ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

РЕКЛАМНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ

Конструктор Meccano

.03524577.02493-01 99 01

Листов 10

Разработчик:

_____ /Соловьев А.В./

08.06.2008

Петрозаводск 2008

1. Функциональное назначение программы, область применения, её ограничения

В основе спектроскопической диагностики плазмы лежит совокупность методов, позволяющая по оптическим характеристикам (спектральная энергетическая яркость поверхности источника в направлении наблюдения $b(\lambda)$, оптическая толщина плазмы $\tau(\lambda)$, доля рассеянного излучения $P(\theta,\lambda)$, набег фазы просвечивающей волны $\Phi(\lambda)$, угол отклонения луча при прохождении через плазму α и др.) определить локальные и мгновенные значения её основных параметров (концентрации электронов N_e, ионов N_i, атомов в основном N_a и возбуждённом N^* состояниях, а также параметры законов распределения их по энергиям T_e и T_a). Полученные значения и распределения параметров позволяют проверить или построить физическую модель плазмообразующей среды и описать происходящие в ней явления.

Конструктор Meccano предназначен для моделирования аксиально-симметричного источника неоднородной плазмы в результате чего возможно получение пространственных распределений параметров элементарного объёма плазмы на основе её оптических характеристик. Пользователь выбирает модели элементарного объёма, источника и аппаратуры, которые задаются некоторым числом свободных параметров, программа рассчитывает ожидаемые массивы отсчётов и сопоставляет их с экспериментальными. Варьируя свободные параметры, можно добиться наилучшего совпадения с экспериментом, что и позволяет определить эти параметры, решив, таким образом, описанную выше задачу спектроскопической диагностики плазмы.

В качестве базовой платформы выбран язык Java. Он обеспечивает кроссплатформенность и мобильность модулей, а также их лёгкую интеграцию в веб-приложения. Приложение на языке Java строится из отдельных заменяемых блоков – классов.

Конструктор состоит из трех типов «кубиков»:

- «кубики», описывающие процессы уширения;
- «кубики», описывающие аппаратные искажения;
- «кубики», реализующие вспомогательные процедуры пост-обработки функций.

Конструктор автоматически находит «кубики» перечисленных типов и подключает их при старте программы.

Базовой оптической характеристикой элементарного объёма является контур спонтанного излучения тонкого слоя $\varphi(\lambda,r)$. Предполагается, что на формирование контура влияет ряд независимых процессов, поэтому контур тонкого слоя представляет собой свёртку контуров, порождаемых каждым процессом в отдельности. Каждый такой процесс в программе описывается отдельным «кубиком» Broad*.class. Возможно добавление

или изменение отдельных «кубиков» без перекомпиляции всего проекта. В настоящий момент программа поставляется со следующими «кубиками», описывающими процессы уширения:

- Естественное уширение (BroadNatural) задаётся параметром сумма вероятностей спонтанных переходов γ:

$$\varphi_N(\lambda) = \frac{\gamma}{2\pi} \cdot \frac{1}{\frac{4\pi^3 c^2 (\lambda - \lambda_0)^2}{\lambda^2 \lambda_0^2} + \frac{\gamma^2}{4}} \tag{1}$$

- Доплеровское уширение (BroadDoppler) определяется атомной температурой T_a (К) и молярной массой излучающего газа M (г/моль). В этом процессе учитывается, что параметры плазмы могут меняться по объёму источника. Это отражается в зависимости атомной температуры от расстояния от оси источника. При расчёте уширения программа подставляет значение атомной температуры для данного слоя, рассчитанное в соответствии с выбранной моделью параметров, определяемой в классе PlasmaSource.

$$\varphi_D(\lambda, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{c}{\lambda_0} \sqrt{\frac{M/\eta_A}{\chi \cdot T_a(x)}} \cdot \exp\left\{ -\frac{M/\eta_A}{\chi \cdot T_a(x)} \cdot \frac{c^2 (\lambda - \lambda_0)^2}{2\lambda^2} \right\} \tag{2}$$

- Уширение из-за эффекта Штарка (BroadStark) реализовано в виде модели, которая учитывает два процесса: столкновение с электронами, вызывающее адиабатическое смещение атомных уровней – ударное приближение $\varphi_{Si}(\lambda,r)$, и столкновение с ионами, описываемое статическим приближением $\varphi_{Ss}(\lambda,r)$. Пользователь должен определить: C_4 – константу штарковского уширения (см^4/с) и N_e – концентрацию электронов (см$^{-3}$). Концентрация ионов N_i выбирается равной концентрации электронов. Учёт одновременного действия электронов и ионов рассчитывается как свёртка функций $\varphi_{Si}(\lambda,r)$ и $\varphi_{Ss}(\lambda,r)$:

$$\varphi_{Si}(\lambda) = \frac{w}{2\pi} \cdot \frac{1}{\left(\lambda - \lambda_0 - \frac{w}{1{,}15}\right)^2 + \frac{w^2}{4}}, \; w = 11{,}4 \cdot C_4^{2/3} V_e^{1/3} N_e \frac{\lambda^2}{2\pi c} \tag{3}$$

$$\varphi_{Ss}(\lambda) = \frac{\pi\beta\lambda^{3/2}}{(\lambda - \lambda_0)^{7/4}} \cdot \exp\left(-\frac{4\pi\beta\lambda^{3/2}}{3(\lambda - \lambda_0)^{3/4}} \right), \; \beta = \frac{N_i C_4^{3/4}}{(2\pi c)^{3/4}} \tag{4}$$

- Резонансное уширение (BroadResonance) рассчитывается на основе следующих параметров: f_{oa} – сила осциллятора перехода между основным и резонансным уровнями, g_o/g_a – отношение статистических весов этих уровней. Концентрация атомов N_a рассчитывается на основе выбранной модели источника.

$$\varphi_R(\lambda,x)=\frac{\gamma(x)}{2\pi}\cdot\frac{1}{\frac{4\pi^3c^2(\lambda-\lambda_0)^2}{\lambda^2\lambda_0^2}+\frac{[\gamma(x)]^2}{4}},\ \gamma(x)=\frac{\lambda_0e^2f_{oa}N_a(x)}{2m_ec}\sqrt{\frac{g_o}{g_a}} \tag{5}$$

- В случае уширения Ван-дер-Ваальса (BroadVanDerWaals) центр линии и короткие длины волн описываются ударным приближением $\varphi_{Vi}(\lambda,r)$. Для длинноволнового крыла уширения используется статическое приближение $\varphi_{Vs}(\lambda,r)$. В параметрах уширения пользователь задаёт: C_6 – константу уширения Ван-дер-Ваальса (см^6/с), κ – долю излучающих атомов, M_d – молярную массу возмущающих атомов (г/моль). Если уширение вызвано взаимодействием с собственными атомами излучающего газа (κ=0), концентрация возмущающих атомов выбирается равной концентрации излучающих атомов (N_d=N_a). Средняя скорость возмущающих атомов $V_d(x)=\sqrt{2\chi T_a(x)\eta_A/M_d}$ и концентрация возмущающих атомов $N_d(x)=\frac{(1-\kappa)p}{\chi T_a(x)}$ рассчитываются с учётом пространственного изменения параметров элементарного объёма в соответствии с выбранной моделью. Это отражается в зависимости атомной температуры от расстояния от оси источника (p – общее давление (дин/см^2)):

$$\varphi_{Vi}(\lambda,x)=\frac{\gamma(x)}{2\pi}\cdot\frac{1}{\left(\lambda-\lambda_0-\frac{\gamma(x)}{2,8}\right)^2+\frac{[\gamma(x)]^2}{4}},\ \gamma(x)=\frac{4,08}{\pi c}C_6^{2/5}[V_d(x)]^{3/5}N_d(x)\lambda_0^2 \tag{6}$$

$$\varphi_{Vs}(\lambda,x)=\frac{\sqrt{2\pi C_6}N_d(x)\lambda}{3\sqrt{c}(\lambda-\lambda_0)^{3/2}} \tag{7}$$

- Сложная структура линии, обусловленная наличием изотопов (BroadIsotope), моделируется псевдоуширением, определяемым по параметрам: Y_j, λ_{oj} – интенсивность (отн. ед.) и положение (см) компоненты сложной линии, обусловленной j-м изотопом, m – количество учитываемых изотопов, $\Delta\lambda$ – шаг по длине волн (см).

$$\varphi_I(\lambda)=\sum_{j=1}^{m}Y_j\exp\left(-\frac{(\lambda-\lambda_{oj})^2}{(\Delta\lambda)^2}\right) \tag{8}$$

Ядром программы является класс PlasmaSource, описывающий модель источника плазмы. Источник плазмы представляется в виде концентрических слоёв, каждый из которых считается оптически плотным однородным источником излучения. Количество слоёв источника задаётся пользователем. Имеются два варианта модели: аксиально-симметричный источник по модели локального термодинамического равновесия (T_a=T_e) и аксиально-симметричный источник, для которого условие ЛТР не

выполняется ($T_a \neq T_e$). В этом случае для каждого из излучающих уровней вводится условный параметр Te, описывающий заселённость уровня. Пользователь задаёт распределение этих условных параметров (электронной и атомной «температур») в виде:

$$T(r) = T_0 - (T_0 - T_R) \cdot \left(\frac{r}{R}\right)^{\alpha}, \tag{9}$$

где T_0 – температура в центре, T_R – температура на краю, α – степень зависимости.

Для каждого слоя на расстоянии r от оси источника считаются температуры $T_a(r)$, $T_e(r)$, а по ним в соответствии с уравнением Больцмана заселённости верхнего N_j и нижнего N_k уровней перехода:

$$N_i(r) = N_0(r)\frac{g_i}{g_0} \cdot \exp\left\{-\frac{E_i}{\chi \cdot T_e(r)}\right\},\ i=j,\ k, \tag{10}$$

где g_j, g_k – статистические веса уровней перехода, g_0 – статистический вес основного уровня, E_j, E_k – энергии уровней перехода, $N_0(r) = \frac{\kappa p}{\chi \cdot T_a(r)}$ – концентрация излучающих атомов в основном состоянии (κ – доля излучающих атомов).

Эти параметры передаются модулем PlasmaSource другим блокам программы («кубикам», описывающим уширения). Таким способом учитывается возможность изменения параметров плазмы по объёму источника. В результате для каждого слоя определяется функция контура спонтанного излучения $\varphi(\lambda,r)$.

Для получения результата, наблюдаемого на выходе спектроскопического прибора, используется одна из следующих аппаратных функций:

- SpreadFabriPerot – пропускание интерферометра Фабри – Перо:

$$J_{IFP}(\lambda, y) = \frac{(1-R)^2}{(1-R)^2 + 4R\sin\frac{2\pi dn}{\lambda}\left(1 - \frac{(y+a)^2}{2F^2}\right)}, \tag{11}$$

  где R – коэффициент отражения зеркал ИФП, n –коэффициент преломления среды ИФП, d – база интерферометра (см), F – фокусное расстояние рисующей линзы (см), a – смещение центра ИФП от оси источника (см).

- SpreadStub – «заглушка» аппаратной функции:

$$J_{stub}(\lambda, y) = 1 \tag{12}$$

- SpreadGauss – аппаратная функция типа контура Гаусса:

$$J_G(\lambda, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left(-\frac{(\lambda-\lambda_0)^2}{2\sigma^2}\right), \tag{13}$$

  где σ – ширина контура (см).

- SpreadLorentz – аппаратная функция типа контура Лоренца:

$$J_L(\lambda, y) = \frac{w}{2\pi} \frac{1}{(\lambda - \lambda_0)^2 + w^2/4} \tag{14}$$

где w – ширина контура (см).

На основе описанного конструктора собрано два варианта модели. В первом варианте программы (Meccano1) рассчитывается распределение спектральной энергетической яркости поверхности источника для указанного сечения по длинам волн – $B_\rho(\lambda)$ с учётом аппаратных искажений:

$$I(\lambda') = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} B_y(\lambda) J(\lambda' - \lambda) d\lambda \tag{15}$$

Диапазон моделирования [λ_1, λ_2] задаётся центром линии λ_0, размером выборки по длине волны M и шагом по шкале длин волн $\Delta\lambda$ (см): $\lambda_{1,2} = \lambda_0 \pm \frac{M}{2}\Delta\lambda$. Если включена опция «Использовать БПФ», используется реализация свёртки через быстрое преобразование Фурье, поэтому M должно быть степенью 2 (…, 128, 256, 512, …) В противном случае M может быть произвольным. В этом варианте возможен учёт нескольких типов аппаратных искажений, что позволяет, например, смоделировать одновременное действие аппаратной функции ИФП и спектральной ширины сканирующей щели в спектрометре изображения.

Во втором варианте программы (Meccano2) рассчитывается интегральное распределение спектральной энергетической яркости по поверхности источника $B(y)$ с учётом аппаратных искажений:

$$I(y) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} B_y(\lambda) J(\lambda, y) d\lambda \tag{16}$$

Диапазон моделирования [y_1, y_2] задаётся непосредственно значениями y_1 – левая позиция на графике и y_2 – правая позиция на графике, а также N – размер выборки (количество точек) на графике.

Основное поле главного окна программы – область графиков (рис. 1, поз. 1). При выполнении каждого нового расчёта в этой области появляется новый график. Цвета графиков выбираются циклически из списка: синий, красный, голубой, оранжевый, тёмно-серый, фиолетовый, зелёный, розовый. Графики пронумерованы от нуля, и один из них является текущим. Порядок следования графиков показан в цветном поле в правой части области графиков (рис. 1, поз. 2). В цветном квадрате текущего графика стоит белая точка. Номер текущего графика выводится в строке статуса (рис. 1, поз. 6). Для текущего графика можно отследить значение функции. Щёлкнув левой кнопкой мыши по области графика, пользователь получает в строке статуса значение функции для соответствующей абсциссы. При этом курсор функции перемещается в указанную позицию. В строке статуса выводятся: X – значение абсциссы

(для графиков яркости – положение точки относительно центра источника в см, для спектров – длина волны в см), Y – значение функции (яркость в $\frac{эрг}{с \cdot см^2 \cdot ср \cdot см}$ или в относительных единицах), idx – номер соответствующего отсчёта.

Щелчок правой кнопкой мыши по области графика вызывает контекстное меню графика (рис. 1, поз. 3), которое содержит пункты: «Следующий» (Next), «Предыдущий» (Prev), «Удалить» (Delete), а также команды пост-обработки. Команды «Следующий» и «Предыдущий» устанавливают другой график в качестве текущего. Сделать график текущим можно также, щёлкнув по квадрату соответствующего цвета в правой части области графиков. Команда «Удалить» уничтожает данные текущего графика из памяти, при этом текущим становится очередной график.

Команды пост-обработки реализуются в виде «кубиков» и подключаются на стадии запуска программы. Реализованы следующие методы пост-обработки:

- PostProcessBkgnd – убрать фон (Eliminate background);
- PostProcessMaximize – увеличить (Maximize);
- PostProcessSmooth – сгладить (Smooth).

Масштаб графиков функций выбирается автоматически так, чтобы максимальное среди всех функций значение соответствовало верхней границе области графиков. При расчёте новой функции максимальное значение может измениться, тогда изменяется и масштаб графиков. Временно изменить масштаб можно при помощи вертикальной прокрутки. Сдвиг бегунка прокрутки вверх вызывает увеличение числа, соответствующего верхней границе области графиков в 2, 4, 8, 16 и 32 раза (уменьшение масштаба). Сдвиг бегунка прокрутки вниз вызывает уменьшение числа, соответствующего верхней границе графиков в 2, 4, 8 и 16 раз (увеличение масштаба). Бегунок вертикальной прокрутки влияет на отображение всей области графиков целиком. Работа команды пост-обработки «Увеличить» всегда применяется только к текущему графику в масштабе 1:1 вне зависимости от положения вертикального бегунка. Выбор максимального значения для верхней границы области графиков при работе команды пост-обработки «Увеличить», а также при отображении загружаемых из файла отсчётов происходит с учётом всего массива вне зависимости от того, какая его часть попадает в область графиков.

Для каждого массива отсчётов, отображаемого в области графиков, запоминаются количество отсчётов, шаг абсциссы, с которым следуют отсчёты, а также стартовое значение абсциссы. Для сравнения графиков друг с другом бывает удобно их смещать вдоль абсциссы относительно друг друга. Для этого можно воспользоваться полосой горизонтальной

прокрутки (рис. 1, поз. 5). Сдвиг бегунка горизонтальной прокрутки влево вызывает уменьшение стартового значения абсциссы текущего графика на определённое количество шагов, а сдвиг бегунка вправо – увеличение. Бегунок горизонтальной прокрутки влияет на отображение только текущей функции.

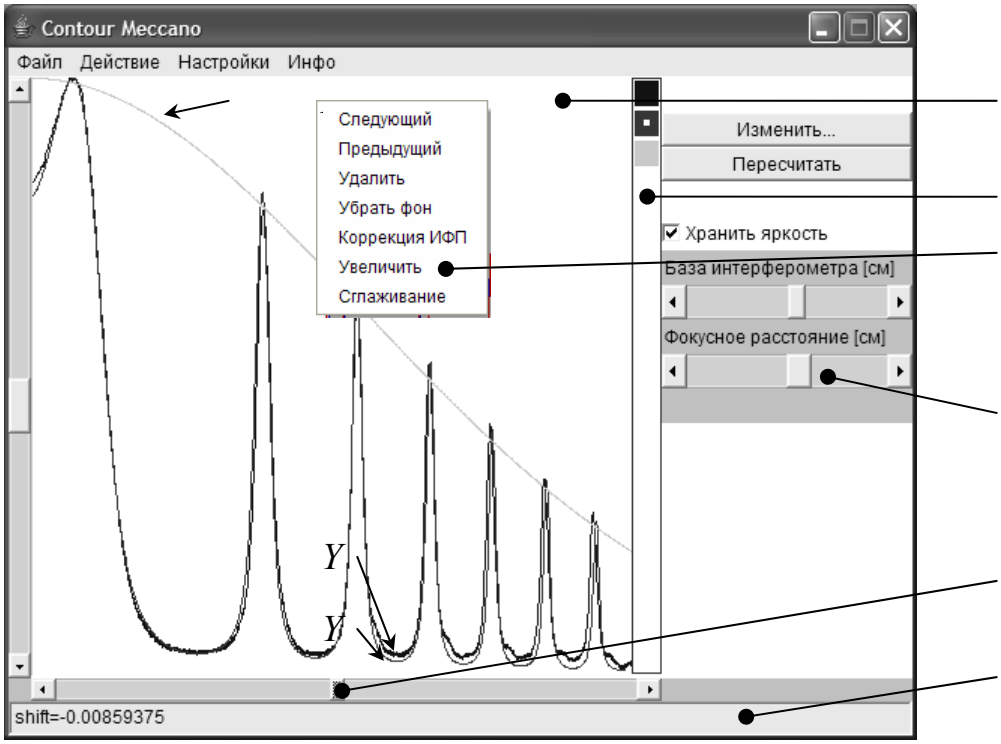

Рисунок 1 – Главное окно программы Meccano2: 1 – область графиков с возможностью автоматического масштабирования, 2 – полоса выбора графиков, 3 – контекстное меню графика, 4 – «горячие» настройки аппаратной функции, 5 – регулировка смещения графика, 6 – строка статуса; $Y_{эксп}(r)$ – экспериментальная интерферограмма Ne 638,3 нм $2p^53s$ ($^3P^0_{-1}$) ← $2p^53p$ ($^3D_1$), $Y_{мод}(r)$ – смоделированная интерферограмма, $N_j(r)$ – полученное распределение заселённости верхнего уровня $2p^53s$ ($^3P^0_{-1}$) (параметры моделирования: p=100 Па, R=1 см, Ta=900K–(900K–350K)(r/R)^3, Te=11000K–(11000K–9500K)(r/R)^3)

Обработка интерферограмм со спектрометра изображения сопряжена с определёнными сложностями. Положение интерференционных колец в значительной степени определяется базой интерферометра и фокусным расстоянием рисующей линзы, значения которых требуется знать с точностью, сравнимой с длиной волны. Чтобы сравнение экспериментальных данных с модельными было возможным, необходим инструмент для быстрого варьирования этих параметров модели. В разработанную программу встроен интерфейс быстрой корректировки параметров аппаратной функции без пересчёта спектральной энергетической яркости (рис. 1, поз. 4). Кроме того, для экспериментальных данных характерно отсутствие информации о смещении центра колец относительно центра источника. Для визуального

сравнения смоделированных и экспериментальных данных в программе можно воспользоваться бегунком горизонтальной прокрутки.

После подбора базы ИФП и фокусного расстояния рисующей линзы, а также выяснения смещения ИФП относительно центра источника возможен подбор параметров модели, на основе суммы квадратов отклонений от эталонного (экспериментального) графика. Эта величина, в частности, является критерием минимизации при подборе параметров встроенным алгоритмом симплекс-метода.

Чтобы ускорить процесс подбора параметров в программу был внедрён модуль поиска оптимума многомерной функции симплекс-методом. Пользователь задаёт идентификаторы параметров модели (*m* параметров), которые подлежат варьированию симплекс-методом, затем делает пробный расчёт, после чего изменяет значения всех варьируемых параметров на величину соответствующего шага и снова делает пробный расчёт. После этого программа готова к использованию симплекс-метода. На первом этапе программа составляет начальный симплекс из m+1 вершин, в качестве двух из них используются два выполненных расчёта. Остальные вершины начального симплекса выбираются по принципу: $\mathbf{P}_i=\mathbf{P}_0+\Delta_i\mathbf{e}_i$, где $\mathbf{P}_0$ – начальная точка, $\mathbf{e}_i$ – единичный вектор в m-мерном пространстве, Δ_i – шаг по соответствующей оси (вычисляется на основе разницы первых двух точек, задаваемых пользователем). После построения первого симплекса алгоритм симплекс-метода отражает одну из вершин симплекса, которой соответствует максимальное значение суммы квадратов отклонений, строя, таким образом, новый симплекс. Итерации продолжаются до тех пор, пока не окажется, что соответствующее новой вершине значение суммы квадратов отклонений максимально. В этом случае используются два варианта продолжения расчётов:

- возможно отражение симплекса относительно вершины, для которой сумма квадратов отклонений является второй по величине среди всех вершин;
- возможно отражение симплекса с меньшим шагом (в каждой попытке отражения шаг уменьшается в 2 раза до тех пор, пока не достигнет значения 10^{-10} от первоначального).

В любой момент вычислений пользователь может прервать расчёты, если достигнут удовлетворительный результат.

Конструктор может быть легко интегрирован с различным веб-контентом в виде апплета. Пример продемонстрирован на http://plasma.karelia.ru/meccano

2. Используемые технические средства

Требования к техническим средствам описываемой программы обусловлены требованиями среды, необходимой для запуска – Java Run-time Environment 2 (JRE2) http://java.sun.com/products/archive/j2se/5.0/system-configurations.html: ЭВМ на базе процессора Intel IA-32 (80386, 80486, Pentium, …), Sun SPARC или AMD64/EM64T с операционной системой Microsoft Windows (98SE, ME, XP, 2000, 2003), Sun Solaris (8-10) или Linux (RedHat, SuSE и др.) Для установки JRE2 требуется примерно 20–60 Мбайт дискового пространства (зависит от версии). Программа распространяется в виде JAR-архива размером 60 Кбайт и для работы требует примерно 20 Мбайт свободной виртуальной памяти.

3. Специальные условия и требования организационного, технического и технологического характера

Программа предназначена для использования специалистами в области физики плазмы.

4. Условия передачи программной документации или её продажи

Программная документация распространяется на основании Лицензии для свободной программной документации фонда GNU (GNU Free Documentation License) http://www.gnu.org/licenses/fdl.txt