

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет магістерської

та аспірантської підготовки

Кафедра загальної та теоретичної фізики

МАГІСТЕРСЬКА КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на тему: **МАНІПУЛЮЄМЕ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ВИПРОМІНЮВАНЬ В
ШТУЧНО-НЕОДНОРІДНИХ СЕРЕДОВИЩАХ В ЗАДАЧАХ ЗАХИСТУ
ДОВКІЛЛЯ**

Виконав студент 2 курсу групи МЕР-64

спеціальності 8.04010605

«Радіоекологія»

Лазоренко Ольга Володимирівна

Керівник д.ф.-м.н., проф.

Герасимов Олег Іванович

Рецензент д.техн.н., проф.

Скалозубов Володимір Іванович

Одеса 2017 р.

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ОДЕСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ЕКОЛОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Інститут, факультет магістерської та аспірантської підготовки

Кафедра загальної та теоретичної фізики

Рівень вищої освіти магістр

Спеціальність 8.04010605 радіоекологія

(шифр і назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри загальної та
теоретичної фізики Герасимов О.І.

“ 1 ” 11 2016 р.

З А В Д А Н Н Я

НА МАГІСТЕРСЬКУ РОБОТУ СТУДЕНТУ

Лазоренко Ольги Володимирівни

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи : *Маніпулюєме розповсюдження випромінювань в штучно-неоднорідних середовищах в задачах захисту довкілля*

керівник роботи д.ф.-м.н., проф. Герасимов Олег Іванович

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом вищого навчального закладу від 14 вересня 2016р. №270С

2. Строк подання студентом роботи 01. 02. 2017 р.

3. Вихідні дані до роботи

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити) 1. Описати загальні характеристики штучно-неоднорідних середовищ 2. Висвітлити основні принципи розповсюдження випромінювань в модельних (низько-вимірних) штучно-неоднорідних середовищах. 3. Встановити функціональні зв'язки між параметрами, які описують розповсюдження випромінювань у штучно-неоднорідних середовищах 4. Здійснити моделювання розповсюдження зовнішніх випромінювань в низько-вимірних моделях штучно-неоднорідних середовищах.

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень) Рис. 2.1 Граничні значення складових поля для одного шару літерт. Рис. 2.2 Регулярна сітка в

*площині час-затримка , в вузлах якої обчислено значення електромагнітного поля Рис. 2.3
 Схема утворення вакансії: а – вихід приповерхневого атома та його адсорбція на поверхні
 кристала; б – перехід іншого атома у кристалографічне положення першого атома.
 Рисунок 2.4 Схематичне зображення міжвузлового атома (а) ,вакансії (б)та домішкового
 атома(в).Рисунок 2.5. Характер зміщення атомів в околі вакансії (А) та міжвузлового
 атома (Б). Стрілки показують напрям зміщення атомів першої координаційної сфери;
 пунктирні прямі – атомні площини в бездефектному кристаліРисунок 3.1. Приклад
 реконструкції діелектричної проникності для тришарової структури за умови
 вимірювання коефіцієнта відбиття в обмеженому діапазоні частот: без шуму – а) і при
 наявній шумовій складовій з відношенням «сигнал/шум» 1дБ – б).*

6. Консультанти розділів проекту (роботи)

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв

7. Дата видачі завдання 01.11.2016

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів дипломного проекту	Термін виконання етапів проекту	Оцінка виконання етапу	
			у %	за 4-х бальною шкалою
1.	<i>Огляд новітніх літературних джерел за темою дипломного проекту</i>	з 1 листопада 2016 р.	85	добре
2.	<i>Збір та попередня обробка вихідної інформації, складання бази даних до дослідження</i>	листопад 2016 р.	85	добре
3.	<i>Узагальнення основних теоретичних положень проекту.</i>	листопад 2016 р.	85	добре
4.	<i>Атестація</i>	грудень 2016 р	85	добре
5.	<i>Дослідити критерії застосування низько вимірних моделей штучно-неоднорідних середовищ та їх відповідність задачам захисту довкілля</i>	грудень 2016 р	85	добре

6.	<i>Підведення підсумків та підготовка рукопису до друку.</i>	грудень 2016 р	85	добре
7.	<i>Оформлення магістерської роботи</i>	січень 2017 р.	85	добре
8.	<i>Складання висновків.</i>	січень 2017 р.	85	добре
9.	<i>Підведення підсумків та підготовка рукопису до друку.</i>	20 січня 2017 р.	85	добре
10.	<i>Оформлення дипломного проекту</i>	31 січня 2017 р.	85	добре
11.	<i>Розробка тексту доповіді та підготовка до захисту дипломного проекту</i>	лютий 2017	85	добре
12.	<i>Підготовка комп'ютерної презентації</i>	лютий 2017	85	добре
	Інтегральна оцінка виконання етапів календарного плану (як середня по етапам)		85	добре

Магістр

Лазоренко О.В.

(підпис)

(прізвище та

ініціали)

Керівник проекту _____

д.ф.-м..н. проф. Герасимов О.І.

(підпис)

(прізвище та ініціали)

ANNOTATION

Lazorenko O.V. Manipulated spread of radiation in artificially heterogeneous environments in problems of environmental protection

Development theoretical approach to determine the characteristics of doped structures that divided the system by studying the parameters characterizing the propagation of radiation in heterogeneous environments artificially low for example D models of isotopic defects and structures such superhratok. Shown that the deterministic heterogeneity caused by local distributions allows a first approximation, to set qualitative relationship between the spectral parameters and performance features heterogeneity. The problem is considered on the example of inverse scattering problem in piecewise inhomogeneous system (an example of which is the quasi-one-dimensional structure of level-peryodychna or superhratka) in discrete formulirovtsi.

Keywords: radiation, artificially heterogeneous environment, environmental monitoring, detection of impurities and defects.

АННОТАЦІЯ

Лазоренко О.В., Маніпулюєме розповсюдження випромінювань в штучно-неоднорідних середовищах в задачах захисту довкілля

Розробка теоретичного підходу до визначення характеристик домішкових структур, які збурюють систему за допомогою вивчення параметрів, що характеризують розповсюдження випромінювань в штучно-неоднорідних середовищах на прикладі низько вимірних моделей із ізотопічними дефектами та структурами типу суперграток. Показано, що наявність детермінованої неоднорідності, завданої локальними розподілами дозволяє в першому наближенні, встановити якісні залежності між спектральними параметрами та характеристиками функцій неоднорідності. Проблема розглянута на прикладі зворотної задачі розсіяння в кусочно-неоднорідній системі (прикладом якої є квазі-одновимірна шарово-періодична структура, чи супергратка) у дискретній формулюванні.

Ключові слова: випромінювання, штучно-неоднорідні середовища, моніторинг довкілля, детектування домішок та дефектів .

ЗМІСТ

ВСТУП.....	8
РОЗДІЛ 1. ЗАГАЛЬНИЙ ОПИС РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ВИПРОМІНЮВАНЬ В ШТУЧНО-НЕОДНОРІДНИХ СЕРЕДОВИЩАХ	
1.1 Загальна характеристика штучно-неоднорідних середовищ.....	10
1.2 Основні принципи розповсюдження випромінювань в штучно- неоднорідних середовищах.....	14
1.3 Висновки по 1 розділу.....	18
РОЗДІЛ 2. ШТУЧНО-НЕОДНОРІДНІ СЕРЕДОВИЩА У КОНТЕКСТІ ЗАДАЧ ЗАХИСТУ ДОВКІЛЛЯ	
2.1 Розповсюдження випромінювань у штучно-неоднорідних середовищах та задачі захисту довкілля.....	19
2.2 Ідентифікація домішкових елементів за допомогою спектральних характеристик в моделях штучно-неоднорідних середовищ	30
2.3 Висновки по 2 розділу.....	42
РОЗДІЛ 3. ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ДЕТЕКТУВАННЯ ДОМІШКОВИХ ВКЛЮЧЕНЬ ЗА ДОПОМОГОЮ ХАРАКТЕРИСТИК РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ВИПРОМІНЮВАНЬ В ШТУЧНО-НЕОДНОРІДНИХ СЕРЕДОВИЩАХ	
3.1 Використання чисельних методів щодо моделювання та дослідження параметрів штучно-неоднорідних середовищ.....	43
3.2 Детектування домішок та дефектів(в якості моделей шкідливих забруднень) в неоднорідних середовищах.....	46

3.3 Висновки по 3 розділу.....	51
ВИСНОВКИ.....	52
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ.....	53

Вступ

Актуальність теми. У зв'язку з тим, що у сучасних умовах велике значення набуває пошук нових раціональних технологічних рішень, щодо задач захисту довкілля проблема дослідження розповсюдження випромінювань у штучно-неоднорідних середовищах, яка моделює моніторинг довкілля збуреного шкідливими домішками, є актуальною і своєчасною.

Мета дослідження. Розробка теоретичного підходу до визначення характеристик домішкових структур, які збурюють систему за допомогою вивчення параметрів, що характеризують розповсюдження випромінювань в штучно-неоднорідних середовищах на прикладі низько вимірних моделей із ізотопічними дефектами та структурами типу суперграток.

Об'єкт дослідження. Низьковимірні моделі штучно-неоднорідних середовищ, які відображають окремі риси реальних систем довкілля збурених домішковими включеннями (наприклад, екологічно шкідливими компонентами).

Предмет дослідження. Вивчення характеристик розповсюдження зовнішніх випромінювань в модельних штучно-неоднорідних середовищах в контексті задач захисту довкілля;

Задачі дослідження.

-системно описати загальні характеристики штучно-неоднорідних середовищ;

-висвітлити основні принципи розповсюдження випромінювань в модельних (низько-вимірних) штучно-неоднорідних середовищах;

-встановити функціональні зв'язки між параметрами, які описують розповсюдження випромінювань у штучно-неоднорідних середовищах та завданнями моніторингу екологічно шкідливих домішок в задачах захисту довкілля;

-встановити критерії застосування низько- вимірних моделей штучно-неоднорідних середовищ ,їхню відповідність задачам захисту довкілля;

-відібрати адекватні змісту задач,що розглядаються, чисельні алгоритми щодо дослідження відповідних параметрів розсіяння зовнішніх випромінювань в штучно-неоднорідних середовищах;

-здійснити моделювання розповсюдження зовнішніх випромінювань в низько-вимірних моделях штучно-неоднорідних середовищ,та встановити зв'язки між спектральними та параметрами детермінованих неоднорідних включень

РОЗДІЛ 1. ЗАГАЛЬНИЙ ОПИС РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ВИПРОМІНЮВАНЬ В ШТУЧНО-НЕОДНОРІДНИХ СЕРЕДОВИЩАХ

1.1 Загальна характеристика штучно-неоднорідних середовищ

Неоднорідне середовище це середовище, в якому існує дві і більше області, що мають різні електромагнітні властивості. Керуючись цим означенням, об'єкти дослідження загально названо неоднорідними середовищами, оскільки таке визначення охоплює широкий клас прикладних задач, вирішення яких пов'язане з оцінкою параметрів таких середовищ.

При дослідженні надвисокочастотними методами ключовим фактором є взаємодія електромагнітних хвиль з неоднорідним середовищем об'єкта дослідження. Отже, ступінь цієї взаємодії буде визначатися лиш електричними та магнітними властивостями матеріалу, в тому числі і у надвисокочастотному діапазоні частот. У свою чергу, електричні параметри залежать від неелектричних величин, зумовлених впливом фізичних полів іншої природи, зокрема, тиску, температури, вологості, механічного напруження. Ці параметри також можуть представляти інтерес з метою контролю, разом з такими характеристиками діелектрика, як густина, пористість, вміст води, або ступінь відсиріння.

Електричний параметр встановлює взаємозв'язок між векторами електромагнітного поля, які є причиною електромагнітних процесів, і векторами, які є наслідком цих процесів. У випадку електричного поля, напруженість електричного поля $E(x,y,z)$ є причиною зміщення та поляризації в середовищі, а вектор електричного зміщення $D(x, y, z)$ наслідком цього процесу. На мікроскопічному рівні поляризація відбувається за участі різних механізмів, але моделі таких процесів є настільки складними, що найчастіше користуються макроскопічною параметризованою моделлю, використовуючи абсолютну діелектричну проникність $\epsilon_a(x,y,z)$, як параметр, що характеризує

матеріал. У загальному випадку причинно-наслідкова залежність матиме вигляд

$$D(x,y,z) = \varepsilon_a(x,y,z)E(x,y,z) \quad (1.1)$$

Для вакууму цю залежність можна записати як $D(x,y,z) = \varepsilon_a E(x,y,z)$.

Очевидно, що різні матеріали можуть мати однакову діелектричну проникність, що вказує на неможливість однозначної ідентифікації діелектричних матеріалів лише за їх реакцією на дію електричного поля. Така неоднозначність у більшості випадків не є критичною. Наприклад, у неруйнівному контролі, задачею контролю є встановлення відповідності між вимірним параметром та еталонним значенням.

Відповідно до типу функціональної залежності діелектричної проникності, діелектрики прийнято умовно розділяти на два класи: чисті або безвтратні діелектрики та діелектрики з втратами. Для перших функція $\varepsilon_a(x,y,z)$ є дійсною, а для втратних – комплекснозначною

$$\dot{\varepsilon}_a(x,y,z) = \varepsilon'_a(x,y,z) + i\varepsilon''_a(x,y,z) \quad (1.2)$$

Та залежною від частоти ω , де

$$\sigma(x,y,z) = \omega\varepsilon''_a(x,y,z) \quad (1.3)$$

питома провідність діелектрика. За характером залежності діелектричної проникності від координат, матеріали розділяють на однорідні ($\varepsilon_a = \text{const}$), матеріали з неперервно змінними параметрами $\varepsilon_a \square C$ та кусково-змінними параметрами

$$\varepsilon_a(x) = \varepsilon_{a1}(x), x < s \quad \text{і} \quad \varepsilon_a(x) = \varepsilon_{a2}(x), x > s. \quad (1.4)$$

Саме до останнього типу відносять багат шарові структури. Залежність властивостей реакції діелектричного середовища від поляризації напруженості електричного поля дозволяє розділити діелектрики на ізотропні та анізотропні. Для останніх функція діелектричної проникності має вигляд тензора, а отже дія електричного поля на анізотропний матеріал буде визначатися як

$$\begin{bmatrix} D_x(x, y, z) \\ D_y(x, y, z) \\ D_z(x, y, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_x(x, y, z) \\ E_y(x, y, z) \\ E_z(x, y, z) \end{bmatrix}. \quad (1.5)$$

Варто також звернути увагу, що незалежно від діелектричних властивостей матеріали можуть проявляти слабкі пара- та феромагнітні властивості через наявність різних домішок. Очевидно, що ефектом впливу магнітних властивостей діелектриків на електромагнітне поле нехтувати не можна, так як воно є додатковим джерелом інформації. У випадку, якщо матеріали проявляють сильні пара- та феромагнітні властивості, їх неруйнівний контроль доцільно здійснювати іншими методами, беручи до уваги, що більшість таких матеріалів є провідниками електричного струму. Оскільки створення єдиного методу оцінювання параметрів, який би однаково ефективно працював для різних за характером функцій діелектричної проникності представляє неабияку трудність, прийнято звужувати область застосування та будувати методи, базуючись на апіорній інформації про неоднорідне середовище.

Так, електромагнітний неруйнівний контроль прийнято спеціалізувати у відповідності до призначення. Очевидно, що створення універсальних засобів оцінювання параметрів різних за властивостями матеріалів діелектриків є однією з пріоритетних задач.

Через велику кількість параметрів в анізотропній моделі (1.5), що характеризує середовище, їх оцінювання за розсіяним електромагнітним полем є надзвичайно складною задачею увагу приділимо ізотропному випадку, де

$$\bar{D}(x, y, z) = \varepsilon_a(x, y, z) \bar{E}(x, y, z). \quad (1.6)$$

Проникнення електромагнітних хвиль у штучно-неоднорідні середовища та розсіювання хвиль на поверхнях розділу є лише однією з передумов для досягнення ефективності радіочастотних методів контролю. Іншим фактором, який відіграє істотну роль у розвитку методів та засобів оцінювання параметрів неоднорідності середовищ непрямыми методами, є наявність універсальної математичної моделі розповсюдження електромагнітного поля у неоднорідному середовищі. У диференціальній формі, з врахуванням причинно-наслідкових залежностей між напруженістю електричного поля E та вектором електричної індукції D (а також між напруженістю магнітного поля H та вектором магнітної індукції B для магнітних середовищ), таку модель подають у вигляді рівнянь Максвела

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathcal{E} + \mu \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} &= 0, \\ \operatorname{rot} \mathcal{H} - \varepsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} &= \sigma \mathcal{E}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Повна система рівнянь Максвелла включає ще два рівняння, які за відсутності сторонніх струмів та зарядів мають вигляд $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ та $\operatorname{div} \mathbf{D} = 0$.

Для гармонічної зміни поля в часі з частотою ω розв'язок рівнянь (1.1) можна подати за допомогою виразів

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(x, t) &= \operatorname{Re} \left\{ \left(\varepsilon + \frac{i\sigma}{\omega} \right)^{-1/2} E(x) \exp(-i\omega t) \right\}, \\ \mathcal{H}(x, t) &= \operatorname{Re} \left\{ \mu^{-1/2} H(x) \exp(-i\omega t) \right\}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Відповідно, рівняння Максвелла (1.1) набудуть вигляду:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} E - ikH &= 0, \\ \operatorname{rot} H + ikE &= 0, \end{aligned} \quad (1.9)$$

Де $k = \omega \sqrt{\mu(\varepsilon + i\sigma/\omega)}$ – хвильове число.

При дослідженні процесів розсіювання з метою забезпечення єдності розв'язку на розв'язки рівняння Максвелла накладають додаткові умови випромінювання на безмежності. На границях розділу середовищ з різними параметрами розв'язок рівнянь (1.9) також має задовольняти умовам спряження нормальних та тангенціальних складових електромагнітного поля.

1.2 Основні принципи розповсюдження випромінювань в штучно-неоднорідних середовищах

Відомо, що еволюцію квантовомеханічної системи можна описати розв'язками рівняння Шредінгера [1]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.10)$$

де \hat{H} - гамільтоніан квантовомеханічної системи; \hbar - стала Планка; $\Psi(\mathbf{r}, t)$ - хвильова функція, яка визначає стан системи в момент часу t . Згідно з засадами теорії квантового розсіювання, для відомої хвильової функції падаючої частинки $\Psi^{(in)}$ за розв'язком рівняння Шредінгера знаходять хвильову функцію $\Psi^{(out)}$ розсіяної частинки. Враховуючи те, що частинка може перебувати в одному з станів, достатньо розв'язати задачу розсіювання для частинки у кожному із станів $\psi_{\alpha}^{(in)}$. Тут α є квантовими числами, а функції $\psi_{\alpha}^{(in)}$ складають повний ортонормований базис. Обчислення результуючої хвильової функції ґрунтується на принципі суперпозиції, з урахуванням результату розсіювання для довільного стану падаючої частинки.

Розкладемо хвильові функції у вигляді

$$\Psi^{(in)} = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \psi_{\alpha}^{(in)} \quad (1.11)$$

і відповідно,

$$\Psi^{(out)} = \sum_{\beta} b_{\beta} \psi_{\beta}^{(out)}. \quad (1.12)$$

Тут набір функцій $\psi_{\alpha}^{(in)}$ і $\psi_{\alpha}^{(out)}$ складають повний базис, за допомогою якого можна описати довільний стан частинки, включаючи її характеристики як до моменту розсіювання, так і після нього. Тоді задача розсіювання зводиться до знаходження співвідношення між коефіцієнтами a_{α} та b_{β} .

Таке співвідношення можна записати у вигляді

$$b_{\beta} = \sum_{\alpha} S_{\beta\alpha} a_{\alpha}, \quad (1.13)$$

де $-S_{\beta\alpha}$ елементи матриці розсіювання \mathbf{S} , які визначають квантовомеханічні амплітуди переходу (розсіювання) частинки з одного стану в інший.

Як відомо, матриця розсіювання є також зручною характеристикою для опису електродинамічних процесів у багатополісниках і, зокрема, при розсіюванні електромагнітних хвиль на шаруватих структурах. Не зважаючи на те, що процеси мають різну фізичну природу, формальне визначення матриць \mathbf{S} для квантовомеханічних процесів та розсіювання хвиль на багат шарових структурах є однаковим.

Іншим аргументом на користь застосування єдиної моделі, яка описує результат спостереження квантовомеханічних та електродинамічних процесів, є випадок одноканального розсіювання безспінової частинки. Її поведінка в потенціальному полі описується стаціонарним рівнянням Шредінгера

$$E\Psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}), \quad (1.14)$$

де E - енергія; $V(\mathbf{r})$ - потенціал; μ - маса частинки.

Сумістимо нерухомий розсіювальний центр із початком координат і візьмемо напрям падаючих частинок за вісь z . На великій відстані від розсіювального центра падаюча частинка рухається вільно, і її хвильова функція має вигляд плоскої хвилі $\exp(ikz)$. Біля силового центру частинка зазнає розсіювання і, відповідно, її хвильова функція змінюється. Після того, як розсіяна частинка віддаляється від розсіювального центра, вона знову

набуде властивостей вільної частинки. Враховуючи, що потік вільних розсіяних частинок буде спрямований від розсіювального центра, їх рух можна описати хвилею, що розходитья $f(\theta, \varphi) \exp(ikr) / r$. Звідси повну хвильову функцію, яку визначає рух падаючої та розсіяної частинок на великих відстанях від розсіювального центра, можна подати у вигляді

$$\psi = \exp(ikz) + f(\theta, \varphi) \frac{\exp(ikr)}{r}, \quad (1.15)$$

де $f(\theta, \varphi)$ - амплітуда розсіювання, що залежить від аргументів θ та φ , які в тривимірному випадку визначають напрям спостереження.

Як видно, подібну форму має розв'язок (1.41) рівняння Максвела в далекій

зоні для скалярного випадку, який описано у першому розділі.

Окрім того, варто згадати інші дві фундаментальні моделі потенціального розсіювання квантовомеханічної теорії. Насамперед йдеться про стаціонарне

рівняння Шредінгера для радіально-симетричного розсіювального потенціалу [2]:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right) u_l(r) = 0 \quad (1.16)$$

Коефіцієнти k та $U(r)$ цього рівняння визначають основні характеристик квантово-механічної взаємодії: енергію $E = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2$ та потенціал $V = \frac{\hbar^2}{2\mu} U$.

У випадку $l = 0$ фундаментальна система розв'язків дозволяє записати загальний розв'язок рівняння (1.16) через матрицю розсіювання, що є ідентичним до форми подання розв'язків прямої задачі розсіювання для електромагнітних та акустичних хвиль в одновимірному випадку.

По-друге матрицею розсіювання можна виразити також розв'язки рівняння Дірака [6], яке описує еволюцію частинки із спіном $-\frac{1}{2}$. В одновимірному випадку таку модель записують як

$$B \frac{d}{dx} \Phi + Q(x) \Phi = k^2 \Phi, \quad (1.17)$$

де $\Phi = [\varphi_1, \varphi_2]$ - векторнозначна двокомпонентна хвильова функція;

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} - \text{матриця Паулі};$$

$$Q = \begin{bmatrix} q_1(x) & q_2(x) \\ q_2(x) & -q_1(x) \end{bmatrix} - \text{матриця потенціалів.}$$

Модель (2.6) набула розвитку в теорії нелінійних диференціальних рівнянь, які належать до так званої AKNS-ZS ієрархії. Істотний доробок у цьому напрямі зробили В.Захаров і А.Шабат [3], а згодом узагальнили Ablowitz, Каур, Newell та Segur [4]. Зокрема, їх результати дозволили отримати аналітичні вирази для моделювання процесу розповсюдження солітонів [5].

1.3 Висновки по 1 розділу

Детально проаналізована задача про розповсюдження зовнішніх електромагнітних випромінювань в середовищах з неоднорідною діелектричною проникливістю. Задачу про розповсюдження випромінювань у неоднорідних середовищах запропоновано спрямувати для детектування власних параметрів неоднорідностей, що є актуальним в задачах моніторингу та захисту навколишнього середовища від шкідливих (зокрема, фізичних) забруднень.

РОЗДІЛ 2 ШТУЧНО-НЕОДНОРІДНІ СЕРЕДОВИЩА У КОНТЕКСТІ ЗАДАЧ ЗАХИСТУ ДОВКІЛЛЯ

2.1 Розповсюдження випромінювань у штучно-неоднорідних середовищах та задачі захисту довкілля

Носієм інформації про параметри та структуру плоско-неоднорідного середовища є розподіл розсіяного електромагнітного поля $scat E$, а отже спосіб реєстрації цього поля визначатиме характеристики засобу радіочастотного неруйнівного контролю. Важливо зазначити, що об'єкти дослідження не є джерелом електромагнітного поля, тому виміряне поле є, як правило, реакцією на штучно створене поле $inc E$. Це встановлює вимоги до джерел електромагнітного поля, які використовують у неруйнівному контролі. Крім елементарних джерел випромінювання електромагнітного поля, таких як диполі, вібратори, щілини, в неруйнівному контролі також застосовують діаграмо-формульовальні елементи. До них належать рупорні, лінзові, параболічні антени і т.д. Такі риси аналізу є притаманними також проблемі детектування (та класифікації) домішкових елементів в процесі моніторингу систем навколишнього середовища.

Кожному з цих пристроїв можна поставити свою електродинамічну модель, виходячи з рівнянь Максвелла. Беручи до уваги, що розподіл поля довкола об'єкта дослідження свідчить про його електричні параметри та внутрішню структуру, параметри антенних пристроїв (діаграма спрямованості, поляризаційна діаграма, смуга пропускання і т.д.) повинні задовольняти певним вимогам, або щонайменше, ці параметри мають бути контрольовані. Для цього здійснюють калібрування антенно-фідерної системи засобів неруйнівного контролю, оцінюючи параметри її моделі. Результати калібрування належним чином враховують у процесі обробки, для корекції комплексних частотної та просторової характеристик.

При виборі моделі, як правило, не вдається використати припущення про

взаємодію об'єкта дослідження із сформованим електромагнітним полем лише у дальній зоні антенної системи, оскільки необхідно забезпечити показники чутливості та роздільної здатності відповідних засобів, а також враховувати інші технологічні та конструкційні обмеження. Саме тому модель опромінювальної плоскої електромагнітної хвилі та амплітуду розсіювання можна використати лише у спеціально обумовлених випадках. Загалом елементи випромінювання, тракт реєстрації електромагнітного поля та об'єкт дослідження складають єдину електродинамічну систему і, відповідно, їх взаємодію необхідно враховувати при моделюванні та створенні методів обробки зареєстрованої інформації. Взаємність пасивних електромагнітних пристроїв дає можливість технологічно сумістити засоби формування та реєстрації електромагнітного поля. При цьому виникає потреба розділення приймального та передавального трактів. Очевидним є те, що вимірювання величини електромагнітного поля для фіксованих значень аргументів (координати та частоти) функції $E_{scat}(x, \omega)$ є недостатніми даними для охарактеризування об'єкта дослідження. Тому у засобах неруйнівного контролю використовують просторове сканування, застосовують багаточастотний принцип роботи: $E_{scat}(x, \omega)$, або принцип зондування електромагнітним імпульсом із заданою часовою залежністю його амплітуди: $E_{inc}(x, t)$. У деяких випадках, в засобах неруйнівного контролю використовують принцип неперервного випромінювання зі змінною у часі частотою, що зумовлено відносною простотою технічної реалізації такої системи. При цьому виникає задача виділення з зафіксованої інформації корисних параметрів, підданих нелінійному перетворенню.

Аналогічним прикладом, де простота технічної реалізації приймача приводить до часткової втрати інформації, що містить розсіяне об'єктом поле, є реєстрація лише енергетичних параметрів прийнятих сигналів при багаточастотному зондуванні. З іншої сторони, для досягнення когерентності і вимірювання комплексозначних величин порівнюють зареєстровані

значення електромагнітного поля з полем від опорного джерела. Така когерентність досягається завдяки використанню мостових та гетеродинних схем прийому, що істотно підвищують складність приймача, особливо при намаганні забезпечити стабільні характеристики у широкому діапазоні частот. Іншою складовою моделі процесів при неруйнівному контролі є присутність випадкової компоненти через наявність шумів, в основному, у першому каскаді підсилення та при гетеродинному перетворенні сигналів. Як правило, можна припустити, що дійсна і уявна частини цієї випадкової компоненти мають нормальний розподіл. Важливо також зазначити, що лінійна модель є прийнятною, якщо ширина динамічного діапазону приймача є значно більшою, ніж максимальна величина прийнятого сигналу. Крім того, повинна забезпечуватись умова лінійності характеристик тракту приймача в усьому динамічному діапазоні. Таку лінійність часто досягають корекцією на етапі обробки інформації за даними попереднього калібрування системи. Щодо лінійності самого процесу розсіювання, то вона буде порушуватись у випадку рухомих об'єктів (за рахунок доплерівських ефектів) або присутності в об'єктах дослідження включень, в яких взаємозв'язок між напруженістю поля та вектором електричного зміщення має нелінійний характер.

Очевидним є те, що багато аспектів технічної реалізації залишаються визначальними при створенні пристроїв неруйнівного контролю та здійсненні обробки зареєстрованої інформації. Тому при формуванні математичної моделі процесів вимірювання повинні враховуватись перелічені вище особливості, а створення методів, які б давали можливість оцінити параметри штучно-неоднорідних середовищ, відповідно, ґрунтуватися на строгому математичному підході з використанням даної моделі.

За умови нормального падіння плоскої хвилі на плоско-неоднорідну структуру рівняння Максвелла можна звести до одновимірного хвильового рівняння. Для чисто діелектричного ізотропного частотно-незалежного матеріалу, розповсюдження електромагнітних хвиль у часовій області можна промоделювати системою рівнянь

$$\begin{cases} \partial E(z,t)/\partial z - \mu_0 \mu \partial H(z,t)/\partial t = 0, \\ \partial H(z,t)/\partial z - \varepsilon_0 \varepsilon(z) \partial E(z,t)/\partial t = 0, \end{cases} \quad (2.1)$$

де $E(z,t)$ та $H(z,t)$ є електричною та магнітною напруженістю поля; ε_0 є та μ_0 - діелектрична та магнітна проникність вакууму, відповідно; μ - відносна магнітна проникність середовища розповсюдження, яке прийнято вважати в даному випадку немагнітним ($\mu = 1$) і $\varepsilon(z)$ - функція відносної діелектричної проникності структури, що досліджується.

Припустимо, що область $z < 0$ є вільним простором розповсюдження, плоско-неоднорідна структура розташована в півпросторі $z > 0$, а функція ($\varepsilon(z) - 1$) має компактний супорт.

Для того, щоб привести рівняння (2.1) до канонічної форми, введемо нову змінну $\tau(z)$:

$$\tau(z) = \int_0^z \sqrt{\mu_0 \mu \varepsilon_0 \varepsilon(z')} dz'; \quad (2.2)$$

$$\frac{d\tau(z)}{dz} = \sqrt{\mu_0 \mu \varepsilon_0 \varepsilon(z)}, \quad (2.3)$$

де $t(z)$ - затримка в часі, або час розповсюдження хвилі, яка проходить відстань z від точки $z = 0$ поверхні. Звідси, рівняння (2.1.2) набуває більш симетричного вигляду

$$\begin{cases} \partial E(\tau, t) / \partial \tau - \rho(\tau) \partial H(\tau, t) / \partial t = 0, \\ \partial H(\tau, t) / \partial \tau - (\rho(\tau))^{-1} \partial E(\tau, t) / \partial t = 0, \end{cases} \quad (2.4)$$

де $\rho = \sqrt{\mu_0 \mu / \epsilon_0 \epsilon(\tau)}$ є характеристичний опір середовища розповсюдження.

Розв'язок рівняння (2.4) для тангенціальних компонент поля можна подати двома лінійно незалежними складовими

$$\begin{bmatrix} E(\tau, t) \\ H(\tau, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1/\rho(\tau) & -1/\rho(\tau) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D(\tau, t) \\ U(\tau, t) \end{bmatrix}, \quad (2.5)$$

де $D(\tau, t)$ та $U(\tau, t)$ - падаюча та відбита хвилі, які розповсюджуються в протилежних напрямках: $D(\tau, t) = d_0(\tau - t)$ s $U(\tau, t) = u_0(\tau + t)$.

Припускаючи, що в точці $z = 0$ відсутня поверхня розділу середовищ, розв'язок прямої задачі можна шукати у вигляді

$$D(0, t) = \delta(t) \text{ та } U(0, t) = r(t), \quad (2.6)$$

де $\delta(t)$ - дельта-функція. Тут $r(t)$ має сенс імпульсної характеристики

багатошарової структури як реакції на $\delta(t)$ -збудження.

Одновимірну задачу розсіювання розв'язують також відносно невідомої частотної залежності коефіцієнта відбиття $R(\omega)$, який встановлює відношення між двома гармонічними хвилями, що розповсюджуються у протилежних напрямках:

$$e(z, \omega) = \exp(-i\omega\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}z) + R(\omega)\exp(i\omega\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}z) \text{ для } z \leq 0. \quad (2.7)$$

Застосувавши зворотне перетворення Фур'є до попереднього виразу, отримаємо

$$E(z, t) = \delta(t - \sqrt{\varepsilon_0\mu_0}z) + r(t + \sqrt{\varepsilon_0\mu_0}z). \quad (2.8)$$

Звідси імпульсна характеристика плоско-неоднорідної

структури визначається коефіцієнтом відбиття як

$$r(t) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R(\omega)\exp(i\omega t) d\omega. \quad (2.9)$$

Отже пряма задача розсіювання полягає у тому, щоб знайти коефіцієнт відбиття і, відповідно, імпульсну характеристику плоско-неоднорідної структури, якщо відомо всі її параметри, а саме функцію діелектричної проникності, або товщину і діелектричну проникність всіх шарів.

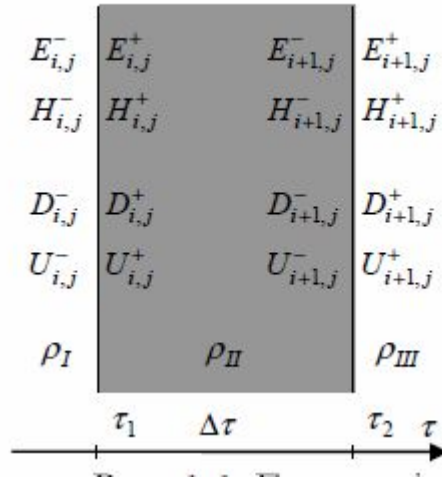


Рисунок 2.1 Граничні значення складових поля для одного шару

Аналіз електромагнітного поля структури з плоскими поверхнями розділу можна зробити для часткового випадку – однорідного діелектричного шару (рис. 2.1). Товщина цього шару h визначає часову затримку

$$\Delta\tau = h\sqrt{\varepsilon_0\mu_0\varepsilon_{II}}.$$

Коефіцієнт де $\rho = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0\varepsilon_m}$ є характеристичним опором будь-якого з середовищ де $m = I, II, III$. Беручи до уваги відсутність складових поля, орієнтованих у напрямку осі z , граничні умови визначають неперервність перпендикулярних електричної та магнітної складових на поверхнях розділу середовищ $\tau = \tau_i$, $i = 1, 2$. Крім того, умову розповсюдження падаючої та відбитої хвиль всередині однорідного шару між поверхнями розділу можна визначити як

$$\begin{bmatrix} E(\tau_i - 0, t) \\ H(\tau_i - 0, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E(\tau_i + 0, t) \\ H(\tau_i + 0, t) \end{bmatrix}; \quad (2.10)$$

$$\begin{bmatrix} D(\tau, t) \\ U(\tau, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0(\tau - t) \\ u_0(\tau + t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D(\tau + \Delta\tau, t + \Delta\tau) \\ U(\tau + \Delta\tau, t - \Delta\tau) \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

Це означає, що кожна хвиля витрачає час Δt щоб пройти крізь всю товщину шару. Припускаючи, що в досліджуваній структурі на момент збудження вихідної хвилі напруженість поля є нульовою, можна записати умову причинності $U(\tau, t) = 0$, при $t > \tau$.

Умови (2.10) - (2.11) дозволяють розв'язати пряму задачу дифракції у часовій області. У загальному випадку цю задачу можна сформулювати відносно падаючої хвилі $U(t, \tau)$ за умови, що часова залежність вихідної хвилі відома: $D(t, \tau)$. У випадку багат шарової структури застосовують рекурентну процедуру: починаючи з першої поверхні розділу, встановлюють значення напруженостей поля в околі кожної наступної поверхні розділу середовищ та визначають у цих точках функції $U(\tau, t)$ та $D(\tau, t)$ [7].

Відношення відбитої хвилі до падаючої у частотній області дає можливість обчислити коефіцієнт відбиття $R(\omega) = u^-(0, \omega)/d^-(0, \omega)$ якщо $d^-(0, \omega) \neq 0$. Тут $u^-(0, \omega)/d^-$ та $d^-(0, \omega)$ є функціями, які отримано застосуванням зворотного перетворення Фур'є (2.8) до функцій $U^-(0, t)$ та $D^-(0, t)$.

Інший принцип, який полягає у встановленні залежностей між коефіцієнтом розсіювання багат шарової структури та її частковим коефіцієнтом розсіювання без зовнішнього шару, також ефективно використовують для моделювання розповсюдження хвиль у багат шаровій структурі у частотній області [8]. Він зводиться до перемноження трансмісійних матриць всіх шарів. Якщо функція діелектричної проникності є неперервною, то розв'язання прямої задачі розсіювання відносно

коефіцієнта відбиття зводиться до розв'язку рівняння Рікати [9,10]. Розв'язок такої задачі також шукають наближено, апроксимуючи неперервну діелектричну проникність кусково-постійною функцією. З практичної точки зору, найзручнішим способом апроксимації діелектричної проникності є наближення кусково-постійною функцією, розриви якої знаходяться у вузлах деякої регулярної сітки. Такі багатошарові структури називають середовищами типу Гуппілауд [11]. Нехай $\Delta\tau$ крок регулярної сітки. Це означає, що взаємодія між хвилею та середовищем буде розглядатися тільки для дискретних величин часу $t = j\Delta\tau$ та дискретних значень часової затримки $\tau = i\Delta\tau$, що спричинені розповсюдженням хвиль крізь багатошарову структуру. При цьому значення i та j вважають цілими, а їх суму $(i + j)$ - парною величиною. Точки, де значення електромагнітного поля обчислюється, показано на рисунку 2.1 у координатах часу i та часової затримки. Перехід до дискретної моделі розповсюдження хвиль вимагає нових позначень складових електромагнітного поля, а також нових позначень для падаючої та відбитої хвиль:

$$\begin{bmatrix} E_{i,j}^{\pm} \\ H_{i,j}^{\pm} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E(i\Delta\tau \pm 0, j\Delta\tau) \\ H(i\Delta\tau \pm 0, j\Delta\tau) \end{bmatrix}; \quad (2.12)$$

$$\begin{bmatrix} D_{i,j}^{\pm} \\ U_{i,j}^{\pm} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D(i\Delta\tau \pm 0, j\Delta\tau) \\ U(i\Delta\tau \pm 0, j\Delta\tau) \end{bmatrix}. \quad (2.13)$$

За аналогією до дискретного зображення компонент електромагнітного поля, характеристичний опір у дискретній моделі визначено з лівої

$\rho_i^- = \rho(\tau_i - 0)$ та правої $\rho_i^+ = \rho(\tau_i + 0)$ сторін від інтерфейсу i . Згідно з припущенням, багат шарова структура має однорідний матеріал $\rho(\tau) = const$ між сусідніми поверхнями розділу $\tau_i < \tau < \tau_{i+1}$, а отже виконується умова $\rho_i^+ = \rho_{i+1}^-$

Відношення між складовими поля з обох сторін поверхні розділу можна встановити на основі виразу (2.5) і граничних умов (2.9), (2.12) та (2.13), записаних у дискретній формі:

$$\begin{bmatrix} D_{i+1,j}^+ \\ U_{i+1,j}^+ \end{bmatrix} = \frac{1}{2\rho_{i+1}^-} \begin{bmatrix} (\rho_{i+1}^+ + \rho_{i+1}^-) & -(\rho_{i+1}^+ - \rho_{i+1}^-) \\ -(\rho_{i+1}^+ - \rho_{i+1}^-) & (\rho_{i+1}^+ + \rho_{i+1}^-) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_{i+1,j}^- \\ U_{i+1,j}^- \end{bmatrix} = Q_{i+1} \begin{bmatrix} D_{i+1,j}^- \\ U_{i+1,j}^- \end{bmatrix}. \quad (2.15)$$

Для того, щоб описати процес розповсюдження хвилі крізь структуру типу

Гуппілауд, умову передачі (1.15) приведемо до дискретного вигляду:

$D_{i+1,j}^- = D_{i,j-1}^-$ та $U_{i+1,j}^- = U_{i,j+1}^-$. Розглянемо дискретний момент часу $j + 1$ замість j . Це можна записати аналітично, здійснюючи заміну позначень у виразі (2.10):

$$\begin{bmatrix} D_{i+1,j+1}^+ \\ U_{i+1,j+1}^+ \end{bmatrix} = Q_{i+1} \begin{bmatrix} D_{i,j}^+ \\ U_{i,j+2}^+ \end{bmatrix}. \quad (2.16)$$

Цей вираз є основним рівнянням, що описує розповсюдження хвиль крізь середовище типу Гуппілауд. Знаючи параметри середовища - всі ρ_i , а також значення у правій частині виразу (2.16), знаходимо невідомі в лівій частині, починаючи з величин, що задає гранична умова (2.12).

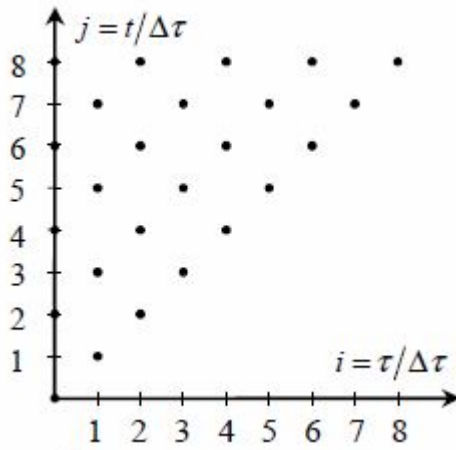


Рисунок 2.2. Регулярна сітка в площині час-затримка, в вузлах якої обчислено значення електромагнітного поля

Обернену задачу розсіювання формулюють відносно невідомої діелектричної проникності. У тривіальній одновимірній задачі розсіювання припускають, що невідома функція є неперервною і дійсною, а вихідні дані задані частотною залежністю коефіцієнта відбиття $R(\omega)$ для всіх значень частоти $\omega \in R^1$, або імпульсною характеристикою $r(t)$. Як видно, різні підходи до розв'язання прямої одновимірної задачі розсіювання не дають змогу безпосередньо побудувати розв'язок оберненої навіть для тривіального випадку.

Розроблену стратегію побудови індикаторної функції для встановлення границі розсіювачів за відомим значеннями розсіяного поля ефективно застосовано при обробці сигналів у засобах неруйнівного

контролю, системах підповерхневої локації та дистанційного зондування, а також у системах виявлення джерел електромагнітного та акустичного випромінювання.

2.2 Ідентифікація домішкових елементів за допомогою спектральних характеристик в моделях штучно-неоднорідних середовищ

Розглянемо в якості ізоморфної задачі детектування(моніторинг) параметрів дефектів у кристалічній матриці(яка у нашому уявленні,може виступати моделлю впорядкованого середовища).Дефекти в кристалах утворюються в процесі їхнього росту, під впливом теплових, механічних і електричних полів, а також при опроміненні нейтронами, електронами, рентгенівськими променями, ультрафіолетовим випромінюванням (радіаційні дефекти). Розрізняють точкові дефекти (нульмірні), лінійні (одновимірні), дефекти, що утворюють в кристалі поверхні (двовимірні), і об'ємні дефекти (тривимірні). В одновимірному дефекті в одному напрямку розмір значно більше, ніж відстань між сусідніми однойменними атомами (параметр ґратки), а в двох інших напрямках – того ж порядку. У двовимірного дефекту в двох напрямках розміри більше, ніж відстань між найближчими атомами, і т. д. Механізми утворення дефектів різноманітні. Утворення дефектів в кристалі проходить по різним причинам. По перше, частина атомів кристала завжди покидає свої ідеальні позиції у кристалічній ґратці і тому створює дефекти структури завдяки термічним флуктуаціям.

При такому механізмі утворення дефектів деяка невелика частина власних атомів кристалу покидають своє регулярне місце у ґратці, оставляють свої вузли (вони стають вакансіями), «втискується» проміж іншими регулярними атомами (створюючи міжвузлові атоми) і тим самим локально порушують «ідеальну» структуру кристалу. По друге, дефекти структури утворюються внаслідок інших причин. Наприклад, це вихід атомів

на поверхню кристалу – самий простий механізм утворення точкового дефекту (вакансії) поблизу поверхні кристала. При цьому вакансії – незайняті вузли кристалічної ґратки – не супроводжуються міжвузловими атомами. Вакансії в кристалах іноді називають дефектами по Шотткі. Процес утворення таких вакансій можна уявити собі, наприклад, як переміщення атома з об'єму кристала на поверхню, де він розміщується у потенціальному вузлі ґратки, займаючи його. Для більшості кристалів енергія утворення вакансії становить ~ 1 еВ.

До дефектів, що виникають по механізму Френкеля відносять міжвузлові атоми або іони в кристалі. За рахунок теплових флуктуацій або силового зовнішнього впливу (бомбардування кристалу іонами) сторонній атом (чи іон) може упровадитися в регулярну структуру кристала ззовні і утворити «зайвий», міжвузловий атом.

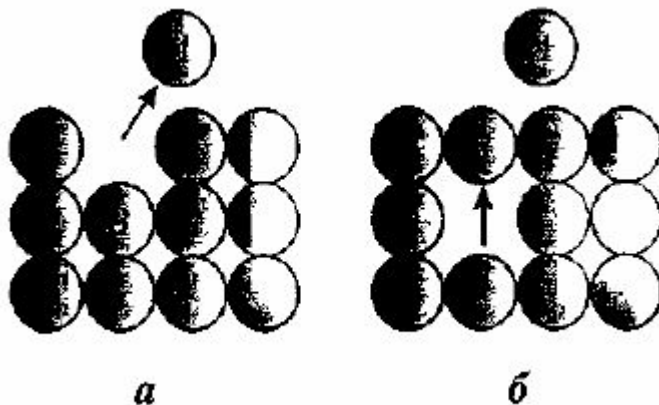


Рисунок 2.3. Схема утворення вакансії: *a* – вихід приповерхневого атома та його адсорбція на поверхні кристала; *б* – перехід іншого атома у кристалографічне положення першого атома.

Цей перехід розглядається як дифузія вакансії вглиб кристала (згідно І.М. Болести). До речі, саме цей метод упровадження сторонніх атомів у кристалічну ґратку використовують в сучасній електроніці, тому що кристали напівпровідників обов'язково легують домішками, атоми яких мають не тільки інший розмір, але й можуть мати інший електричний заряд. Однак після відпалу кристалу сторонні атоми розміщуються на позиціях основних атомів – вони утворюють «твердий розчин». Таким чином, неідеальна, дефектна структура спеціально планується технологічними засобами. Необхідність керування дефектами структури (що необхідно особливо для напівпровідників) зумовлена тим, що дефекти суттєво впливають на такі параметри, як електропровідність, діелектричні і магнітні втрати енергії, електричну міцність та й на інші властивості напівпровідників, магнетиків та діелектриків, а також впливають на механічні параметри (міцність) металів. Тому деякі властивості твердих тіл є структурно-чутливими. Однак інші властивості (такі як щільність, теплоємність, пружні характеристики) незначно залежать від наявності дефектів. Їх називають структурно-нечутливими властивостями, тому що вони визначаються, в першу чергу, природою хімічного зв'язку, структурою та хімічним складом кристала. Дефекти структури можуть бути вкрай різноманітні. Іноді вони асоціюються один з іншим, так що важко буває навіть віднести їх до якогось визначеного класу. Все ж таки можна поділити основні типи структурних дефектів за їхньою розмірністю.

Нульмірні дефекти (точкові) характеризуються порушенням структури у вузлах або у міжвузлях кристалічної ґратки. Ці дефекти зумовлені, перш за все, невпорядкованим розміщенням власних атомів кристалу – так, як було показано раніше на рисунку 2.3. До точкових (нульмірних) дефектів кристала

відносять усі дефекти, які зв'язані зі зсувом або заміною поодиноких (або невеликої групи) атомів. Виникають вони при нагріванні, у процесі росту кристала й у результаті радіаційного опромінення. Точкові дефекти можуть вноситися також у результаті імплантації. Ці дефекти найбільш вивчені, включаючи їхній рух, взаємодію, анігіляцію, або випар. До них відносяться:

- вакансія – вільний, незайнятий атомом, вузол кристалічної ґратки;
- домішковий атом заміщення – заміна атома одного типу або атомом іншого типу у вузлі кристалічної ґратки;
- домішковий атом упродовження – атом домішки, що розташовується в міжвузлі кристалічної ґратки;
- міжвузловий атом – атом основного металу (напівпровіднику); що знаходиться у міжвузельній позиції елементарної комірки;
- пара Френкеля – вакансія і міжвузловий атом;
- дефект Шотткі – вакансія, що виникла за рахунок виходу атома з вузла на поверхню кристала або за яку-небудь границю.

Дефекти, що утворюються за механізмом Шотткі в кристалах хімічних елементів (зокрема в напівпровідниках і металах) являють собою одиночні вакансії (англ. vacancy). В іонних кристалах дефекти Шотткі – це пари з катіонної й аніонної вакансій. Такий дефект часто зустрічається в лужно-галоїдних кристалах. Наявність дефектів Шотткі зменшує щільність кристала, оскільки атом, що утворив вакансію, дифундує на його поверхню (рис. 2.3).

Дефекти, що утворюються за механізмом Френкеля – це вакансія та атом

у міжвузлілі (англ. interstitial). Вони типові, наприклад, в кристалах типу галюїдів срібла. Вакансія і міжвузловий атом можуть переміщатися в середині кристалічної ґратки за рахунок теплової енергії. Дефекти Френкеля легко утворюються також у кристалах зі структурою алмаза (кремній, германій). Ці дефекти не впливають на щільність кристала. У загальному випадку в кристалі можуть бути як дефекти Френкеля, так і дефекти Шотткі, причому переважають ті, для утворення яких потрібна менша енергія. В іонних кристалах, утворених частками двох сортів (позитивні і негативними), точкові дефекти виникають парами. Дві вакансії протилежного знака звичайно утворюють дефект Шотткі. Пара, що складається з міжвузлового іона і залишеної їм вакансії, звичайно є дефектом Френкеля. Як вже відзначалося, найпростішими нульмірними дефектами в кристалах є вакансії та міжвузлові атоми, рис. 2.4. Зміщення атомів або іонів при точкових дефектах зумовлюють виникнення деформації і пружних полів навколо дефектів.

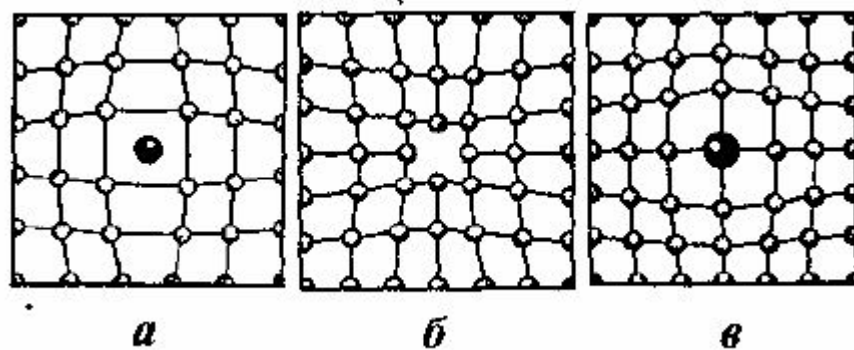


Рисунок 2.4. Схематичне зображення міжвузлового атома (а), вакансії (б) та домішкового атома (в)

Згідно наведеної класифікації, крім власних точкових дефектів вони бувають домішкові дефекти

Домішкові дефекти – якщо атоми чи іони відрізняються від атомів основного кристалу. Такими дефектами, наприклад, являються донорні та

акцепторні домішки у напівпровідниках (так саме як і домішки, необхідні для утворення центрів рекомбінації носіїв заряду, центри розсіяння, тощо). Навкруги таких дефектів виникає напруженість та перекручення кристалічної ґратки,

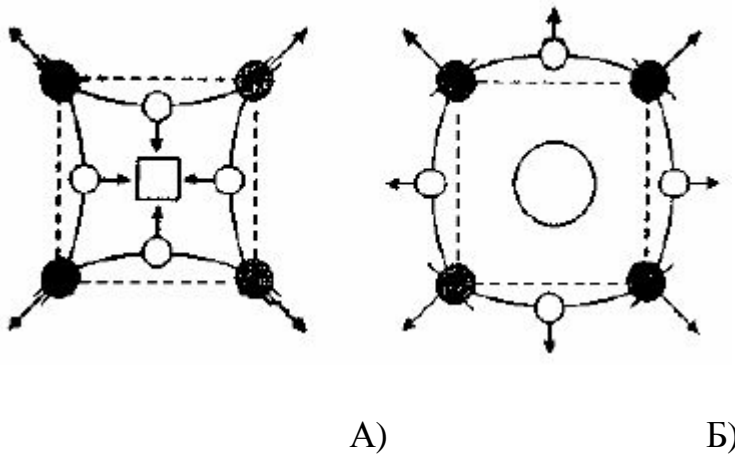


Рисунок 2.5. Характер зміщення атомів в околі вакансії (А) та міжвузлового тома (Б). Стрілки показують напрям зміщення атомів першої координаційної сфери; пунктирні прямі – атомні площини в бездефектному кристалі

Якщо кристал іонний, то вакансія в кристалі приводить не тільки до перекручення ґратки, але й до появи на місці вакансії ефективного заряду протилежного знаку до знаку заряду іону, який відсутній. Таким чином, при утворенні дефектів у кристалах діє принцип електронейтральності. Справа в тому, що сили електричної взаємодії дуже великі, і тому сума зарядів усіх дефектів, які утворюються в кристалі, має дорівнювати нулеві: $\sum n_i q_i = 0$, де n_i - концентрація, а q_i - заряд дефектів, які утворюються. Тому, наприклад, зміщення іона з вузла кристалічної ґратки у міжвузловину супроводжується виникненням не тільки зарядженого іона у міжвузловині, але й зарядженої

вакансії у кристалічній ґратці. Як дефекти по Шотткі, так і дефекти Френзеля забезпечують локальну електронейтральність іонних кристалів.

Частина атомів або іонів кристалу може бути відсутньою на місцях, що відповідають ідеальній схемі кристалічної ґратки. Такі дефектні місця називаються вакансіями. У кристалах можуть бути присутні також узорідні (домішкові) атоми або іони, заміщаючи основні частки, що утворюють кристал, або впроваджуючись між ними. Точковими дефектами в кристалах можуть бути також власні атоми або іони, що змістилися з нормальних положень (міжвузельні атоми та іони), а також центри забарвлення – комбінації вакансій з електронами провідності (*F*-центри), із домішковими атомами й електронами провідності (*Z*-центри) або з дірками (*V*-центри). Центри забарвлення можуть бути викликані також опроміненням кристалів.

У процесі росту кристала; при його пластичній деформації й у багатьох інших випадках можуть виникати дислокації. Дислокації є місцями скупчення домішок. Розподіл і поведження дислокацій при зовнішніх впливах визначає важливі механічні властивості кристалу, зокрема такі як міцність, пластичність і ін. Зокрема рухливість дислокацій визначає пластичність кристалів, скупчення дислокацій викликають поява внутрішніх напружень і руйнування кристалів. Проблема пластичного (тобто необоротного) плину кристалів металу вдалося вирішити, зв'язавши неї з рухом дислокацій. Дислокації перешкоджають процесам намагнічування й електричної поляризації завдяки взаємодії з границями доменів.

В кристалах дефекти викликають пружні деформації структури, що обумовлюють, у свою чергу, появу внутрішньої механічної напруги. Наприклад, точкові дефекти, взаємодіючи з дислокаціями, підвищують або знижують міцність кристалів. Дефекти у кристалах впливають на спектри поглинання, спектри люмінесценції, розсіювання світла в кристалі і т.д.,

змінюють електропровідність, теплопровідність, сегнетоелектричні властивості.

Необхідність керування дефектами структури (що необхідно особливо для напівпровідників) зумовлена тим, що дефекти суттєво впливають на такі параметри, як електропровідність, діелектричні і магнітні втрати енергії, електричну міцність та й на інші властивості напівпровідників, магнетиків та діелектриків, а також впливають на механічні параметри (міцність) металів. Тому деякі властивості твердих тіл є структурно-чутливими. Однак інші властивості (такі як щільність, теплоємність, пружні характеристики) незначно залежать від наявності дефектів. Їх називають структурно-нечутливими властивостями, тому що вони визначаються, в першу чергу, природою хімічного зв'язку, структурою та хімічним складом кристала. Дефекти структури можуть бути вкрай різноманітні. Іноді вони асоціюються один з іншим, так що важко буває навіть віднести їх до якось визначеного класу. Все ж таки можна поділити основні типи структурних дефектів за їхньою розмірністю.

На сьогоднішній день принципи функціонування засобів, що здійснюють оцінювання параметрів у штучно-неоднорідних середовищах непрямыми методами шляхом належної обробки результатів вимірювань, спеціалізують у відповідності до припущення про характер розподілу діелектричної проникності об'єктів дослідження. На практиці така апріорна інформація про об'єкт дослідження є доступною лише у небагатьох випадках, а невідповідність способу оцінювання параметрів припущенню про об'єкт дослідження може істотно спотворити результат. Тому методи обробки необхідно будувати на основі якомога більш узагальненої моделі. З аргументів, наведених вище, видно, що базовою моделлю для систем неруйнівного контролю та дистанційного зондування є рівняння Максвела з певними обмеженнями на геометрію та параметри, зумовлені технічними

аспектами реалізації вимірювань. Вчені розвинули багато методів для розв'язання таких рівнянь з метою моделювання реальних процесів за умови, що характеристики вимірювальної системи та параметри середовищ відомі.

Розв'язок рівнянь Максвелла дозволяє визначити розподіл електромагнітного поля та змоделювати реєстрацію даних у засобах вимірювання. Така пряма задача розсіювання належить до добре вивчених розділів в теорії диференціальних та інтегральних рівнянь. На відміну від прямих задач, обернену задачу розсіювання формулюють відносно невідомих параметрів (форма, матеріал, внутрішня структура) об'єкта дослідження за відомими даними про розсіяне поле навколо нього. Саме тому розв'язок обернених

задач розсіювання розглядають як найбільш раціональний підхід до створення методів обробки вимірювань у засобах, що здійснюють оцінювання параметрів середовищ непрямыми методами.

Очевидно, що через складність моделей процесів розсіювання неможливо знайти розв'язок оберненої задачі у явній формі, де результат був би поданий функцією вихідних даних - параметрів розсіяного поля. Тому строгим називають розв'язок багатовимірної оберненої задачі розсіювання, якщо його вдається звести до розв'язання тривіальних задач без спрощення самої моделі процесу розсіювання. При цьому необхідно, щоб такі тривіальні задачі задовольняли умовам існування та єдиності розв'язку.

Оскільки обернені задачі розсіювання належать до більш загального класу обернених задач, і з огляду на співвідношення між вихідними даними та шуканими параметрами, ці задачі є ще й істотно нелінійними. Без сумніву, їх необхідно розглядати як некоректні задачі. Відповідно постають питання про існування розв'язку, його єдиність та стійкість до похибок. Більшість із цих питань у теорії обернених задач досі залишаються без відповіді. Перелічені проблеми доведення існування та єдиності розв'язку стають особливо гострими для обернених задач розсіювання, що базуються на загальних, багатовимірних моделях. Сформулювати обернену задачу про

знаходження невідомих параметрів $\{e(x), s(x)\}$ штучно-неоднорідного середовища (у тому числі з втратами) можна за допомогою мінімізації нев'язки

$$\{\hat{\varepsilon}(x), \hat{\sigma}(x)\} = \arg \min_{\varepsilon(x), \sigma(x)} \|E_{scat}(x', \omega) - E_{synt}(x', \omega)\|, \quad (2.17)$$

$E_{scat}(x, \omega)$ та $E_{synt}(x, \omega)$ - результати вимірювань та синтезовані дані встановлені у відповідності до розв'язку прямої задачі, модель якої вибрано з огляду на особливості процесів розсіювання та технічні обмеження.

Враховуючи некоректність сформульованих обернених задач, доцільним видається пошук лише їх наближеного розв'язку. За наявності апріорних даних задачу мінімізації (2.17) модифікують, регуляризуючи розв'язок. Таку регуляризацию здійснюють методами Тихонова, Лаврентьєва і т.д. за умови гладкості шуканого розв'язку. Статистичний підхід до оцінювання параметрів методами максимуму апостеріорної ймовірності за наявності апріорної інформації

також дає можливість отримати регуляризований розв'язок .

З формулювання задачі мінімізації нев'язки випливає, що розв'язок оберненої задачі включає розв'язок добре вивченої прямої задачі [15]. Саме цим пояснюють той факт, що мінімізаційні підходи до розв'язання обернених задач розсіювання набули широкого розповсюдження як серед математиків, так і серед науковців-прикладників.

При цьому мінімізаційні підходи успадкували та ефективно розвивають багато інструментів з теорії інтегральних та диференціальних рівнянь, а також з теорії числового аналізу. Крім звичайних підходів, що базуються на методах Ньютона [15,16] та градієнтного спуску [18], існують методи, в яких задача мінімізації сформульована неявно, а розв'язок оберненої задачі розсіювання

зводиться до ітераційної схеми уточнення результату. Варто зазначити такі підходи як level-set method [19], гібридний метод [20,21] та метод найкращої підгонки [22] при різних параметризаціях невідомих функцій, або параметрично заданих поверхонь, де задовольняються граничні умови.

Очевидно, що функціонали нев'язки, які асоціюються з оберненими задачами розсіювання, мають багатоекстремальний характер, тому існує ймовірність знайти лише локальний екстремум, зокрема через властиву цим задачам сильну залежність від початкового наближення. Для вирішення багатоекстремальних задач застосовують генетичні алгоритми [23], що дозволяють досягнути прийняттого наближеного розв'язку у багатьох практичних задачах. Це особливо стосується розв'язку задачі синтезу розсіювачів, для яких задано характеристики розсіювання [24].

З метою систематизації аналізу відомих підходів до розв'язання обернених задач розсіювання їх класифіковано відповідно до розмірності оберненої задачі, способу представлення вихідних даних та використаної моделі процесів розсіювання.

За характером шуканої функції обернені задачі розсіювання плоских електромагнітних хвиль на плоско-неоднорідних середовищах прийнято умовно розділяти на два типи: обернені задачі, в яких шукана діелектрична проникність є неперервною функцією; обернені задачі для структур з однорідними електричними параметрами шарів, які можна трактувати як задачі реконструкції кусково-постійної діелектричної проникності. Можуть бути також і задачі змішаного.

Обернені задачі розсіювання стали предметом спеціального вивчення (як окремий розділ математики) на початку 50-х років. Значного прогресу в розвитку теорії одновимірних обернених задач розсіювання досягнуто завдяки доведенню теореми про існування операторів перетворення. Остатні дозволили звести розв'язок одновимірної оберненої задачі розсіювання до інтегрального рівняння Вольттери другого роду. Таке рівняння при

виконанні певних умов на шукану гладку функцію має єдиний розв'язок. І. Гельфанд, Б. Левітан та В.Марченко розвинули строгий метод встановлення радіального потенціалу в рівнянні Шредінгера за даними розсіювання, що характеризує взаємодію двох елементарних частинок.

Розвиток методів розв'язання обернених задач розсіювання відносно неперервної функції діелектричної проникності, в основному, пов'язаний з ідеями, покладеними в основу теорії одновимірних обернених задач для рівняння Шредінгера, та відповідних спектральних задач для операторів Штурма-Ліувіля. Варто наголосити, що одновимірне рівняння Шредінгера є частковим випадком радіального рівняння Шредінгера при нульовому значенні кутового моменту. Окрім того, приведення одновимірного хвильового рівняння типу Гельмгольца до рівняння Шредінгера дозволяє використати методи інтегральних рівнянь Гельфанда-Левітана та Марченка для реконструкції неперервної функції діелектричної проникності.

Особливими випадками в теорії потенціального розсіювання є спеціальні Баргманівські потенціали для рівняння Шредінгера, які дозволяють обернену задачу розсіювання розв'язати строго у явній формі.

Відомо, що якщо задано комплексний коефіцієнт відбиття $R(\omega)$ заумови нормального падіння на плоско-неоднорідну структуру, то неперервну функцію діелектричної проникності можна відновити єдиним чином, а обернену задачу розсіювання можна вважати тривіальною. Твердження про єдиність впливає з властивості самоспряженості задачі та теореми Левінсона.

Поряд із застосуванням теорії Гельфанда-Левітана та Марченка до одновимірного акустичного рівняння розвинуто й інші методи встановлення неперервної функції коефіцієнтів хвильових рівнянь, які також зводяться до інтегральних рівнянь типу Вольтерра другого роду. Спочатку виведення таких методів базувалося на твердженнях функціонального аналізу, а згодом нові розв'язки отримано за допомогою теорії операторів та теорії функцій комплексної змінної, де ключову роль відіграла задача Гільберта-Рімана.

Для цього за вихідними даними визначено імпульсну характеристику плоско-неоднорідної структури як

$$r(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R(k) \exp(ikz) dk. \quad (2.18)$$

На жаль, всі ці методи використовують інтегральні рівняння Вольттера другого роду і, як встановлено в роботі не дозволяють вирішити обернену задачу відносно шуканих функцій, що містять особливості - розриви в точках розташування поверхонь розділу середовищ.

Крім того, наявність втрат у середовищі переводить обернену задачу розсіювання в клас несамоспряжених задач, що істотно ускладнює їх розв'язок.

2.3 Висновки по 2 розділу

Проаналізовані можливості низьковимірних моделей транспортування зовнішніх електромагнітних випромінювань у впорядкованих системах(кристалах) з детермінованими дефектами .Описані визнані підходи до аналізу відповідної задачі розсіювання,як аналітичні,так і експериментальні.Висвітлюються шукані зв'язки між параметрами розсіювання та характеристиками неоднорідностей.Обговорюються суттєві обмеження,щодо існуючих підходів і моделей з урахуванням реальної природи детектуємих систем і середовищ.

РОЗДІЛ 3 ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ДЕТЕКТУВАННЯ ДОМІШКОВИХ ВКЛЮЧЕНЬ ЗА ДОПОМОГОЮ ХАРАКТЕРИСТИК РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ВИПРОМІНЮВАНЬ В ШТУЧНО-НЕОДНОРІДНИХ СЕРЕДОВИЩАХ

3.1 Використання чисельних методів щодо моделювання та дослідження параметрів штучно-неоднорідних середовищ

На сьогоднішній день принципи функціонування засобів, що здійснюють оцінювання параметрів середовищ непрямыми методами шляхом належної обробки результатів вимірювань, спеціалізують у відповідності до припущення про характер розподілу діелектричної проникності об'єктів дослідження. На практиці така апіорна інформація про об'єкт дослідження є доступною лише у небагатьох випадках, а невідповідність способу оцінювання параметрів припущенню про об'єкт дослідження може істотно спотворити результат. Тому методи обробки необхідно будувати на основі якомога більш узагальненої моделі. З аргументів, наведених вище, видно, що базовою моделлю для систем неруйнівного контролю та дистанційного зондування є рівняння Максвелла з певними обмеженнями на геометрію та параметри, зумовлені технічними аспектами реалізації вимірювань. Розвинуто багато методів для розв'язання таких рівнянь з метою моделювання реальних процесів за умови, що характеристики вимірювальної системи та параметри середовищ відомі. Розв'язок рівнянь Максвелла дозволяє визначити розподіл електромагнітного поля та змоделювати реєстрацію даних у засобах вимірювання. Така пряма задача розсіювання належить до добре вивчених розділів в теорії диференціальних та інтегральних рівнянь. На відміну від прямих задач, обернену задачу розсіювання формулюють відносно невідомих параметрів (форма, матеріал, внутрішня структура) об'єкта дослідження за відомими даними про розсіяне поле навколо нього. Саме тому розв'язок обернених задач розсіювання розглядають як найбільш раціональний підхід до створення методів обробки

вимірювань у засобах, що здійснюють оцінювання параметрів середовищ непрямыми методами. Очевидно, що через складність моделей процесів розсіювання неможливо знайти розв'язок оберненої задачі у явній формі, де результат був би поданий функцією вихідних даних - параметрів розсіяного поля. Тому строгим називають розв'язок багатовимірної оберненої задачі розсіювання, якщо його вдається звести до розв'язання тривіальних задач без спрощення самої моделі процесу розсіювання. При цьому необхідно, щоб такі тривіальні задачі задовольняли умовам існування та єдиності розв'язку.

Оскільки обернені задачі розсіювання належать до більш загального класу обернених задач, і з огляду на співвідношення між вихідними даними та шуканими параметрами, ці задачі є ще й істотно нелінійними. Без сумніву, їх необхідно розглядати як некоректні задачі [12]. Відповідно постають питання про існування розв'язку, його єдиність та стійкість до похибок. Більшість із цих питань у теорії обернених задач досі залишаються без відповіді. Перелічені проблеми доведення існування та єдиності розв'язку стають особливо гострими для обернених задач розсіювання, що базуються на загальних, багатовимірних моделях.

Сформулювати обернену задачу про знаходження невідомих параметрів

$\epsilon(x), \sigma(x)$ діелектрика (у тому числі з втратами) можна за допомогою мінімізації нев'язки

$$\{\hat{\epsilon}(x), \hat{\sigma}(x)\} = \arg \min_{\epsilon(x), \sigma(x)} \|E_{scat}(x', \omega) - E_{synth}(x', \omega)\| \quad (3.1)$$

де $E_{scat}(x', \omega)$, та $E_{synt}(x', \omega)$ - результати вимірювань та синтезовані дані встановлені у відповідності до розв'язку прямої задачі, модель якої вибрано з огляду на особливості процесів розсіювання та технічні обмеження. Враховуючи некоректність сформульованих обернених задач, доцільним видається пошук лише їх наближеного розв'язку. За наявності апріорних даних задачу мінімізації (3.1) модифікують, регуляризуючи розв'язок. Таку регуляризацію здійснюють методами Тихонова [12], Лаврентьєва [13] і т.д. за умови гладкості шуканого розв'язку. Статистичний підхід до оцінювання параметрів методами максимуму апостеріорної ймовірності за наявності апріорної інформації також дає можливість отримати регуляризований розв'язок [14].

З формулювання задачі мінімізації нев'язки впливає, що розв'язок оберненої задачі включає розв'язок добре вивченої прямої задачі [15]. Саме цим пояснюють той факт, що мінімізаційні підходи до розв'язання обернених задач розсіювання набули широкого розповсюдження як серед математиків, так і серед науковців-прикладників. При цьому мінімізаційні підходи успадкували та ефективно розвивають багато інструментів з теорії інтегральних та диференціальних рівнянь, а також з теорії числового аналізу. Крім звичайних підходів, що базуються на методах Ньютона [16,17] та градієнтного спуску [18], існують методи, в яких задача мінімізації сформульована неявно, а розв'язок оберненої задачі розсіювання зводиться до ітераційної схеми уточнення результату. Варто зазначити такі підходи як level-set method [19], гібридний метод [20,21] та метод найкращої підгонки [22] при різних параметризаціях невідомих функцій, або параметрично заданих поверхонь, де задовольняються граничні умови.

Очевидно, що функціонали нев'язки, які асоціюються з оберненими задачами розсіювання, мають багатоекстремальний характер, тому існує ймовірність знайти лише локальний екстремум, зокрема через властиву цим

задачам сильну залежність від початкового наближення. Для вирішення багатоекстремальних задач застосовують генетичні алгоритми [23], що дозволяють досягнути прийняттого наближеного розв'язку у багатьох практичних задачах. Це особливо стосується розв'язку задачі синтезу розсіювачів, для яких задано характеристики розсіювання [24].

За характером шуканої функції обернені задачі розсіювання плоских

електромагнітних хвиль на плоско-неоднорідних середовищах прийнято умовно розділяти на два типи: обернені задачі, в яких шукана діелектрична проникність є неперервною функцією; обернені задачі для структур з однорідними електричними параметрами шарів, які можна трактувати як задачі реконструкції кусково-постійної діелектричної проникності. Можуть бути також і задачі змішаного типу

3.2 Детектування домішок та дефектів(в якості моделей шкідливих забруднень) в неоднорідних середовищах

Практично важливою є задача, яка полягає у точному встановленні параметрів розривів (стрибків) у кусково-постійних функціях матеріальних параметрів, або, іншими словами, ідентифікації параметрів багатошарової структури. Найбільш помітного прогресу у розв'язанні обернених задач розсіювання електромагнітних хвиль на середовищах з контрастними границями розділу досягнуто в роботах Krueger , Грінберг , Aktosun та Cheney . Ідея пошарового «зрізання» (layer stripping, layer peeling) [7] може служити поясненням багатьох методів, спрямованих на реконструкцію кусково-постійних середовищ. Однак відомо, що метод пошарового

«зрізання» є потенційно нестійким і може призводити до розбіжності процедури реконструкції . Велика кількість методів розв'язування обернених задач з кусково-постійною функцією діелектричної проникності ґрунтуються

на дискретній моделі, що передбачає спеціальний кусково-постійний характер шуканих функцій. Як дискретну модель розглядають окремий підклас кусково-постійних функцій, в яких розриви розташовуються лише у вузлах деякої регулярної сітки.

Для прикладу наведемо два методи розв'язання оберненої задачі розсіювання у дискретній формі.

Перший метод . Вважаючи, що імпульсну характеристику багат шарової структури задано як вихідні дані у дискретному вигляді R_0, R_1, R_2, \dots , розв'язок оберненої задачі розсіювання також шукатимемо у дискретному вигляді. Основою цього методу є система рівнянь

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & 0 & \\ & 0 & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} & & & R_0 \\ & 0 & R_0 & R_1 \\ & R_0 & \ddots & \vdots \\ R_0 & R_1 & \dots & R_{k-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K(k, 2-k) \\ K(k, 4-k) \\ \vdots \\ K(k, k) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -R_0 \\ -R_1 \\ \vdots \\ -R_{k-1} \end{bmatrix}, \quad (3.2)$$

де K - невідомі коефіцієнти.

За знайденим розв'язком рівняння (3.2) встановлюємо коефіцієнти відбиття кожної з поверхонь розділу, що знаходяться у вузлах регулярної сітки:

$$r_{k-1} = \frac{1}{\prod_{i=0}^{k-2} (1-r_i)^2 [1+K(k,k)]} - 1. \quad (3.3)$$

Відповідно, характеристичний опір ρ_i^+ кожного наступного шару структури можна знайти з коефіцієнта відбиття $r_i = \frac{\rho_i^- - \rho_i^+}{\rho_i^- + \rho_i^+}$, знаючи величину характеристичного опору попереднього шару ρ_i^- . Більш загальним є підхід,

описаний у роботі [7]. Тут передбачені випадки опромінювання структур послідовністю δ -функцій. Пряму задачу розсіювання для такої моделі розв'язано у попередньому пункті. Умову причинності у дискретній формі можна подати як $U_{i+1,j+1}^+ = 0$ при $i = j$.

Підставляючи цю умову в рівняння

$$\begin{bmatrix} D_{i+1,j+1}^+ \\ U_{i+1,j+1}^+ \end{bmatrix} = Q_{i+1} \begin{bmatrix} D_{i,j}^+ \\ U_{i,j+2}^+ \end{bmatrix}. \quad (3.4),$$

можна переконатися, що має місце наступна тотожність:

$$(\rho_{i+1}^+ - \rho_{i+1}^-) / (\rho_{i+1}^+ + \rho_{i+1}^-) = U_{i,i+2}^+ / D_{i,i}^+. \quad (3.5)$$

Такий запис означає, що лише інформація про характеристичний опір попереднього шару $\rho_{i+1}^- = \rho_i^+$ та параметри хвиль у ньому дозволяють встановити характеристичний опір наступного шару ρ_{i+1}^- .

Тепер процедуру реконструкції характеристичного опору всіх шарів структури типу Гопіллауд можна сформулювати як рекурсивну послідовність обчислень. Припустимо, що функції $D_{0,j}^+$ та $U_{0,j}^+$ є відомими у відповідності до постановки оберненої задачі розсіювання. Починаючи з першого шару $i = 0$, для якого величина ρ_0^+ є відомою, наступне значення ρ_1^+ можна знайти на основі приведених вище формул. Таку процедуру обчислень можна рекурентно повторювати, при цьому кожен цикл включатиме два кроки:

1. Визначення характеристичного опору кожного наступного шару $(i + 1)$ у відповідності до виразу (3.5):

$$\rho_{i+1}^+ = \rho_i^+ (D_{i,i}^+ + U_{i,i+2}^+) / (D_{i,i}^+ - U_{i,i+2}^+). \quad (3.6)$$

2. Обчислення всіх величин $D_{i+1,j+1}^+$ та $\Gamma_{i+1,j+1}^+$ $j=1,N$ згідно з формулою (1.20), коли $(i+j)$ є парною величиною:

$$\begin{bmatrix} D_{i+1,j+1}^+ \\ U_{i+1,j+1}^+ \end{bmatrix} = \frac{1}{2\rho_i^+} \begin{bmatrix} (\rho_{i+1}^+ + \rho_i^+) & -(\rho_{i+1}^+ - \rho_i^+) \\ -(\rho_{i+1}^+ - \rho_i^+) & (\rho_{i+1}^+ + \rho_i^+) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_{i,j}^+ \\ U_{i,j+2}^+ \end{bmatrix}. \quad (3.7)$$

Знайшовши значення характеристичного опору для кожного шару ρ_i , остатній крок реконструкції полягає у встановленні діелектричної проникності ϵ_i та метричного значення ширини z_i кожного шару. Формули є тривіальними

$$\epsilon_i = \frac{\mu_0 \mu}{\epsilon_0 (\rho_i^+)^2} \quad \text{та} \quad z_i = \frac{\Delta \tau}{\sqrt{\mu_0 \mu \epsilon_0 \epsilon_i}}. \quad (3.8) \text{ та } (3.9)$$

Результати реконструкції функції діелектричної проникності для тришарової структури показано на рис. 1.5. Їх порівняно з оригінальною функцією діелектричної проникності для двох сценаріїв числового експерименту: без шуму (рис. 3.1.а) та за умови високого рівня шуму (рис. 3.1.б). Вихідні дані для цих двох випадків визначено як дискретні відліки коефіцієнта відбиття, які задано на сітці частот від нуля до 50 ГГц з кроком 0.1 ГГц. З рис. 3.1 (точкова лінія) видно, що метод «зрізання шарів», який базується на дискретному перетворенні Фур'є, для встановлення імпульсної характеристики досліджуваної структури є дуже чутливим до наявної випадкової складової у вихідних даних. Крім того, феномен Гібса, що спостерігається при реконструкції, утруднює інтерпретацію кривої діелектричного профілю (рис. 3.1.а, пунктирна лінія).

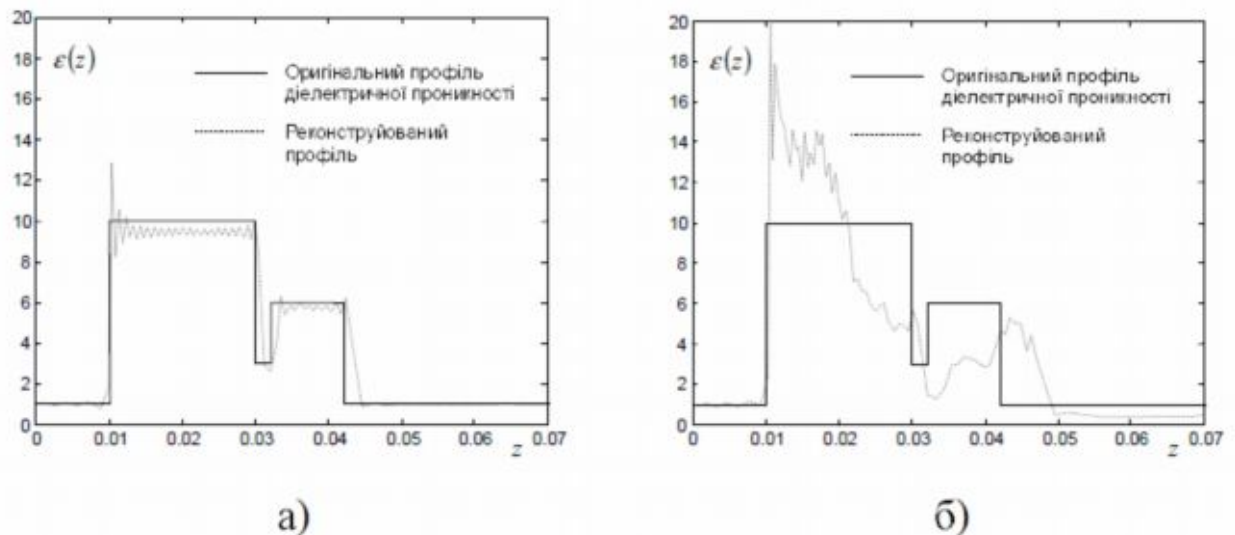


Рисунок 3.1. Приклад реконструкції діелектричної проникності для тришарової структури за умови вимірювання коефіцієнта відбиття в обмеженому діапазоні частот: без шуму – а) і при наявній шумовій складовій з відношенням «сигнал/шум» 1дБ – б).

Суцільною лінією показано шуканий профіль діелектричної проникності, а пунктирною – результати реконструкції дискретним методом розв’язання оберненої задачі [7].

Підсумовуючи аналіз дискретних методів розв’язання оберненої одновимірної задачі, зазначимо, що для їх реалізації необхідно за частотною залежністю коефіцієнта відбиття встановити безмежну кількість коефіцієнтів ряду, яким відповідає імпульсна характеристика. Однак випадкова похибка у вимірних даних для обмеженого діапазону частот не дозволяє точно оцінити коефіцієнти, особливості, які мають відносно невелику амплітуду. Це призводить до характерних спотворень розв’язку, або до розбіжності ітераційного процесу при розв’язанні оберненої задачі методом пошарового зрізання.

Описаний дискретний підхід дозволяє відновлювати розривну функцію діелектричної проникності багатошарової структури, а також дає можливість

отримати наближений розв'язок задачі реконструкції неперервних функцій діелектричної проникності.

3.3 Висновки по 3 розділу

Показано, що наявність детермінованої неоднорідності, завданої локальними розподілами дозволяє в першому наближенні, встановити якісні залежності між спектральними параметрами та характеристиками функцій неоднорідності. Проблема розглянута на прикладі зворотної задачі розсіяння в кусочно-неоднорідній системі (прикладом якої є квазі-одновимірна шарово-періодична структура, чи супергратка) у дискретній формулюванні.

ВИСНОВКИ

1. Задачу про розповсюдження випромінювань у неоднорідних середовищах запропоновано спрямувати для детектування власних параметрів неоднорідностей що є актуальним в задачах моніторингу та захисту навколишнього середовища від шкідливих (зокрема, фізичних) забруднень.

2. Проаналізовані можливості низьковимірних моделей транспортування випромінювань в системах, де існує штучно завданя (наприклад, у вигляді багаточислової квазі-одновимірної структури, суперґратки, домішок, дефектів) неоднорідність (структуризація) що до визначення власних параметрів неоднорідностей за допомогою характеристик самого випромінювання (коефіцієнтів проходження та відбиття, структури спектра) .

3. Показано, що наявність детермінованої неоднорідності, завданої локальними розподілами дозволяє в першому наближенні, встановити якісні залежності між спектральними параметрами та деякими характеристиками (моентами) функцій неоднорідності .

4. Обґрунтований вище підхід пропонується до застосування в якості інструменту виявлення та ідентифікації.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц / Р. Ньютон. - М: Мир, 1969. – 600 с.
2. Chadan K. Inverse problem in quantum scattering theory / K. Chadan, P.C. Sabatier. Springer-Verlag: New-York, 1997. – 347 p.
3. Захаров В.Е. Точная теория двумерной самофокусировки в одномерной автомодуляции волн в нелинейных средах / В.Е. Захаров, А.Б. Шабат // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 1971. – Вып. 61, № 1(7). – С. 118-134.
4. Ablowitz M.J. The inverse scattering transform-Fourier analysis for nonlinear problems / M.J. Ablowitz, D.J. Kaup, A.C. Newell, H. Segur // Studies in Appl. Math. – 1974. – Vol. 53, No. 4. - P. 249-315
5. Faddeev L.D. Quantum theory of solitons / L.D. Faddeev, V.E. Korepin // Physics Reports. - 1978. – Vol. 42, Issue 1. – P. 1–87.
6. Thaller B. The Dirac Equation / B. Thaller. – Berlin, Springer, 1992. - 357 p.
7. Gladwell G.M.L. Inverse problems in scattering: An introduction / G.M.L. Gladwell.– Springer, 1993. – 380 p.
8. Orfanidis S.J. Electromagnetic waves and antennas / S.J. Orfanidis. - Piscataway, NJ:Rutgers University Press, 2008. – 973 p.
9. Бреховских Л.М. Акустика слоистых сред / Л.М. Бреховских, Л.М. Годин. - М.:Наука, 1989. – 416 с.
10. Cui T.J. Nonlinear differential equation for the reflection coefficient of an inhomogeneous lossy medium and its inverse scattering solutions / T.J. Cui, C.H. Liang // IEEE Trans. Antenna and propagations. - 1994. - Vol.42, No.5. -

P. 621-626.

11.Goupillaud P.L. An approach to inverse filtering of near-surface segment effects from
from

seismic records / P.L. Goupillaud // *Geophysics*. – 1961. – Vol.26, No.6 – P.754–760.

12.Тихонов А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов,
В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1986. – 287 с.

13.Lavrentiev M.M. Some improperly posed problems of mathematical physics /
M.M. Lavrentiev. - New York, NY: Springer, 1967. -75 p.

14.Synyavskyy A. Wavelet-based MAP image denoising using provably better class
of stochastic I.I.D. image models / A. Synyavskyy, S. Voloshynovskiy, I. Prudyus //
Facta Universitatis Series: Electronics And Energetics. – 2001. - Vol. 14. No. 3. -
P. 375-385.

15.Blohbaum J. Optimisation methods for an inverse problem with time-harmonic
electromagnetic waves: an inverse problem in electromagnetic scattering /

16.J. Blohbaum // *Inverse problems*. - 1989. – Vol. 5, No 4. - P. 463-482.

Farhat C. On the solution of three-dimensional inverse obstacle acoustic scattering
problems by a regularized Newton method / C. Farhat, R. Tezaur, R. Djellouli //
Inverse Problems. - 2002. - Vol. 18, No 5. – P. 1229–1246.

17.Gutman S. Two versions of quasi-Newton method for multidimensional inverse
scattering problem / S. Gutman, M. Klibanov // *J. Comput. Acoust.* - 1993. - Vol. 1,
No. 2 - P. 197-228.

18.van den Berg R. Gradient methods in inverse acoustic and electromagnetic
scattering/ R. van den Berg, R. Kleinman // *Large-scale optimization with*

applications, Part I: Optimization in inverse problems and design (eds. Biegler [et al.]). – Berlin:Springer, 1977. – P. 173–194.

19.Dorn O. Level set methods for inverse scattering. Topical review / O. Dorn, D. Lesselier // *Inverse Problems*. - 2006. - Vol. 22. – P. R67-R131.

20.Serranho P. A hybrid method for inverse scattering for shape and impedance / P. Serranho // *Inverse Problems*. – 2006. - Vol. 22, No 2. – P. 663–680.

21.Chapko R. A hybrid method for inverse boundary value problems for an inclusion in semi-infinite two-dimensional domains / R. Chapko, N. Vintonyak // *Journal of Integral Equations and Applications*. - 2007. – Vol. 19, No 3. – P. 309-331.

22.Ramm A.G. Optimization methods in direct and inverse scattering / A.G. Ramm, S. Gutman // *Continuous Optimization*. - 2005. – Vol. 99. – P. 51-110.

23.Goldberg D.E. Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning / D.E.Goldberg. –Boston, MA: Addison-Wesley, 1989. – 412 p.

24.Chakravarty S. Application of a microgenetic algorithm (MGA) to the design of broad-band microwave absorbers using multiple frequency selective surface screens buried in dielectrics / S. Chakravarty, R. Mittra, N.R. Williams // *IEEE Trans. On Antennas and Propagation*. - 2002. - Vol. 50. - P. 284-296.

25. Синявський А. Т. Математичні моделі для підвищення ефективності оцінки параметрів неоднорідних середовищ за відомим розподілом розсіяного електромагнітного поля : автореф. дис. ... д-ра техн. наук : 01.05.02 / Синявський Андрій Тадейович ; Нац. ун-т "Львів. політехніка". - Львів, 2016. - 40с.http://www.lp.edu.ua/sites/default/files/dissertation/2016/2662/dys_synyavskyy_a.t.pdf