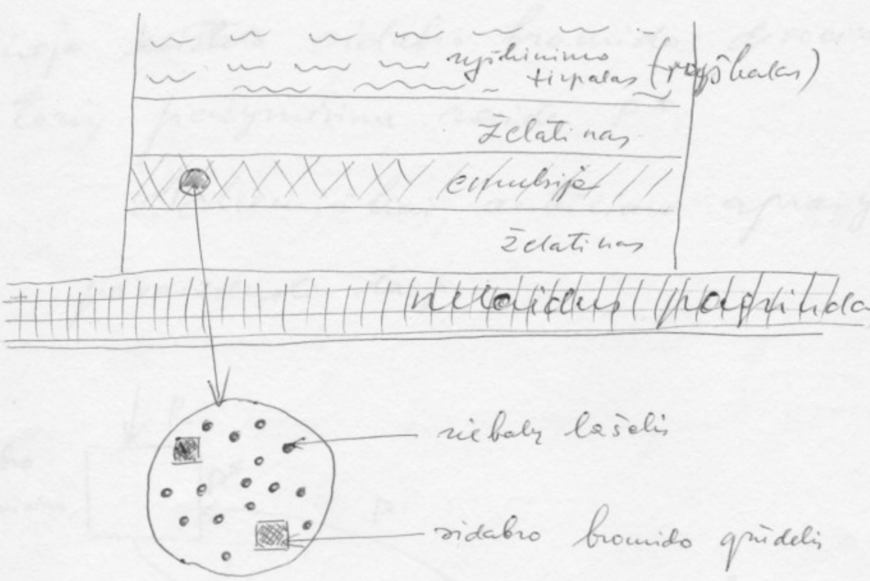
5. Spalvoto filmo negatyvo ryškinimas

5.1. Procesas

Filmo ryškinimo procesas yra svarbus daugelyje sričių, tačiau (jo modeliavimas nėra visiškai aiškus. Čia panagrinėsime spalvoto filmo negatyvo ryškinimą. Toks filmas paprastai susideda iš kelių fotografinės emulsijos sluoksnių, ~~atskirtų~~ tarp ~~emulsijos~~ želatinos sluoksnių. Kiekvieno sluoksnio storis yra apie 15-20 µm. Fotografinė emulsija susideda iš sidabro bromido (jodido, chlorido) kristalų ir riebalų lašelių, įterptų į želatiną. Riebalų lašelių skersmuo yra apie 0.05 µm, o sidabro kristalų ~~ilgis~~ briaunos ilgis yra apie 0.5 µm.

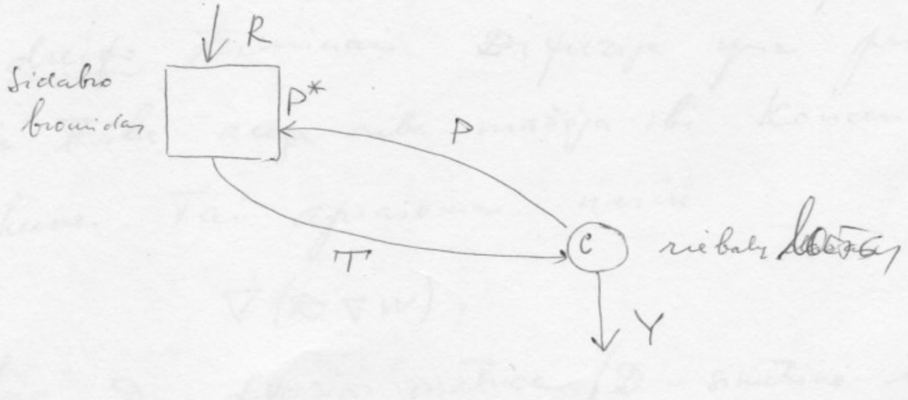


Riebalų lašeliuose yra dažus formuojantis ~~katalizatorius~~ reagentas. Kai filmas yra apšviečiamas, susidaro taip vadinamas „latentinis" vaizdas. Ryškinimo procese chemikalai iš tirpalo difunduoja iš ryškinimo tirpalo talpos ir reaguoja su sidabro bromido kristalais, pradėdami cheminių reakcijų seką, kurios dėka susiformuoja vaizdas.

iš tirpalo Redukuotas ryškalas R pradeda procesą išdėstydamas elektronus e^- latentinio vaizdo ~~...~~ srityse. ~~Išvada yra iš sidabro bromido kristaluose~~ Laisvieji sidabro jonai iš sidabro bromido kristalų susijungia su elektronais formuodami gryno sidabro. Grynas sidabras formuojasi ~~...~~ siūlinių struktūrų (filamentų) pavidalu. ~~kuria~~ Be to laisvieji jonai kaupiasi taip vadinamuose mazginiuose (kaupiniuose) ~~kristalo~~ taškuose. Tirpstant kristalui susidaro vis daugiau filamentų.

Redukuotas ryškalas R, po to kai sureaguoja su sidabro bromidu, palikdamas jam laisvuosius elektronus tampa oksiduotu ryškalu T, kuris reaguoja su ~~katalizatoriumi~~ reagentu C riebalų lašeliuose ir sudaro dažą Y ir inhibitorių P. Inhibitorius nusėda ant kristalų sienelių (adsorbuotų) ir stabdo ~~kristalo~~ sidabro bromido disociaciją. Nusėdusį inhibitorių pažymėsime raide P*.

Schemiškai anksčiau aprašytąjį procesą galima pavaizduoti taip:



2. Matematinis modelis

Tam, kad išvengti mikroskopinio proceso vaizdo aprašymo, leisime, kad dirbame su kontinualiniu modeliu, kur

R, T, C, Y, P, P^* yra tankio funkcijos:

R – redukuotas ryškalas

T – oksiduotas ryškalas

C – katalizatorius

Y – dažas

P – inhibitorius

P^* – adsorbuotas inhibitorius

Taip pat įvesime dydį

S = sidabro bromido kristalų paviršiaus plotas ~~blokelyje~~ tūrio vienetui.

Prieš užrašydami modelį šiems dydžiams, panagrinėsime kurios nors medžiagos koncentracijos W cheminius ir dinaminius pokyčius.

Dinamika dažniausiai aprašoma difuzijos ir dreifo terminais. Difuzija yra procesas, kai koncentracija taške auga arba mažėja iki koncentracijos aplinkiniuose taškuose. Tai aprašoma nariu

$$\nabla(\mathcal{D}\nabla W),$$

kur $\mathcal{D}$ – difuzijos matrica ($\mathcal{D}$ – simetrinė teigiamai apibrėžta matr.)

Daugeliu atvejų $\mathcal{D}$ yra skaliaras. Tada rašoma

$$\mathcal{D}\nabla^2 W \text{ arba } \mathcal{D}\Delta W$$

Dreifas, kaip matome, aprašomas nariu

$$B\cdot\nabla W = \sum b_i \frac{\partial W}{\partial x_i} \quad \left(B = (b_1, b_2, b_3)\right),$$

kur B – erdvės ir laiko funkcija.

Medžiagos tvermės dėsnis leidžia užrašyti tolydumo lygtį

$$(5.1)\quad \frac{\partial W}{\partial t} = \nabla\cdot(\mathcal{D}\nabla W) + B\nabla W$$

Tegul tirpale yra dar ir kitas dieminalas, kurio koncentraciją žymėsime V, kuri reaguoja su W greičiu k. Tada W mažėja greičiu kVW ir 4.1 pakeičiama

$$(5.2)\quad \frac{\partial W}{\partial t} = \nabla\cdot(\mathcal{D}\nabla W) + B\nabla W - kVW$$

Jeigu W nejuda, tai nėra nei difuzijos, nei dreifo, ir tada turime

$$(5.3)\quad \frac{\partial W}{\partial t} = -kVW$$

Tuo pasinaudoję, užrašome tokį makroskopinį modelį:

$$(5.4)\quad \frac{\partial R}{\partial t} = \mathcal{D}_R\Delta R - f_{der}(R,P,S,P^*)E(x), \quad , \quad x=(x_1,x_2,x_3)$$

$$(5.5)\quad \frac{\partial T}{\partial t} = \mathcal{D}_T\Delta T + f_{der}(R,P,S,P^*)E(x) - k_1 TC,$$

$$(5.6)\quad \frac{\partial C}{\partial t} = -k_1 TC,$$

$$(5.7)\quad \frac{\partial Y}{\partial t} = k_1 TC,$$

$$(5.8)\quad \frac{\partial P}{\partial t} = \mathcal{D}_P\Delta P + k_1 TC - k_2 PS + k_3 P^*,$$

$$(5.9)\quad \frac{\partial P^*}{\partial t} = k_2 PS - k_3 P^*,$$

$$(5.10)\quad \frac{\partial S}{\partial t} = -k_4 S^{-0.5}\cdot f_{der}(R,P,S,P^*)E(x) - k_2 PS + k_3 P^*,$$

kur $E(x)$ – ekspozicijos funkcija, $E(x)\geq 0$, $\mathcal{D}_R, \mathcal{D}_T, \mathcal{D}_P$ ir k_i – teigiamos konstantos. $E(x)$ didesnė šviesiose vaizdo vietose ir mažesnė tamsiose, ten kur juoda spalva, $E(x)=0$.

5.3. ~~Difuzijos-reakcijos lygčių tyrimas~~ Supaprastintas modelis

Uždavinys, duotas lygtimis 5.4–5.10 ~~yra~~ kartu su atitinkamomis papildomomis sąlygomis yra ~~[illegible]~~ sudėtingas, t. t. ir dėl to, kad funkcija f der turi būti nustatyta iš eksperimento rezultatų. Tačiau galime ~~gauti~~ ~~tam tikrą~~ susidaryti kokybinį vaizdą naudingą informaciją nagrinėdami specialų atvejį, kai modelyje ignoruojame sidabro bromido kristalus. Leisime, kad medžiaga A (oksiduotas ryškalas) difunduoja per emulsijos sluoksnį ir reaguoja su kita medžiaga B, esančia ribotų kiekių laisvuoju. Dėl paprastumo tarsime, kad $f \equiv \gamma \sqrt[k_{W}]{\gamma} F$ teigiama konstanta. Tada lygtys

$$(5.11) \quad \frac{\partial A}{\partial t} = \mathcal{D} \Delta A - k AB + \gamma E(x)$$

$$(5.12) \quad \frac{\partial B}{\partial t} = -k AB$$

modeliuoja duotą procesą. Paprastai laikoma, kad k, γ teigiamos. Tai atitinka (5.5) ir (5.6) l., kur $A \sim T$, $B \sim C$.

Dėl paprastumo pirmiausiai tirsime vienmatį atvejį. Tada (11) l. virsta

$$(5.13) \quad \frac{\partial A}{\partial t} = \mathcal{D} \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - k AB + \gamma E(x) \quad , \quad 0 < x < L, \ t > 0$$

Be to, turime uždėti pradines sąlygas

$$(5.14) \quad A(x,0) = A_0(x) \quad , \quad 0 \le x \le L \quad (A_0 \ge 0)$$

$$(5.15) \quad B(x,0) = B_0(x) \quad , \quad 0 \le x \le L \quad (B_0 \ge 0)$$

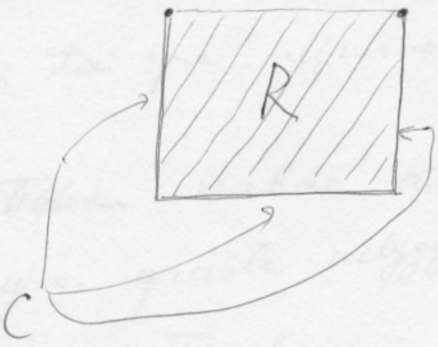
ir kraštines sąlygas, sakykime,

$$(5.16) \quad A(0,t) = 0 \quad , \quad A(L,t) = 0 \qquad t > 0 .$$

Toliau tirsime uždavinį (5.12)–(5.16)

5.4. Sprendimo analizė

Tegul R yra stačiakampis $0 < x < L$, $0 < t \leq T$, o C – srities R kontūro dalis, sudedanti iš trijų ~~atkarpų~~ $x = 0$, $x = L$ ir $t = 0$



1. Teorema. (Maksimumo principas). Jei $A = A(x,t)$ yra tolydi srityje $R \cup C$ ir tenkina nelygybę

(17) $$\frac{\partial A}{\partial t} - D \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + cA \geq 0 \quad , (x,t) \in R ,$$

kur D – teigiama, o c – aprėžta funkcija, ir jei

(18) $A \geq 0$ ant kontūro C, tai

(19) $A \geq 0$ srityje R

Įrodymas. Įsitikinime pirmiausiai atveji, kai $c \geq 0$ ir (17) l. yra griežta nelygybė $>$. Pasinaudosime tuo faktu, kad tolydi funkcija aprėžtoje uždarojoje srityje ~~pasiekia savo~~ įgauna savo minimalią ir maksimalią reikšmes. Jei teorema būtų neteisinga, tada turėtų būti taškas $(x_0, t_0) \in R$, kuriame $A(x_0, t_0) < 0$. Taigi A minimumas būtų pasiekiamas srityje R, bet ne C.

Tame taške $A<0$ ir, kadangi

$$\frac{\partial A}{\partial t} \leq 0 \,, \quad -\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \leq 0 \,, \quad cA \leq 0 \,,$$

tai (17) nelygybės kairiojoje pusėje gauname nelygybę ≤ 0, tuo tarpu tenkinome nelygybę $>$. Kadangi tai yra neįmanoma, tai turime $A \geq 0$ visoje srityje $R \cup C$.

~~Toliau~~ Dabar atsisakykime prielaidos, kad (5.17) yra griežta nelygybė. Įvesime modifikuotą funkciją A. Tegul

$$u = u(x,t) = A + \varepsilon t \,,$$

kur ε - teigiamas artimas nuliui skaičius.

Tada

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + cu \geq C + \varepsilon c t > 0 \quad \text{srityje } R$$

Kadangi $u \geq A \geq 0$ ant kontūro C, turime, kaip jau įrodėme, kad $u \geq 0$ srityje R, arba $A \geq -\varepsilon t \geq -\varepsilon T$ srityje R. Kadangi A yra nepriklausomas nuo ε, leisime, kad $\varepsilon \to 0$ ir ~~padarysime~~ matysime, kad nelygybė $A \geq 0$ srityje R taip pat yra teisinga.

Tam, kad įrodyti teoremą bet kuriam apribotam c, panagrinėkime funkciją $\tilde{A} = e^{-\alpha t} A$, kuri tenkina

$$\frac{\partial \tilde{A}}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \tilde{A}}{\partial x^2} + (c - \alpha) \tilde{A} \geq 0$$

kai ~~ir panagrinėkime~~ $\alpha > \max\{-c\}$

$$\frac{\partial \tilde{A}}{\partial t} = -\alpha e^{-\alpha t} A + e^{-\alpha t} \frac{\partial A}{\partial t} = e^{-\alpha t} \frac{\partial A}{\partial t} - \alpha \tilde{A}$$

$$e^{-\alpha t} \frac{\partial A}{\partial t} - e^{-\alpha t} D \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + (c-\alpha) e^{-\alpha t} \cdot A =$$

$$= e^{-\alpha t} \left[\frac{\partial A}{\partial t} - D \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + (c-\alpha) A \right] \geq 0 \,,$$

jei α pakankamai didelis modulio ir neigiamas.

<u>2 Teorema</u>. Jei $u(x,t)$ ir $v(x,t)$ yra tokios, kad funkcija $A=u-v$ tenkina (17), (18), tai $u \geq v$ visoje uždaroje srityje $R \cup C = \{0 \le x \le L,\ 0 \le t \le T\}$.

Pastebėsime, kad, jei A tenkina <u>griežtą</u> nelygybę

$$\frac{\partial A}{\partial t} - D\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} < 0 \quad \text{srityje } R.\ (D>0),\ \text{tai}$$

A negali įgauti lokalaus maksimumo nei viename <u>vidiniame</u> R taške. Tokiame taške

$$\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \le 0 \quad , \frac{\partial A}{\partial t} = 0 ,$$

kas prieštarauja griežtai nelygybei. Dar daugiau, lokalinis maksimumas negali būti pasiektas atvirame intervale $0<x<L$, $t=T$, kadangi tokiame maksimumo taške

$$\frac{\partial A}{\partial t} \geq 0 \quad , \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} \le 0 ,$$

o tai vėl duoda prieštaravimą. Taigi, maksimumas negali būti pasiektas R. Tokį pat faktą galima įrodyti ir esant negriežtai nelygybei.

<u>4 Teorema</u> (Griežtas maksimumo principas).
Jei $D>0$ srityje R, $c(x,t)$ apribota neneigiama funkcija** srityje R ir

$$\frac{\partial A}{\partial t} - D\frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + cA \le 0 \quad \text{srityje } R,$$

tai A negali turėti neneigiamo maksimumo srityje R, išskyrus kai A yra identiška konstanta.

Dabar nagrinėsime (5.12)-(5.16) uždavinį. Galime užrašyti

$$(5.20) \qquad B(x,t) = B_0(x)\, e^{-k\int_0^t A(x,s)\,ds}$$

Iš (5.13) lygties gauname diferencialinę nelygybę (5.17), kur $c = kB$. Kadangi, pagal palyginimo teoremą

$$A \geq 0,$$

tai iš (5.20) gauname, kad $\frac{\partial B}{\partial t} \leq 0$, t.y., $B(x,t)$ yra monotoniškai nedidėjanti pagal t.

<u>1. Uždavinys.</u> Išspręsti (5.12)-(5.13) skaitiškai, kai duotos pradinės sąlygos (5.15) ir kraštinės sąlygos (5.16), kai $T = 3$ min.

Paimti tokias reikšmes:

$$D = 100\ \frac{(\mu m)^2}{s} \qquad M\text{ – molis}$$

$$\gamma = 7.5 \cdot 10^{-12}\ \frac{M}{\mu m \cdot s}$$

$$k = 6.6 \cdot 10^{12}\ \frac{\mu m}{M \cdot s}$$

$$L = 15\ cm = 1.5 \cdot 10^5\ \mu m$$

$$E = 1, \text{ kai } \begin{cases} 1 \cdot 10^4 \mu m < x < 2 \cdot 10^4 \mu m \\ 3 \cdot 10^4 \mu m < x < 4 \cdot 10^4 \mu m \end{cases}$$

ir $E = 0$ visur kitur

$$A_0(x) \equiv 0, \quad B_0(x) = 1.125 \cdot 10^{-11}\ \frac{M}{\mu m}$$

Prisiminsime, kad A iš tikrųjų yra T (obidcuotas signalas), o B (anksčiau C) yra katalizatorius. Iš tikrųjų mes norime nustatyti dalį kiekį Y, aprašytą lygtimi (5.7). Jei pradiniu laiko momentu $Y = 0$, tai, sudėdami (5.6) ir (5.7), gauname $\frac{d}{dt}(Y+B) = 0 \Rightarrow Y = B_0 - B$

$$(5.21) \qquad Y = B_0 - B$$