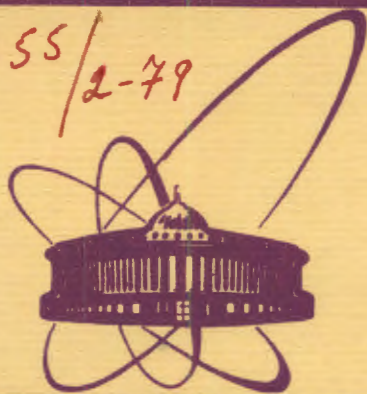


2455/2-79



сообщения  
Объединенного  
Института  
Ядерных  
Исследований  
Дубна

С326

Ф-356

P17 - 12299

В.К.Федянин, В.А.Шведовский

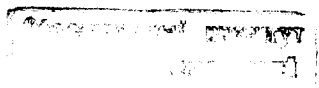
К ПОСТАНОВКЕ ЭКСПЕРИМЕНТА  
ПО ИССЛЕДОВАНИЮ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ  
МЕТОДОМ  $\tau_{02}$ -РЕЛАКСАЦИИ

1979

P17 - 12299

В.К.Федянин, В.А.Шведовский

К ПОСТАНОВКЕ ЭКСПЕРИМЕНТА  
ПО ИССЛЕДОВАНИЮ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ  
МЕТОДОМ  $\tau$  02 -РЕЛАКСАЦИИ



Федянин В.К., Шведовский В.А.

P17 - 12299

К постановке эксперимента по исследованию  
структурных свойств методом  $\tau_{02}$ -релаксации

Рассматривается постановка эксперимента по изучению структурных превращений в средах, выведенных из состояния равновесия и релаксирующих к нему за время, достаточное для получения информации о различных этапах эволюции.

Применяемый метод  $\tau_{02}$ -релаксации позволяет оценивать скорость стохастизации исследуемой динамической системы и сделать вывод о характере поведения системы в возбужденном и основном состояниях.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Fedyanin V.K., Shvedovsky V.A.

P17 - 12299

On the Arrangement of an Experiment on the  
Investigation of Structure Properties by the  
 $\tau_{02}$  Relaxation Method

The arrangement of an experiment on the investigation of structure transformations in media lead out of the equilibrium state and relaxing to it during the time needed to derive an information on different stages of evolution is considered. The method of  $\tau_{02}$  relaxation permits the estimation of the velocity of stochastization of investigated dynamic system and to conclude as to the character of system behaviour in the excited and main states.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

В целях изучения структурных свойств точечных объектов (сложных молекул, кристаллов, звезд) предлагается следующая схема эксперимента или наблюдения, основанная на идее перехода стохастического поведения некоторой функции измеряемых параметров к статистическому поведению.

Исследуемый объект рассматривается как "черный ящик", который под воздействием некоторого ударного импульса меняет свое основное состояние, переходя в возбужденное. Затем - и в этом представляется определенной "нечернота" ящика - объект релаксирует за конечное время к первоначальному состоянию. При этом предполагаются возможные следующие ситуации:

1. Основное состояние является состоянием, описываемым динамической системой со статистическими свойствами, а в возбужденном состоянии динамическая система обладает заметно выраженными свойствами коллективного упорядоченного движения, т.е. характеризуется большим числом свойств симметрии.

2. По отношению к возбужденному и основному состояниям свойства поведения динамической системы и ее перехода прямо противоположны описанному в 1).

3. И возбужденное и основное состояния не являются состояниями со статистическими свойствами, но в одном из них выше порядок симметрии, а поведение динамической системы в этой ситуации описывается как стохастическое.

В течение интервала времени на "черный ящик" подается импульс просвечивания, представляющий собой либо пучок электромагнитных волн, либо пучок частиц.

По аналогии с решеткой Рэлея<sup>/1/</sup>, амплитудно-фазовое рассеяние на которой служит для изучения дифракции света на стоячих ультразвуковых волнах, будем предполагать, что после передачи на "черный ящик" - сложную молекулу или частицу импульса возбуждения - в его материи возникают "волны упругости", формирующие структуру микрорешетки, на которой и будет рассеиваться часть пучка "импульса просвечивания".

Поскольку исследуемые процессы релаксации скоротечны и отражают изменение микроструктуры исследуемого объекта, необходимо, с одной стороны, обеспечить устойчивую процедуру выделения именно ожидаемых эффектов, с другой - обеспечить накопление очень слабых сигналов за очень большой последовательный ряд экспозиций детектирования рассеивающихся частиц или лазерных пучков.

Таким образом, встает задача: после действия каждого ударного импульса на регулируемое время фиксировать (выделять) дифракцию на микрорешетке на фоне дифракции от остальной кристаллографической структуры, в некоторых или во всех узлах которой расположен исследуемый объект.

В отличие от традиционных схем анализа дифракционной картины (например, в рентгено-структурном анализе кристаллических структур), в которых основную трудность составляет фазовая проблема, решаемая с помощью функции Патерсона или  $F^2$  рядов<sup>/2/</sup>, в нашем случае условие стационарности фаз, выражающем предположение, что после ударного импульса процессы релаксации практически по всей массе точечных объектов с удовлетворительной точностью протекают одинаково, позволяет применять для каждого момента критерий принадлежности поведения динамической системы к стохастической или статистической области.

Следует также отметить, что в данном случае принципиальным является выбор интенсивностей рассеивающихся пучков, а не их дифференциальных сечений.

Далее, все усилия по модулированию пучка, падающего на мишень, направлены на то, чтобы приготовить известный набор  $\{\omega_n\}$  колебаний (того или иного параметра), по отношению к которым мишень выполнила бы функцию волнового фильтра. Угловые переменные  $\theta_1$  и  $\theta_2$  позволяют выделить фильтрующие компоненты. В итоге в распоряжении экспериментатора имеется дискретный спектр  $\{\omega_m\}$ , и решая обратную задачу по дифракционным спектрам (для

$\omega_j$ ) под фиксированными  $\theta_j^i$  углами, рассчитанными для основных состояний объекта без паложения гармоник упругих волн, образующих "микрорешетку", мы располагаем возможностью определить фильтрацию указанной выше микрорешеткой соответствующих частот  $\omega_j$ .

Первой поисковой задачей эксперимента является обнаружение самого набора частот  $\{\omega_m\}$ , где  $m = 1, 2, \dots, N_i$ , который фильтруется в одном и том же малом временном интервале  $(0, \tau_0)$ ; эта задача решается методом проб. К примеру, при возбуждении гармоник "микрорешеткой" фактом, удостоверяющим входение частоты  $\omega_j$  в искомый набор, является, во-первых, появление высоты  $\pm 1 - 2\sigma$  рэлеевских пиков для данной частоты вычисленного  $\theta_j$  - угла и их размазывание сразу после действия ударного импульса, во-вторых, восстановление внутри малого временного интервала  $(0, \tau_0)$  этого дифракционного максимума.

Поскольку имеется возможность управлять углом наклона вектора направления падающего пучка к направлению перпендикуляра к плоскости мишени, то можно менять период кристаллографической решетки мишени, а также ось направления на 0, +1, -1 дифракционные максимумы, - наличие возможности геометрической развертки процесса релаксации и соответствующей коллимации.

Для регистрации возникновения неоднородностей в плотности необходимо, чтобы в некоторые моменты  $(0 < t < \tau_{reg})$  была возможность разрешающего сравнения интенсивностей дифракционной картины, полученной в контрольном эксперименте.

Идеальный эксперимент состоит в том, что экспериментатор обнаруживает и готовится такой падающий просвечивающий пучок, когда по мере протекания релаксации часть линий спектра исчезает:

б) часть линий дополняется к начальному спектру  $\{\omega_m\}$  проходящего пучка;

в) скорость исчезновения (появления) линий спектра отвечает скорости стохастизации состояния "черный ящик" в статистическое состояние.

г) полученная скорость исчезновения (появления) линий спектра заметно отличается от такой скорости стохастизации, характерной для ситуации, описанной в пункте в).

(Сформулированные выше а) и г) - возможные ситуации релакса-

ции из возбужденного состояния объекта к основному могут быть в случае применения метода  $\mathcal{T}_{02}$  - релаксации переформулированы как статистические альтернативные гипотезы.

В этом случае в зависимости от знака на оси времени, который организует ряд эмпирических данных  $\{P_i(t_i)\}$  и допускает применение метода  $\rho$ -тестов Колмогорова-Мартина-Лефа<sup>3)</sup>, решается вопрос в пользу 1) или 2) ситуации.

Ситуации 1), 2) отличаются от 3) не знаком, а скоростью исчезновения или появления линий приготовленного спектра под углами, определенными из центральных экспериментов. Эта скорость в единицу времени будет меньше, чем в случаях 1,2. В данном случае встает экспериментальная задача определения эмпирического эталона для исследуемых объектов, т.е. поиска таких объектов (жидких кристаллов, молекул или частиц), которые после ударного импульса заведомо релаксировали бы к основному состоянию как статистическому. Примером такой релаксации может послужить возвращение к политропному состоянию предварительно ориентированного нематического жидкого кристалла после воздействия ударного импульса.

Предлагаемый метод оценки скоростей релаксации к статистическому равносному состоянию отличается от известного метода оценки скорости расщепления корреляций тем, что к исследуемому объекту неприменим в строгом смысле аппарат теории вероятности, а тем самым и схема кинетических уравнений с многочастичными функциями распределения, ибо реализуется переходный режим от строго динамического описания к статистическому.

Сущность предлагаемого метода  $\mathcal{T}_{02}$  - релаксации основывается на последовательном применении теста Мартина-Лефа к ряду значений  $\{P_i\}$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , где  $P_i$  - отдельная эмпирическая реализация, а  $i$  - порядковый номер членов последовательного ряда значений.

Определение 1.  $\rho$ -тестом назовем функцию  $F(\omega)$ , которая удовлетворяет условиям:

- а) она общерекурсивна;
- б) для  $m > 0$ ,  $\rho \{ \omega : F(\omega) \geq m \} \leq 2^{-m}$ , где  $F(\omega) = \sup_n F(\omega, n)$ .

Определение 2. Последовательность называется случайной по мере  $\rho$ , если она выдерживает любой  $\rho$  - тест. Из определения 1 видно, что чем больше берется членов в тес-

тируемой последовательности, тем меньше мера множества выделяемых закономерностей  $\omega$ ; если эта последовательность становится все более случайной, то в качестве меры эталонной скорости стохастизации положена  $1/2^m$ .

Справедливости ради полезно отметить возможность возникновения масштабного коэффициента  $\kappa$ , выражения  $\rho\{\omega\} \leq \frac{\kappa}{2^m}$ , которое позволило бы оценить место физического эталона в процессах стохастизации.

Далее, из определений 1 и 2 вытекает необходимость удовлетворения экспериментальной процедуры ряду условий:

1. Во-первых, необходим контрольный эксперимент, в котором явно фиксируется тип тестируемых закономерностей и их спектральная запись в реперном случае, в нашем случае - этими закономерностями являются гармоники с их спектрами частот.

2. Во-вторых, необходимо выстроить такой последовательный ряд эмпирических значений, когда его можно тестировать, обходя члены последовательности по закону  $j \rightarrow j+1$ , при этом  $P_j \subset P_{j+1} \subset P_{j+2}$ . Это требование вносит ограничение на точность сбора эмпирических данных, а также на временные расстояния  $t_j - t_{j+1}$ ,  $t_j - t_{j+2}$ , ...

Пусть в контрольном опыте для исследуемого образца (ЖК или микрочастицы) или наблюдаемого объекта построена некоторая опорная (реперная) функция интенсивности рассеивания - в дифракционной картине -  $\mathcal{P}_0(x)$ , записанная в виде последовательных дискретных значений  $\{P_{0i}\}$ . При этом получен спектр частот разложения ее на гармоники  $\{\omega_m\}$ .

Пусть в некоторые моменты времени  $t_j \in (0, \mathcal{T}_0)$  зафиксированы с приемлемой  $\Delta t$  - точностью последовательности значений  $\{P_i(t_j)\}$ , т.е. на выходе эксперимента или наблюдений дана матрица  $\|P_{ij}\|$  такая, что а)  $\{P_{ij}\} \cap \{P_{j+1}\} \neq \emptyset$ ,

б)  $\{P_{k,j}\} \subset \{P_{k,j+m}\}_{k=1, \dots, i}$ .

К строкам этой матрицы эмпирических значений можно применить периодограммный анализ, если основная функция  $\mathcal{P}(x)$ , записанная таким образом в виде элементов матрицы  $\|P_{ij}\|$ , удовлетворяет некоторым допущениям.

Первое основное допущение на этом этапе исследования состоит в том, что вещественно-аналитическая функция  $\mathcal{P}(x)$  интегри-

руема с квадратом:

$$\int_{t-\Delta t}^{t+\Delta t} P^2(t) dt < \infty. \quad (1)$$

Это допущение находит свое обоснование также в требовании ограниченности нерегулярной составляющей  $\xi < \bar{\xi}$ .

Требование (1) позволяет разложить  $P$  в ряд Фурье:

$$P(t) = \sum_j c_j \exp(i\omega_j t). \quad (2)$$

Однако существует ряд условий, вытекающих из содержательных обстоятельств задачи, позволяющих сузить этот класс функций. Форма (2) неудобна еще и по той причине, что в выражении

$$P(t) = P_r(t) + \xi. \quad (3)$$

в соответствии с теоремой Служского на конечном множестве значений  $P(t_i)$ , в  $(t-\Delta t, t+\Delta t)$  отделить регулярную составляющую  $P_r$  от нерегулярной  $\xi$  строго однозначно.

Поэтому вторым основным допущением является постулирование того, что  $P$  представимы не более, чем конечным множеством гармоник, т.е. множеством частот  $\{\omega_n\}$ , на котором осуществляется выбор гармоник, не бесконечно:  $n < \infty$ .

В силу того, что  $P(t)$  - вещественно-аналитическая функция, можно утверждать, что

$$P(t) = P[\cos(\omega_1 t + \varphi_1), \dots, \cos(\omega_n t + \varphi_n), \xi]. \quad (4)$$

В таком виде функция  $P(t)$  позволяет осуществлять периодограммный анализ.

На примере анализа случая (5)  $P(t) = P[\cos(\omega_j t + \varphi), \xi]$  покажем, как понимается метод  $T_{02}$ -релаксации, ибо (4) легко восстанавливается из (5).

Очевидно, что выделяемые гармоники и есть те закономерно - сти, которые учитывает  $\rho$ -тест Мартина-Лефа. Каждая выделяемая гармоника характеризуется тройкой чисел  $(c_0, c, \varphi)$ , где  $c_0$  - постоянный уровень гармонической составляющей,  $c$  - ее амплитуда,  $\varphi$  - фаза колебания.

Эти параметры определяются для заданной  $\omega_j$  по конечно-му ряду значений  $\{P(t_i)\}$  методом наименьших квадратов.

Таким образом, можно записать:

$$P(t_i) = C_0 + C \cos(\omega_j t_i + \varphi) + \xi. \quad (6)$$

Для удобства применения метода наименьших квадратов осуществимы некоторые преобразования выражений:

$$\begin{aligned} C \cos(\omega_j t_i + \varphi) &= C_c \cos(\omega_j t_i) + C_s \sin(\omega_j t_i) \\ C_c &= C \cos \varphi; \quad C_s = C \sin \varphi; \\ C_c^2 + C_s^2 &= C^2; \quad \operatorname{tg} \varphi = -\frac{C_s}{C_c}. \end{aligned}$$

В качестве критерия пригодности гармонической составляющей с некоторой заданной точностью и для конечной длины последовательности временных значений применимо следующее выражение:

$$\sum_{i=1}^N [C_0 + C_c \cos(\omega_j t_i) + C_s \sin(\omega_j t_i) - P(t_i)]^2 \leq \bar{\xi}^2 N. \quad (7)$$

Значения  $C_c$  и  $C_s$  получаются из решения системы уравнений, которая получена как результат применения метода наименьших квадратов

$$\sum_{i=1}^N [C_0 + C_c \cos(\omega_j t_i) + C_s \sin(\omega_j t_i) - P(t_i)] \cos(\omega_j t_i) = 0 \quad (8)$$

$$\sum_{i=1}^N [C_0 + C_c \cos(\omega_j t_i) + C_s \sin(\omega_j t_i) - P(t_i)] \sin(\omega_j t_i) = 0 \quad (9)$$

$$\sum_{i=1}^N [C_0 + C_c \cos(\omega_j t_i) + C_s \sin(\omega_j t_i) - P(t_i)] \sin(\omega_j t_i) = 0. \quad (10)$$

Разрешаем эту систему уравнений относительно  $C, C_c, C_s$  при заданных  $\omega_j$  и  $P(t_i)$ .

Для построения характеристической функции, позволяющей оценивать величину множества гармонических составляющих, выделяемого для данной  $P(t_i)$  по методу наименьших квадратов, применим критерий стационарной фазы для временной последовательности

$$\{P(t_i)\}: \quad \varphi_i = \text{arctg} \left( -\frac{C_{si}}{C_{ci}} \right). \quad (II)$$

Тогда с учетом  $\omega_j$ :

$$\Delta \varphi_{ij} = \text{arctg} \left( -\frac{C_{si+1}}{C_{ci+1}} \right) - \text{arctg} \left( -\frac{C_{si}}{C_{ci}} \right) \quad (I2)$$

$$0 \leq \Delta \varphi_{ij} \leq \Delta \varphi_0. \quad (I3)$$

$\Delta \varphi_0 = 0$  в простом случае.

Это легко исполнимо, ибо подтверждено управлению при инжектировании пучка на мишень.

$$\Delta \varphi_{ij} = \text{arctg} \delta, \quad \text{где } \delta = \frac{C_{ci+1}C_{si} - C_{si+1}C_{ci}}{C_{ci+1}C_{ci} + C_{si+1}C_{si}} \quad (I4)$$

Для случая  $\Delta \varphi_{ij} = 0$  при условии  $C_{ci+1}C_{ci} + C_{si+1}C_{si} > 0$  требование стационарной фазы сводится к равенству

$$C_{ci+1}C_{si} = C_{si+1}C_{ci}. \quad (I5)$$

В целях упрощения оперирования с членами формул (8), (9), (I0) обозначим

$$\begin{aligned} \sin(\omega t_i) &= S_i; \\ \cos(\omega t_i) &= C_i; \\ P(t_i) &= P_i. \end{aligned} \quad (I6)$$

После проведения алгебраических преобразований, которые из-за их сложности опускаем, перейдем к получению итоговой оценки.

В случае справедливости требования стационарной фазы в форме (I5), после приведения подобных членов и пренебрегая членами первого и выше порядка значимости, получим  $\delta$ , где

$$\delta = \frac{\delta_1}{\delta_2}; \quad \delta_2 > 0;$$

$$\delta_1 = S_{n+1} \sum_{i=1}^n C_i^2 \sum_{i=1}^{n+1} C_i^2 (P_{n+1} \sum_{i=1}^n S_i^2 - S_{n+1} \sum_{i=1}^n P_i S_i) +$$

$$\begin{aligned} &+ \sum_{i=1}^n C_i S_i \left[ \sum_{i=1}^n P_i S_i (2C_{n+1} S_{n+1} \sum_{i=1}^n C_i^2 - C_{n+1} \sum_{i=1}^n C_i S_i) - \right. \\ &- P_{n+1} S_{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} C_i^2 \sum_{i=1}^n C_i S_i \left. \right] + \\ &+ \sum_{i=1}^n P_i C_i \sum_{i=1}^n C_i S_i (S_{n+1}^2 \sum_{i=1}^{n+1} C_i^2 + C_{n+1}^2 \sum_{i=1}^n S_i^2) - \\ &- C_{n+1} \sum_{i=1}^n S_i^2 \sum_{i=1}^n C_i^2 (S_{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} P_i C_i + P_{n+1} \sum_{i=1}^n C_i S_i) + \\ &+ C_{n+1} S_{n+1} \sum_{i=1}^n C_i S_i (C_{n+1} P_{n+1} \sum_{i=1}^n C_i S_i - \sum_{i=1}^n P_i C_i \sum_{i=1}^{n+1} C_i S_i) + \\ &+ P_{n+1} C_{n+1} \left( \sum_{i=1}^n C_i S_i \right)^2. \end{aligned} \quad (I7)$$

Используя это выражение (I7), запишем условие  $p$ -теста Мартина-Лефа:

$$P = \frac{\sum_{i=1}^n \int_{\omega_j - \Delta \omega}^{\omega_j + \Delta \omega} U^*[\delta_i(\omega_j)] d\omega}{2 \cdot \Delta \omega \cdot N_1} \leq 2^{-n}, \quad (I8)$$

где  $\Delta \omega$  означает радиус окрестности около  $\omega_j$  ("точность"), при этом  $(\omega_j - \Delta \omega, \omega_j + \Delta \omega) \cap (\omega_j, -\Delta \omega, \omega_j, +\Delta \omega) = \emptyset$   
 $U^*$  - характеристическая функция;  $N_1$  - число гармоник  $\{\omega_j\}$ .

Тогда

$$n \leq 4 + \log_2 N_1 + \log_2 \cos \left( \frac{\Delta t \omega_0}{2} \right) - \log_2 [\sin(n+1) \Delta t \omega_0 N_1]. \quad (I9)$$

А поскольку  $\mathcal{E}_0 = \sum_{i=1}^n \Delta \mathcal{E}_i$ , то естественно при прочих равных условиях считать справедливым следующий вывод:

Чем больше число гармоник требуется для описания сложности данного класса функций, тем дольше осуществляется релаксация к статистическому режиму в статистической капелке.

С учетом  $\Delta t \approx \frac{h}{\Delta E}$  получаем:

$$n \leq 4 + \log_2 N_1 + \log_2 \cos\left(\frac{k \omega_0}{2 \Delta E}\right) - \log_2 \sin\left[(n+1) N_1 \cdot \frac{k \omega_0}{\Delta E}\right], \quad (20)$$

где:  $\omega_0$  — низкочастотная гармоника  
 $n$  — число замеров внутри  
 $N_1$  — число искомым гармоник, описывающих колебания неоднородностей в статистической капельке.

Процедура измерений построена так, что для каждого спектра  $\{\omega_c\}$ , приготовленного в модулировании колебаний инжектируемого на мишень пучка, экспериментатор оценивает для данного ряда  $n$  замеров максимальное упрощение заданного спектра. Затем выбирается более широкая спектральная "полоса"  $\{\omega_m\}, m > l$  и аналогично получается  $n_2, \dots$ . Далее накапливается ряд значений  $n_1, n_2, \dots$ , в зависимости от  $N_1, N_2, \dots$  и строится кривая.

Таким образом, возникает возможность определять как время релаксации колебаний в стохастической капельке, так и число гармоник, которыми описываются колебания неоднородностей в ее материи.

### Л и т е р а т у р а

1. М.Борн. Оптика, пер. с нем. Харьков, 1937 г.
2. М.Бургер. Структура кристаллов и векторные пространства, ИЛ, М., 1961.
3. Звонков А.К. и др. УМН, т. XXV, вып.6, (1970), 85-127.

Рукопись поступила в издательский отдел  
 15 марта 1979 года