2, & \frac{\partial y_4}{\partial t} &= y_1 \varphi_1 - y_2 y_4 \varphi_3, \\ & & \frac{\partial y_5}{\partial t} &= y_2 y_4 \varphi_3, \end{aligned}$$

и уравнения для определения компоненты тензора напряжений и тензора деформаций, следующие из основных уравнений [10]

$$\sigma_{22} = \left(-\tilde{\varepsilon}^T + \left(\frac{4}{L_x} - \frac{6x_1}{L_x^2} \right) I_1 + \left(\frac{12x_1}{L_x^3} - \frac{6}{L_x^2} \right) I_3 \right) (A-B)^{-1} +$$

$$+ \left(-\tilde{\varepsilon}^{(1)} + \left(\frac{4}{L_x} - \frac{6x_1}{L_x^2} \right) I_2 + \left(\frac{12x_1}{L_x^3} - \frac{6}{L_x^2} \right) I_4 \right) (A-B)^{-1}$$

$$\varepsilon_{11} = -B\sigma_{22} + \tilde{\varepsilon}^T + \tilde{\varepsilon}^{(1)}$$

$$\varepsilon_{22} = (A-B)\sigma_{22} + \tilde{\varepsilon}^T + \tilde{\varepsilon}^{(1)}$$

$$\varepsilon_{33} = -B\sigma_{22} + \tilde{\varepsilon}^T + \tilde{\varepsilon}^{(1)},$$

В системе уравнений приняты следующие обозначения T – температура; $y_1=[TiNi_3]$, $y_2=[Ti]$, $y_3=[Ni]$, $y_4=[TiNi]$, $y_5=[Ti_2Ni]$ – мольные концентрации реагентов и продуктов; $\delta = h_c/(h_c + h_b)$; $1 - \delta = h_b/(h_c + h_b)$;

$$D = 3\alpha_{T,b}K_b(\delta(k_v k_\alpha - 1) + 1)T;$$

$$c_{eff} = c_b\rho_b(\delta(k_c - 1) + 1) + 3D\alpha_{T,b}[\delta(k_\alpha - 1) + 1];$$

W_{eff} – эффективный источник тепла вследствие химических реакций протекающих в покрытии и изменения объема; $\tilde{\varepsilon}^T = \alpha_{T,b}(T - T_0)[\delta(k_\alpha - 1) + 1]$;

$$\tilde{\varepsilon}^{(1)} = \delta \sum_{i=1}^5 \alpha_i (y_i - y_{i,0}); \quad A = \frac{1}{2\mu_b} \left(\delta \left(\frac{1}{k_\mu} - 1 \right) + 1 \right);$$

$$B = \frac{\lambda_b}{6\mu_b K_b} \left(\delta \left(\frac{k_\lambda}{k_\mu k_v} - 1 \right) + 1 \right); \quad k_{\lambda,T} = \lambda_{T,c}/\lambda_{T,b};$$

$k_c = c_c\rho_c/c_b\rho_b$; $k_v = K_c/K_b$; $k_\alpha = \alpha_{T,b}/\alpha_{T,c}$; $k_\lambda = \lambda_c/\lambda_b$; $k_\mu = \mu_c/\mu_b$; $k_p = \rho_c/\rho_b$; индекс "с" – относится к эффективным свойствам покрытия; индекс "b" – к эффективным свойствам подложки
Функции φ_v будут иметь вид

$$\varphi_v = k_v \exp\left(-\frac{E_{av}}{RT}\right) \exp(-m_v y) y^{-n_v}, \quad v = 1, 2, 3$$

где k_v , E_{av} – предэкспоненты и энергии активации реакций; $y = y_4 + y_5$ – концентрация образовавшегося продукта реакций; m_v, n_v – параметры торможения.

Суммарный источник тепла вследствие химических реакций W_{eff} в уравнении теплопроводности записывается следующим образом

$$W_{eff} = \delta W_1 - 3\delta D W_2 = \delta\rho_c \sum_{i=1}^5 \frac{h_i}{m_i} \frac{dy_i}{dt} - 3\delta D \sum_{i=1}^5 \alpha_i \frac{\partial y_i}{\partial t},$$

или с учетом кинетических уравнений

$$W_{eff} = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3,$$

где

$$\omega_1 = Q'_1 y_1 \varphi_1; \quad \omega_2 = Q'_2 y_2 y_3 \varphi_2; \quad \omega_3 = Q'_3 y_2 y_4 \varphi_3;$$

$$Q'_1 = \delta Q_1 - 3\delta D \Delta Q_1; \quad Q'_2 = \delta Q_2 - 3\delta D \Delta Q_2;$$

$$Q'_3 = \delta Q_3 - 3\delta D \Delta Q_3,$$

где $Q_{1,2,3}$ – теплоты химических реакций.

Величины $\Delta Q_{1,2,3}$ вычисляются по формулам

$$Q'_1 = -\alpha_{1,eff} + 2\alpha_{3,eff} + \alpha_{4,eff};$$

$$Q'_2 = -\alpha_{2,eff} + \alpha_{4,eff} - \alpha_{3,eff};$$

$$Q'_3 = -\alpha_{2,eff} - \alpha_{4,eff} + \alpha_{5,eff}.$$

В начальный момент времени имеем условия

$$t = 0: T(x,0) = T_0, \quad y_1 = y_{10}, \quad y_2 = y_{20},$$

$$y_3 = y_4 = y_5 = 0, \quad \sigma_{22} = 0, \quad \varepsilon_{11} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = 0.$$

Численное исследование модели

Термодинамические и физические параметры известны из эксперимента или вычислялись специальным образом. Задачу решали численно по неявной разностной схеме второго порядка аппроксимации по пространственным шагам и первого по времени с использованием линейной прогонки. На каждом шаге по времени первый этап заключается в решении уравнения теплопроводности. Второй этап – в решении уравнения кинетической задачи. Третий этап решения заключался в определении компонент тензора деформаций и напряжений, где интегралы вычислялись по методу трапеции.

На рисунке 1 показаны изменение температуры, компонент тензора напряжений и компонент тензора деформаций в сечении $x=5$ см при различных значениях плотности мощности потока. Видно, что увеличение мощности потока слабо отражается на максимуме на температурных кривых (рис. 1 а), но приводит к увеличению напряжений в сечении (рис. 1 б) и к появлению сжимающих деформаций (рис. 1 в-г).

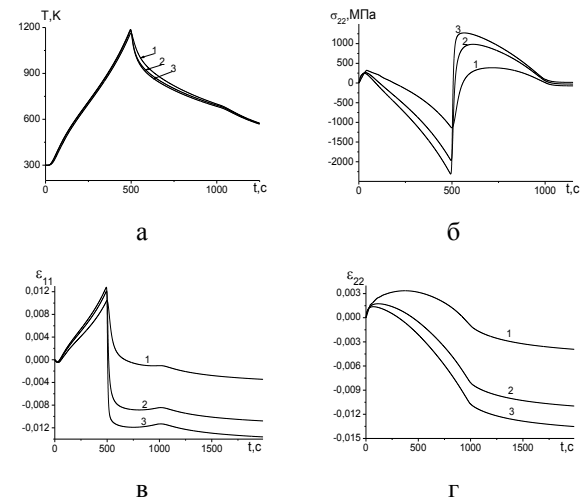


Рис. 1. Распределение температуры (а), компоненты тензора напряжений (б) и компонент тензора деформаций (в, г) во времени для связанной постановки задачи в сечении $x=5$ см при различных значениях плотности мощности потока 1. $q_0=1000$ Вт/см², 2. $q_0=2000$ Вт/см², 3. $q_0=3000$ Вт/см²

Если в модели не учитывать влияние напряжений и деформаций на процесс синтеза, то результирующие поля напряжений и деформаций в конце процесса синтеза оказываются практически однородными. Связанный характер различных

процессов приводит к тому, что в области образца, близкой к началу движения источника, и состав, и поле остаточных напряжений и деформаций оказываются существенно не однородными. При $x \rightarrow 0$, очевидно, напряжения нулевые. Подобные эффекты обнаруживаются и в экспериментальных исследованиях.

Результаты зависят от выбранной системы, условий синтеза и геометрических параметров.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (научный проект № 13-03-01179_a).

Литература

1. Sorokova S.N., Knyazeva A.G. // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2008. – Т. 42. – № 4. – С. 443-451.
2. Князева А.Г., Крюкова О.Н., Букрина Н.В., Сорокова С.Н. // Известия Томского политехнического университета. – 2010. – Т. 316. – № 2. – С. 93-101.
3. Боли Б., Уайнер Дж. Теория температурных напряжений: пер. с англ. – М.: Мир. 1964. 518 С.
4. Сорокова С.Н., Князева А.Г. Теоретические основы химической технологии. 2010. Т. 44. № 2. С. 184-197.

РЕАЛИЗАЦИЯ ИТЕРАЦИОННЫХ МЕТОДОВ ТОМОГРАФИЧЕСКОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ

Шкарин А.В., Шкарин Р.В., Цапко С.Г.
Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр-т Ленина, 30
E-mail: cupmathii@gmail.com

Введение

Современные научные исследования часто требуют применение томографии для изучения внутренней структуры объекта, так как она позволяет изучить внутреннюю структуру объекта без физического вмешательства. Однако, применение томографии подразумевает облучение образца, что может привести к его смерти или разрушению.

Особенно остро проблема смерти исследуемого объекта стоит в области биологии развития. В работе [1] продемонстрировано поведение клеток в живом эмбрионе гладкой шпорцевой лягушки (*Xenopus laevis*) на стадии гаструлы. Авторы показали миграцию клеток только на стадии гаструлы потому, что эмбрион быстро погибал под действием излучения.

Для снижения дозы облучения существует три подхода:

- снижение энергии пучка;
- снижение времени облучения;
- снижение числа проекций.

Первые два – ведут к недостаточному количеству зафиксированных фотонов, что, в свою очередь, приводит к увеличению шума на полученных данных. Последний подход ведет к недостатку измерений, что нарушает теорему Найквиста-Шеннона.

Ввиду того, что измерения сами по себе ничего не говорят о внутренней структуре сложного объекта, необходимо произвести воссоздание его трехмерной модели. Для выполнения данной задачи, в томографии существуют специальные методы, которые можно разделить на аналитические и итерационные. Итерационные методы, в свою очередь, подразделяются на статистические и алгебраические методы. Аналитические методы отличаются высокой скоростью реконструкции и высокими требованиями к качеству и полноте по-

лученных данных. Итерационные методы, напротив, имеют значительно меньшую скорость реконструкции и менее требовательны к качеству и полноте данных, ввиду возможности моделирования эксперимента и встраивания дополнительной информации в модель.

Очевидно, что в задачах, где требуется снизить дозу облучения образца, следует использовать итерационные методы реконструкции. Принимая во внимание тот факт, что количество данных, получаемых с одного эксперимента высоко (реконструкция может достигать 3 гигавокселей [2]), скорость реконструкции также играет важную роль. Таким образом, реализуемые методы должны максимально использовать доступные вычислительные ресурсы, такие как центральные процессоры (CPU) и графические процессоры (GPU).

Выявление требований к программному обеспечению

Все итерационные методы используют моделирование процесса проецирования для выбранной геометрии пучка, для этого существуют различные подходы, которые отличаются по точности, скорости и возможности распараллеливания вычислений. Кроме того, снижение дозы облучения одним из указанных выше способов ведет к недоопределенной задаче реконструкции, имеющей множество решений-кандидатов. Для выбора наилучшего решения в модель вводят дополнительную информацию (т.е. производят ее регуляризацию).

В качестве основной регуляризации, как правило, применяют подход, основанный на теории сжатых измерений [3] с использованием различных базисов (вейвлеты, полная вариация и пр.). Помимо этого, возможно применять дополнительные ограничения. К примеру, все пиксели рекон-