

Министерство образования и науки Российской Федерации
Южно-Уральский государственный университет

Ч48
Н34



НАУКА ЮУрГУ

Материалы 65-й научной конференции

СЕКЦИИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Челябинск
Издательский центр ЮУрГУ
2013

ББК Ч481.46.я43 + Ч215.1.я43
НЗ4

Оргкомитет 65-й научной конференции

Ваулин С.Д. (председатель), Рождественский Ю.В., Спасибожко В.В., Шабиев С.Г., Спиридонов Е.К., Карпов А.Н., Соколинский Л.Б., Шестеркина Л.П., Парфентьева Н.Д., Хомутова Т.Н., Горшенин В.П., Дрозин А.Д., Гузеев В.И., Ровный Б. И., Казаринов Л.С., Солдатова Е.Л., Тошев А.Д., Майсак В.Н., Лившиц В.А., Окольнішнікова И.Ю., Кундикова Н.Д., Михайлов Г.Г., Быков Е.В., Авдин В.В., Шиндина Т.А., Баев И.А., Радионов А.А., Классен А.Н., Демин А.А., Волошина И.А., Чуманов В.И., Серко И.А., Балахонова И.М., Рогозин А.Ф., Орлова Е.Ю., Борщенко В.Н., Чванова Е.Е., Кравцов А.И., Шкерина Г.А., Давыдова О.И., Плаксин О.А., Романов Е.В.

Ответственный за выпуск Ваулин С.Д.

НЗ4 **Наука ЮУрГУ:** материалы 65-й научной конференции. Секции естественных наук. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013. – 134 с.

ISBN 978-5-696-04456-9

Представлены материалы 65-й научной конференции профессорско-преподавательского состава, аспирантов и сотрудников, которая состоялась в апреле 2013 года.

Отпечатано с авторских оригиналов.

ББК Ч481.46.я43 + Ч215.1.я43

ISBN 978-5-696-04456-9

© Издательский центр ЮУрГУ, 2013

ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

УДК 517.954

ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ НА ОТРЕЗКЕ С ОПЕРАТОРОМ ЛИЗЕГАНГА

Б.А. Марков

Ряд задач коллоидной химии приводит к дифференциальным уравнениям с правой частью особого вида – оператору Лизеганга. В настоящей работе вводится корректное определение этого оператора и доказывается существование решения в этом случае.

Ключевые слова: оператор Лизеганга, существование решения.

Введение. Некоторые задачи коллоидной химии приводят к уравнениям с правыми частями специального вида [1]. Это связано со сложными процессами, происходящими в веществе. Так как процессы приводят к образованию структур, подобных кольцам Лизеганга [2], то удобно правую часть особого вида выделить в отдельный оператор – оператор Лизеганга.

Постановка задачи. Рассмотрим следующую задачу, задающую поведение коллоидной системы:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2\pi^2 L[u], & x \in [0;1], t \in [0;\infty) \\ u|_{x=0} = u|_{x=1} = 0, \quad u|_{t=0} = \sin(\pi x), \end{cases} \quad (1)$$

где $L[u]$ – оператор в правой части – так называемый оператор Лизеганга [3], действующий на непрерывную функцию $u(x, t)$.

Определение. Оператором Лизеганга для непрерывной функции $u(x, t)$ называется оператор $L[u]$, который при данном фиксированном значении $\tilde{x}$ равен $+1$, если $u(\tilde{x}, t) < 1 \quad \forall \tau < t$ и $L[u(\tilde{x}, \tau)] = -1$, если а) существует такое t_0 , что $u(\tilde{x}, t_0) = 1$ и б) $\forall \tau \geq t_0$.

Таким образом, в любой момент времени t будут существовать такие множества X_+ и X_- , на которых соответственно $L[u] > 0$ и $L[u] < 0$.

Определение. Назовём функцией $x_+(t) = \sup X_+$ ($x_-(t) = \sup X_-$) – верхняя (нижняя) граница множества X_+ (X_-).

Определение. Правой полуграницей X_+ назовём

$$x_+^{(0,5)} = \sup \{ X_+ \mid x \in X_+, x \leq 1/2 \}.$$

Определение. Назовём область сплошной, если $x_- = x_+^{(0,5)}$.

Ищем решение (1) в виде ряда Фурье по собственным функциям задачи

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(t) \sin(\pi(2n-1)x), \quad (2)$$

где $u_n(t)$ – некоторые функции, такие, что (2) является решением (1).

В результате несложных преобразований получим:

$$\frac{du_k}{dt} = \pi^2 (2 - (2k-1)^2) u_k - 4\pi^2 \int_{X_-} \sin(\pi(2k-1)x) \sum_{n=1}^{\infty} u_n(t) \sin(\pi(2n-1)x) dx. \quad (3)$$

Утверждение 1. Решение (1) существует.

Для этого сначала докажем выполнение условия сплошности.

Будем брать различные количества членов ряда (2). Сначала возьмём только один член ряда. Тогда условие достижения верхней границы примет вид: $u_1(t) \sin \pi x = 1$ на отрезке $x \in (0; 1/2)$. Следовательно, $\sin \pi x = \frac{1}{u_1(t)}$,

и решение этого уравнения единственное на указанном отрезке или не существует вовсе. В первом случае – условие сплошности выполняется, так как u_1 – непрерывная функция, не проходящая через нуль. Следовательно, решение задачи $\sin \pi x = \frac{1}{u_1(t)}$ также будет непрерывной функцией.

Теперь рассмотрим случай с двумя членами ряда (2). Для нахождения точки смены знака оператора Лизеганга должно быть выполнено условие: $u_1(t) \sin \pi x + u_3(t) \sin 3\pi x = 1$. Если мы заменим $\sin \pi x = \xi$, то тогда уравнение примет вид: $u_1(t) \sin \pi x + u_3(t) (3\xi - 4\xi^3) = 1$.

Из вида (3) следует, что $u_1(t)$ значительно больше остальных функций u_k , причём остальные функции также монотонно убывают в зависимости от порядкового номера. Следовательно, всегда – с теми или иными поправками – будет существовать решение $\sin \pi x = \frac{1}{u_1(t)}$, и оно будет основным.

Корни кубического уравнения, если они есть, разделены экстремумами $\xi_{extr} = \pm \sqrt{\frac{u_1}{12u_3} + \frac{1}{4}}$. Отбросим отрицательный экстремум. Второй из корней в начальный момент времени заведомо больше единицы, так как $u_3(0) = 0$.

Добавляя по одному члену ряда и рассматривая синусы $\sin(2n-1)\pi x$ как многочлен от $\sin \pi x = \xi$, получаем те же результаты. Это означает, что условие сплошности выполнено всегда.

Для доказательства предположим, что условие сплошности выполняется, и границы совпадают, и $x_+ = x_- = \frac{1}{2} - x_0(t)$, а потом докажем, что в построенном решении u и в самом деле удовлетворяет этому условию.

Введём обозначение $b_{nk}(t) = \int_{0,5-x_0(t)}^{0,5+x_0(t)} \sin[\pi(2k-1)x] \sin[\pi(2n-1)x] dx$.

Тогда система (3) может быть переписана как:

$$\frac{du_k}{dt} = -\pi^2(2k-1)^2 u_k + 2\pi^2 u_k - 4\pi^2 \sum_{n=1}^{\infty} b_{nk}(t) u_n(t) \quad (4)$$

Таким образом, задача о существовании решения (1) при предположении сплошности решения (1) сводится к доказательству существования решения (3).

Построим последовательности приближений решения (4):

$u = u_1^{(1)}(t) \sin(\pi x), \dots, u = u_1^{(n)}(t) \sin(\pi x) + \dots + u_n^{(n)}(t) \sin[\pi(2n-1)x]$. По построению, $u = \lim_{n \rightarrow \infty} u^{(n)}$. Докажем, что такой предел существует.

Для $u^{(1)}$ получаем задачу, в которой опустим верхний индекс.

$$\begin{cases} u_1' = \pi^2 u_1 - 4\pi^2 u_1 \int_{0,5-x_0}^{0,5+x_0} \sin^2(\pi x) dx \\ u_1|_{t=0} = 1, \quad u_1 \sin\left[\pi\left(\frac{1}{2} - x_0\right)\right] = 1. \end{cases}$$

Решение имеет вид: $u_1 = \exp\left[\pi^2 \left[t - 4 \int_0^t d\tau \int_{0,5-x_0(\tau)}^{0,5+x_0(\tau)} \sin^2(\pi x) dx\right]\right]$. Несложно

видеть, что оно непрерывно.

Рассмотрим n -й случай. Тогда (3) примет вид:

$$\begin{cases} u_1' = +\pi^2 u_1 - 4\pi^2 b_{11}(t) u_1 - 4\pi^2 b_{12}(t) u_2 - \dots - 4\pi^2 b_{1n}(t) u_n \\ \dots \\ u_n' = -(4n^2 - 4n - 1)\pi^2 u_n - 4\pi^2 b_{nn}(t) u_n - 4\pi^2 b_{n1}(t) u_1 - \dots - 4\pi^2 b_{nn-1}(t) u_{n-1}. \end{cases}$$

Во всех суммах отдельно выписано слагаемое, содержащее u_i , где индекс i совпадает с номером уравнения. Отметим также, что $b_{ii}(t) \geq 0 \quad \forall t$.

Решение каждого из уравнений системы при известном x_0 известно:

$$u_i = -4\pi^2 \sum_{j=1}^n \int_0^t b_{ij}(\tau) u_j(\tau) \exp\left[-\pi^2 [4i^2 - 4i - 1](t - \tau) + \int_{\tau}^t b_{ii}(s) ds\right] d\tau.$$

Оценим интегралы. Пусть $U_i = \max_{\tau \in [0; t]} |u_i(\tau)|$, $B_{ij} = \max_{\tau \in [0; t]} |b_{ij}(\tau)|$.

$|u_i| \leq 4\pi^2 \int_0^t \exp\left(-\pi^2 [4i^2 - 4i - 1](t - \tau) + \int_\tau^t b_{ii}(s)ds\right) d\tau \sum_{j=1, j \neq i}^n B_{ij} U_j$. Отметим, что

$b_{ii}(t) \geq 0 \quad \forall t$. Следовательно, $|u_i| \leq 4\pi^2 \frac{\{1 - \exp(-\pi^2 [4i^2 - 4i - 1]t)\}}{4i^2 - 4i - 1} \sum_{j=1, j \neq i}^n U_{ij} B_j$

Выражение в фигурных скобках меньше 1, следовательно:

$|u_i| \leq \frac{4}{4i^2 - 4i - 1} \sum_{j=1, j \neq i}^n U_j B_{ij}$. Добавим к правой и левой частям недостающее

слагаемое: $U_i + \frac{4}{4i^2 - 4i - 1} B_{ii} U_i \leq \frac{4}{4i^2 - 4i - 1} \sum_{j=1}^n B_{ij} U_j$, или

$$\max_{\tau \in [0; t]} |u_i| \leq \frac{4}{4i^2 - 4i - 1} \sum_{j=1}^n B_{ij} U_j, \quad (5)$$

где $B_{ij} \leq \frac{1}{2\pi} \cdot \left| \frac{\sin\left[\frac{\pi(i-j)}{2j-1}\right]}{\left[\frac{i-j}{2j-1}\right]} \right| \cdot \frac{1}{i+j-1}$. Из (5): $U_i \leq \frac{2}{4i^2 - 4i - 1} \sum_{j=1}^n \frac{U_j}{i+j-1}$.

Пусть $\sum_{j=1}^n \frac{U_j}{j+1} = Q_n$, тогда при $i \geq 2$: $U_i \leq \frac{2}{4i^2 - 4i - 1} Q_n$. И

$Q_n - Q_n \cdot \sum_{j=2}^n \frac{1}{j+1} \cdot \frac{2}{4 \cdot j^2 - 4 \cdot j - 1} \leq \frac{U_1}{2}$. Следовательно, весь ряд ограничен.

Ряд в правой части каждого из уравнений будет сходиться абсолютно, и решение задачи (3) может быть найдено.

Выводы

Таким образом, решение задачи с оператором Лизеганга существует.

Библиографический список

1. Сухарев, Ю.И. Нелинейность гелевых оксигидратных систем / Ю.И. Сухарев, Б.А. Марков. – Изд-во УрО РАН, 2005. – С. 468.
2. Liesegang, R.E. Ueber einige Eigenschaften von Gallerten / R.E. Liesegang // Naturwissenschaftliche Wochenschrift. – 1896. – Vol. 11, Nr. 30. – S. 353–362.
3. Ильин, А.М. Нелинейное уравнение диффузии и кольца Лизеганга / А.М. Ильин, Б.А. Марков // Докл. РАН. – 2011. – Т. 440, № 2. – С. 164–167.

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГОРОДСКОГО ПОГРАНСЛОЯ АТМОСФЕРЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ БАЗ ГЕОДАННЫХ MODIS

О.Ю. Ленская

Представлены результаты численного моделирования температуры приземного слоя воздуха с использованием двух наборов геоданных. Показано, что введение дополнительной категории землепользования «внутренние озера» и расчета среднесуточной температуры поверхности таких участков земной поверхности делает результаты моделирования более реалистичными.

Ключевые слова: численное моделирование, приземный слой, WRF, геоданные MODIS.

Быстро растущая урбанизация территорий значительно изменяет свойства атмосферы, в особенности её пограничного слоя, на локальном и региональном уровне, что отражается на температурном и ветровом режиме, влажности, турбулентном обмене, тепловом балансе подстилающей поверхности. Явление формирования «острова тепла» над крупными городами уже давно признано и активно исследуется во всем мире. Оно проявляется в виде температурных контрастов между городом и пригородными территориями, наиболее явно оказывает воздействие на воздушные потоки внутри города, на структуру атмосферного пограничного слоя, а также перенос и рассеяние загрязняющих веществ.

Для исследования пограничного слоя атмосферы крупного промышленного города на примере Челябинска в настоящей работе применяется численное моделирование с использованием мезомасштабной модели WRF-ARW, установленной на суперкомпьютере Торнадо в СКЦ ЮУрГУ [1]. При численном моделировании метеорологических условий над территорией размерами в несколько десятков километров, в частности, над крупным городом, используется шаг сетки от нескольких километров до сотен и даже десятков метров. Выбор шага зависит от наличия геоданных высокого разрешения [2]. Процессы меньшего масштаба, чем масштаб расчетной сетки принято параметризовать. При параметризации учитывается суммарный эффект воздействия физических процессов подсеточного масштаба на атмосферные процессы более крупного масштаба. Модель WRF включает в себя большое количество схем параметризации физических процессов, которые можно совмещать в любом виде: параметризация микрофизики влаги, потоков длинноволновой и коротковолновой радиации, представления параметров планетарного пограничного слоя, а также конвективных процессов. Температура и влажность подстилающей по-

верхности могут рассчитываться на основе одной из четырех многослойных моделей тепло- и влагообмена.

Область моделирования, включающая г. Челябинск и окружающие его территории, представлена на рисунке (справа). Разрешение модели по горизонтали составляет 2 км, горизонтальная сетка включает 45×40 точек. По вертикали было задано 34 σ -уровня, 7 из которых находятся в нижнем слое 1 км. Расчеты производились для зимнего периода с 00:00 ВСВ 08.12.2011 г. по 00:00 ВСВ 10.12.2011 г., граничные условия менялись каждые 6 ч. В качестве начальных и граничных условий использовались метеоданные анализа NCEP с пространственным разрешением 0,5 град по широте и долготе. Учитывая международный и отечественный опыт работ по моделированию процессов в холодный период года были выбраны следующие схемы параметризации, описанные в [3]: для микрофизических процессов – WRF single-moment 3-class scheme; для потоков длинноволновой радиации – RRTM; для потоков коротковолновой радиации – схема Dudhia; параметризация пограничного слоя – схема университета Yonsei; для задания параметров подстилающей поверхности в городской застройке использована однослойная модель городского приземного подслоя UCM (Urban Canopy Model). Для параметризации процессов в почве и на поверхности – схема Noah. Схема Noah, описывающая физические процессы взаимодействия между поверхностью и атмосферой, использует данные о категориях землепользования, содержащиеся в базе геоданных MODIS_land_use. MODIS – это спектрорадиометр среднего пространственного разрешения, который установлен на американских ресурсных спутниках Terra и Aqua. С его помощью получены подробные данные о географическом распределении характеристик земной поверхности, которые используются в качестве входных геоданных для моделирования взаимодействия атмосферы с подстилающей поверхностью. До недавнего времени набор геоданных MODIS включал 20 классов: леса вечнозеленые хвойные, вечнозеленые широколиственные, узколиственные, широколиственные, смешанные; земли, поросшие кустарниками различного типа, влажные и сухие саванны, луга, заболоченные участки, пастбища, урбанизированные территории, заснеженные и ледяные пустыни, пустыни, различные виды тундры, водная поверхность.

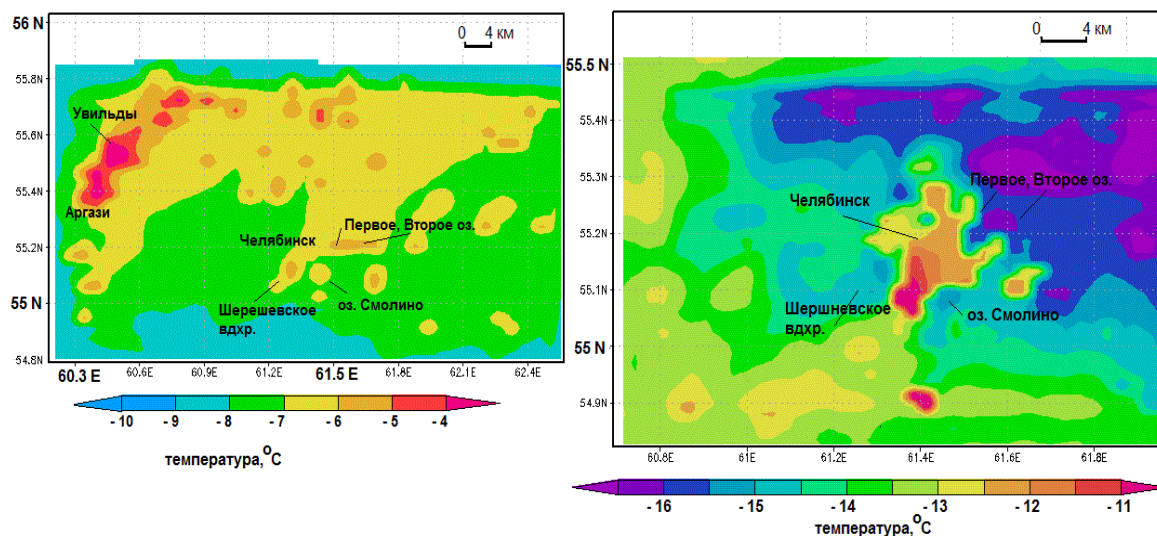
Изначально для расчета взаимодействия подстилающей поверхности и пограничного слоя атмосферы в модель WRF заложена обработка данных о температуре, которая различается для водной поверхности и для участка суши. Если размеры озера меньше шага сетки исходных метеоданных, либо озеро географически достаточно удалено от крупных водных объектов: морей или океана, в частности, для поверхности внутренних озер, то модель просто экстраполирует данные о температуре поверхности океана на той географической широте, на которой расположена моделируемая об-

ласть. Однако, это приводит к тому, что температура поверхности озера по результатам моделирования оказывается либо нереалистично высокой, либо низкой.

Для того чтобы исправить это несоответствие, предлагается в качестве решения использовать в модели дополнительный набор геоданных, в котором введен новый класс категорий землепользования – внутренние озера. В этом случае, если в пределах области моделирования располагаются озера или водохранилища, то WRF обрабатывает этот класс отдельно от морской или океанической поверхности. Это важно в нашем случае, поскольку зимой поверхность водоемов, окружающих Челябинск, полностью замерзает, и температура их поверхности приравнивается к температуре заснеженных участков суши. В этом случае температуре такого участка поверхности присваивается значение среднесуточной температуры воздуха, вычисляемое с помощью утилиты `avg_tsfc.exe`, предусмотренной при установке WRF. Используя такую процедуру результаты моделирования метеохарактеристик над городом, окруженным замерзшими озерами, становятся более реалистичными.

Учитывая наличие большого количества водоемов, окружающих г. Челябинск, при моделировании характеристик пограничного слоя атмосферы с помощью WRF использовался усовершенствованный набор данных MODIS, в который включен дополнительный класс категорий землепользования – внутренние озера.

На рисунке (слева) показано распределение температуры воздуха на уровне 2 м над земной поверхностью, смоделированное для 20 ноября 2011 г. в 5 ч утра по Гринвичу (11 ч местного времени). В этот период на территории Южного Урала уже установилась морозная погода, с устойчивыми отрицательными температурами, ночью ниже -10°C . На озерах полностью сформировался ледяной покров. Между тем, как видно по результатам моделирования, температура воздуха над замерзшими озером Увильды, Аргазинским водохранилищем нереалистично высокая от -5 до -4°C , в то время как над окружающими заснеженными территориями температуры ниже на 1–3 градуса. Вблизи г. Челябинска, где температура воздуха выше вследствие урбанизации, над озерами Первым, Вторым, Смолино, Шершневым водохранилищем она также выше на 1–2 градуса. После использования в расчетах базы геоданных MODIS с дополнительным классом «внутренние озера» распределение температуры становится более реалистичным. Рисунок (справа) демонстрирует ситуацию для 9 декабря того же года и тот же временной период. Как видим, температуры воздуха над озерами ниже температуры над сушей, над урбанизированной территорией на 3–4 градуса, что характерно для городского острова тепла в условиях антициклональной погоды.



Распределение температуры воздуха (°C) на уровне 2 м над поверхностью земли, полученное в результате расчета модели WRF. Слева: 20 ноября 2011 г. 05:00 UTC. Справа: 9 декабря 2011 г. 05:00 UTC

Таким образом, использование вспомогательной программы `avg_tsfc.exe`, которая рассчитывает среднесуточную температуру воздуха на основе входных данных материнской модели NCEP, а также ее применение для участков территории, занятых озерами и водохранилищами, позволяет получить более соответствующее действительности распределение метеопараметров при моделировании характеристик пограничного слоя атмосферы для изучения городского острова тепла.

Библиографический список

1. Ленская, О.Ю. Перспективы использования модели WRF для исследования острова тепла г. Челябинск / О.Ю. Ленская, С.М. Абдуллаев // Сборник докладов 64-й научной конференции профессорско-преподавательского состава ЮУрГУ – Челябинск. – 2012.
2. Salamanca, F. A Study of the Urban Boundary Layer Using Different Urban Parameterizations and High-Resolution Urban Canopy Parameters with WRF / F. Salamanca, A. Martilli, M. Tewari, F. Chen // Journal of Applied Meteorology and Climatology. – 2011. – Vol. 50. – P. 1107–1128.
3. Skamarock, W.C. A Description of the Advanced Research WRF Version 3. – NCAR Tech. Note, June 2008 // W.C. Skamarock. – <http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs> (дата обращения: 11.01.2013).

ФАКУЛЬТЕТ МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ

УДК 378.6 + 62.001.2

ВКЛЮЧЕНИЕ СТУДЕНТОВ В АКТИВНУЮ ПРОЕКТИРОВОЧНУЮ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ КАК УСЛОВИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ КОМПЕТЕНТНОСТИ БУДУЩИХ ИНЖЕНЕРОВ

Г.С. Кочеткова, Н.Н. Овчинникова

Дано понятие проектировочной деятельности. Проведена классификация проектов. Рассмотрены основные этапы работы над проектом. Определено влияние на формирование профессиональной компетентности будущих инженеров включение студентов в активную проектировочную деятельность.

Ключевые слова: проектировочная деятельность, компетентность.

Анализ исследований по проблеме профессиональной компетентности позволил нам выделить ряд обобщенных сущностных характеристик феномена «профессиональная компетентность»: 1) представляет собой общий оценочный термин, обозначающий способность к деятельности, применяемый к лицам определенного социально-профессионального статуса; 2) в содержательном плане помимо профессиональных знаний и умений включает личностные характеристики специалиста; 3) проявляется не в форме заученного знания, а как актуализация мыслительных умений специалиста, обеспечивающих возможность разрешать определенные классы задач, анализировать ход и результаты их решения, вносить целесообразные коррективы; 4) может быть сформирована только при условии преемственности всех ступеней единой системы непрерывного образования.

Исходя из вышеизложенного и понимая способность как «умение, а также возможности производить какие-нибудь действия», а готовность как «состояние, при котором все сделано, все готово», дадим определение профессиональной компетентности.

Профессиональная компетентность – это способность и готовность личности использовать теоретические знания и практический опыт для решения профессиональных задач.

Проектировочная деятельность для современного инженера, являясь стержневой в структуре его профессиональных обязанностей, требует формирования еще в процессе подготовки будущих специалистов и основывается на научно-техническом исследовании. Поэтому уровень профессиональной компетентности будущего инженера напрямую зависит от того,

насколько свободно он может осуществлять проектировочную деятельность в целом: формулировать задачу, находить способ решения, материализовать его в техническом объекте, осуществлять проверку эффективности его функционирования в условиях современной промышленности, оформлять документацию по проекту.

Под проектировочной деятельностью понимают деятельность студентов, направленную на усвоение программного материала, которая осуществляется через создание учебного проекта, его оформление и публичную защиту.

Ученые, исследуя особенности проектировочной деятельности в учебном процессе, пришли к следующим обобщениям:

- 1) проектировочная деятельность направлена в первую очередь на решение дидактических задач;
- 2) ее осуществление ориентировано на самостоятельность студентов;
- 3) ключевая проблема учебного проекта должна быть лично значимой для студента;
- 4) результат проектировочной деятельности всегда имеет материальный носитель.

Как правило, проектировочная деятельность реализуется в рамках метода проектов – системы обучения, при которой учащиеся приобретают знания и умения в процессе планирования и выполнения постепенно усложняющихся задач [1]. Приведем наиболее часто встречающиеся в научной литературе классификации учебных проектов. Классификации проектов приведены нами в таблице.

Таблица

Основание классификации	Виды проектов
Тип доминирующей деятельности в работе над проектом	Исследовательский, поисковый, творческий, прикладной, ознакомительно-ориентировочный проекты
Предметно-содержательная область	Монопроект, межпредметный проект
Характер контактов при работе над проектом	Внутриколлективный, межколлективный, межгородской, региональный, международный
Количество участников проекта	Индивидуальный, коллективный
Продолжительность выполнения проекта	Долгосрочный, среднесрочный, краткосрочный

В том случае, если не происходит включения студентов в активную проектировочную деятельность, будущие инженеры не приобретают ценный опыт осуществления проектировочной деятельности в целом. У будущего специалиста возникают сложности с формулированием задачи, нахождением способа ее решения и т. д. Все перечисленное свидетельствует о том, что затраты на организацию работы по включению студентов в

активную проектировочную деятельность значительно ниже достигаемого эффекта.

Несмотря на длительную историю практического использования понятия «проектирование» ни в зарубежной, ни в отечественной научной литературе нет общепризнанного толкования этого термина. Оно определяется как целенаправленная деятельность по решению задачи [3]; принятие решения при недостаточной информированности и высокой ответственности за ошибку [4]; итерационный процесс, при котором многократно принимается решение по разработке проекта и многократно моделируется объект проектирования [5]. В технической отрасли проектирование традиционно понимается как подготовительный этап производственной деятельности, как составная часть инженерного процесса, в котором выделяется три этапа: 1) изобретательство – создание идеи, общего плана, нахождение принципиального решения проблемы; 2) проектирование – создание на бумаге полной схемы строящегося объекта; 3) конструирование – детальная разработка схемы для массового производства [2].

Аналогичный подход к проектированию осуществляется при работе будущих инженеров над учебными проектами. Выделяются три основных этапа работы над проектом, а именно:

- *Изобретательство*. В целом охватывает деятельность будущего инженера по осознанию существующей проблемы и нахождению способа решения. Студент находит и изучает информацию по теме проекта пользуясь различными источниками информации (конспект лекций, консультации с преподавателем и однокурсниками, научная библиотека, Интернет и др.). Делает обобщение полученной информации, выбирает способы и методы осуществления проекта. Данная информация является базовой для следующего этапа проектирования.

- *Моделирование*. Осуществляется представление выделенных знаний в виде таблиц, схем, графов и т. д. с целью четкого и наглядного представление структуры знаний по дисциплине и связей между ними. Создается модель-конспект, в котором описываются методы решения, и дается характеристика программных и технических средств, которые будут использованы при выполнении проекта, составляется план выполнения проекта.

- *Конструирование*. На этом этапе осуществляется непосредственное воплощение проекта, согласно составленному на предыдущем этапе плану. Проводится оформление результатов проекта, готовится презентация для защиты проекта.

В качестве примера дадим характеристику некоторым видам учебных проектов, успешно реализуемых на дисциплинах математического цикла:

- *Исследовательский проект*. Проект, ориентированный на постановку и решение математической проблемы. Решение не обязательно обладает

научной новизной, но это решение связано с поиском нового способа. Студент проводит аргументацию актуальности данной проблемы, построение историографии, характеристику деятельности научных школ.

- *Информационный проект.* Проект, представляющий собой систематизированную подборку информации по той или иной проблеме. Студент осуществляет подбор материалов, их обработку, обобщение и представление в виде разработки, статьи и т. д. В представлении информационных проектов студент использует графики, схемы и рисунки.

- *Прикладной проект.* Проект, раскрывающий технологию решения конкретной проблемы или алгоритма деятельности, описание способа, системы рекомендации и т. д. Студент строит математическую модель задачи и осуществляет ее решение. Устанавливает межпредметные связи с физикой, экономикой, программированием.

Таким образом, активная проектировочная деятельность студентов в образовательном процессе обеспечивает их личностное развитие, придает образовательному процессу профессиональную направленность, помогает установить связь теории с практикой будущей информационной деятельности. Реализация данного условия усиливает блоки содержательно-технологического компонента системы: информационно-прикладной, так как при осуществлении всех видов проектов будущие инженеры используют пакеты прикладных программ, средства поиска, обработки и хранения информации и т.д.; специально-предметный за счет того, что создаваемые проекты имеют профессиональную направленность. Также это условие помогает осуществлению диагностического блока оценочно-коррекционного компонента, так как все виды проектов предполагают их оформление и защиту.

Библиографический список

1. Российская педагогическая энциклопедия: в 2 т. / гл. ред. В.В. Давыдов. – М.: Большая Российская энциклопедия, 1993. – Т. 1. – 608 с.
2. Яковлева, Н.О. Педагогическое проектирование: учеб.-практ. пособие / Н.О. Яковлева. – Челябинск: Изд-во ЧГПУ, 2001. – 124 с.
3. Archer, L.B / Systematic Methodology for Designs / L.B. Archer. – L., 1965.
4. Asimow, M. Introduction to Design, Englewood Cliffs, New Jersey, Prentice-Hall. – N.Y., 1962.
5. Booker, P.J. Written Contribution for Engineering / P.J. Booker. – L., 1964.

ОБ ОДНОМ КЛАССЕ КОРРЕКТНОСТИ ЗАДАЧИ С ОБРАТНЫМ ВРЕМЕНЕМ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

Е.В. Табаринцева

В работе рассматривается задача с обратным временем для полулинейного дифференциального уравнения. Так как данная задача поставлена некорректно, основными вопросами при ее исследовании являются вопросы построения устойчивого приближенного решения и оценки погрешности приближенного решения. Как правило, оценки погрешности методов приближенного решения неустойчивых задач рассматриваются на классах корректности, заданных с помощью линейных операторов. В настоящей работе получены оценки погрешности методов приближенного решения задачи с обратным временем на классе корректности, заданном с помощью нелинейного оператора.

Пусть H – гильбертово пространство, A – линейный неограниченный положительно определенный самосопряженный оператор в H с областью определения $D(A)$, плотной в H .

Рассмотрим задачу вычисления элемента $\varphi \in H$ такого, что решение задачи Коши

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= -Au + f(t, u(t)); \quad t \in (t_0; T); \\ u(t_0) &= \varphi, \quad \varphi \in H, \quad 0 < t_0 < T, \end{aligned} \quad (1)$$

удовлетворяет условию $u(T) = \chi$.

Здесь $f: [t_0; T] \times H \rightarrow H$ – отображение, удовлетворяющее условию Липшица по переменной u и условию Гельдера по переменной t , т. е. существуют постоянные $L > 0$, $K > 0$ и $0 < a < 1$, такие,

$$\|f(t_1, u_1) - f(t_2, u_2)\|_H \leq L \|u_1 - u_2\|_H + K |t_1 - t_2|^a$$

для всех $t_1, t_2 \in [t_0; T]$, $u_1, u_2 \in H$.

Зафиксируем число $r > 0$. Рассмотрим задачу Коши

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= -Au + f(t, u(t)); \quad t \in (0; T), \\ u(0) &= u_0. \end{aligned}$$

Рассмотрим множество

$$M = \{\varphi \in H : \|u_0\| \leq r\}.$$

Рассмотрим также множество $\tilde{M} = \{\varphi \in H : \|e^{At_0}\varphi\| \leq r\}$, определенное с помощью линейного оператора.

Предположим, что при заданном $\chi \in H$ существует точное решение $\varphi \in H$ нелинейной обратной задачи, принадлежащее заданному множеству $M \subset H$. Элемент $\chi \in H$ нам не известен, а вместо него дано приближенное значение $\chi_\delta \in H$, такое, что $\|\chi - \chi_\delta\| < \delta$. Требуется по исходным данным задачи определить приближенное решение задачи с обратным временем и оценить его отклонение от точного решения.

Рассмотрим задачу с обратным временем для соответствующего линейного уравнения, т. е. задачу вычисления элемента $\tilde{\varphi}_\tau \in H$ такого, что решение задачи Коши

$$\frac{dv}{dt} = -Av; \quad t \in (\tau; T), \quad (2)$$

$$v(\tau) = \tilde{\varphi}_\tau, \quad \tilde{\varphi}_\tau \in H, \quad 0 < t_0 \leq \tau < T,$$

удовлетворяет условию $v(T) = \tilde{\chi}$, где $\tilde{\chi} \in H$ заданный элемент.

Пусть $\Phi(\alpha, \mu)$ ($\alpha > 0, \mu \geq 0$)- функция, принимающая действительные значения, имеющая конечное число точек разрыва первого рода при любом $\alpha \geq 0$ и удовлетворяющая условиям, сформулированным в [1]. Рассмотрим семейство линейных операторов $R_\alpha^{T-t} : H \rightarrow H$, определенных равенством

$$R_\alpha^{T-t} = \Phi(\alpha, e^{-A(T-t)}).$$

Из результатов [1] следует, что в качестве приближенного решения линейной обратной задачи (2) можно рассматривать элемент

$$v_\alpha^\delta(\tau) = R_\alpha^{T-\tau} \chi_\delta \quad (3)$$

при подходящем выборе зависимости $\alpha = \alpha^*(\delta)$.

Обозначим $u_\delta^\alpha(t)$ решение интегрального уравнения

$$u_\delta^\alpha(t) = R_\alpha^{T-t} \chi_\delta - \int_t^T R_\alpha^{s-t} f(s, u_\delta^\alpha(s)) ds. \quad (4)$$

В качестве приближенного решения нелинейной обратной задачи будем рассматривать элемент

$$\varphi_\delta^{\alpha^*} = u_\delta^{\alpha^*}(t_0) \quad (5)$$

при подходящем выборе зависимости $\alpha = \alpha^*(\delta)$.

Рассмотрим следующие величины:

$$\Delta_M(\alpha, \delta) = \sup \{ \|\varphi_\delta^\alpha - \varphi\| : \varphi \in M, \|\chi - \chi_\delta\| \leq \delta \},$$

погрешность метода приближенного решения нелинейной задачи (1), определенного формулой (5), на множестве M

$$\tilde{\Delta}_M(\alpha, \delta) = \sup \{ \|R_\alpha^{T-t_0} \tilde{\chi}_\delta - \varphi\| : \varphi \in \tilde{M}, \|\tilde{\chi} - \tilde{\chi}_\delta\| \leq \delta \},$$

погрешность метода приближенного решения линейной задачи (2), определенного формулой (3), на множестве $\tilde{M}$.

Воспользуемся неравенством

$$\Delta_M(\alpha, \delta) \leq \Delta_1(\alpha) + \Delta_2(\alpha, \delta),$$

где

$$\begin{aligned}\Delta_2(\alpha, \delta) &= \sup_{\|\chi - \chi_\delta\| \leq \delta} \|\varphi_\delta^\alpha - \varphi^\alpha\|; \\ \Delta_1(\alpha) &= \sup_{\varphi \in M_i} \|\varphi^\alpha - \varphi\|.\end{aligned}$$

Аналогично,

$$\tilde{\Delta}_M(\alpha, \delta) \leq \tilde{\Delta}_1(\alpha) + \tilde{\Delta}_2(\alpha, \delta),$$

где

$$\begin{aligned}\tilde{\Delta}_2(\alpha, \delta) &= \sup_{\|\tilde{\chi} - \tilde{\chi}_\delta\| \leq \delta} \|R_\alpha^{T-t_0}(\tilde{\chi}_\delta - \tilde{\chi})\|; \\ \tilde{\Delta}_1(\alpha) &= \sup_{\varphi \in M} \|R_\alpha^{T-t_0}\tilde{\chi} - \varphi\|.\end{aligned}$$

Выполняются неравенства

$$\begin{aligned}\frac{1}{4}e^{-LT}e^{LT}\tilde{\Delta}_1(\alpha) &\leq \Delta_1(\alpha) \leq 4e^{LT}\tilde{\Delta}_1(\alpha); \\ \frac{1}{4}e^{-LT}e^{LT}\tilde{\Delta}_1(\alpha, \delta) &\leq \Delta_2(\alpha, \delta) \leq 4e^{LT}\tilde{\Delta}_1(\alpha, \delta).\end{aligned}$$

Теорема. Существует постоянная $\delta_0 > 0$, такая, что для всех $0 < \delta < \delta_0$ выполняются неравенства

$$\frac{1}{4}e^{-LT}e^{LT}\tilde{\Delta}_M(\alpha^*, \delta) \leq \Delta_M(\alpha^*, \delta) \leq 4e^{LT}\tilde{\Delta}_M(\alpha^*, \delta).$$

Следствие. Метод приближенного решения нелинейной обратной задачи (1), определенный равенством (5), оптимален по порядку на множестве M тогда и только тогда, когда метод приближенного решения линейной обратной задачи (2), определенный формулой (3), оптимален по порядку на множестве M .

Пример 1 (метод проекционной регуляризации). Обозначим через $\{E_\lambda : \lambda \geq 0\}$ разложение единицы, порожденное оператором A . Пусть A_α — линейный ограниченный оператор в H , определяемый формулой

$$A_\alpha u = \int_0^\alpha \lambda dE_\lambda u.$$

Вместо неустойчивой обратной задачи для уравнения (2) рассмотрим задачу вычисления элемента $\varphi^\alpha = u^\alpha(t_0)$, где $u^\alpha(t)$ удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned}\frac{du^\alpha(t)}{dt} &= -A_\alpha u^\alpha(t) + E_\alpha f(t, u^\alpha(t)), \quad t \in (t_0, T); \\ u^\alpha(T) &= E_\alpha \chi.\end{aligned}\tag{6}$$

Задача (6) соответствует методу приближенного решения нелинейной обратной задачи, определенному равенством (5), с функцией

$$\Phi(\alpha, \mu) = \begin{cases} 1/\mu, & \mu < \alpha \\ 0, & \mu > \alpha. \end{cases}$$

Пример 2 (метод вспомогательных граничных условий). Вместо неустойчивой задачи с обратным временем рассмотрим задачу

$$\begin{aligned}\frac{du}{dt} &= -Au + f(t, u(t)); \quad t \in (t_0; T), \\ u(T) + \alpha u(t_0) &= \chi_\delta, \quad 0 < t_0 < T.\end{aligned}$$

В качестве приближенного решения задачи с обратным временем будем рассматривать решение вспомогательной задачи при $t = t_0$. Сводя вспомогательную задачу к интегральному уравнению, нетрудно убедиться, что построенное приближенное решение удовлетворяет (5) при

$$\Phi(\alpha, \mu) = \frac{\mu}{1 + \alpha \mu^{T/t}}.$$

Библиографический список

1. Бакушинский, А.Б. Один общий прием построения регуляризующих алгоритмов для линейного некорректного уравнения в гильбертовом пространстве / А.Б. Бакушинский // ЖВМиМФ. – 1967. – Т. 7. – № 3. – С. 672–677.
2. Танана, В.П. Об оптимальном по порядку методе решения одной обратной задачи для параболического уравнения / В.П. Танана // Докл. РАН. – 2006. – Т. 407. – № 3. – С. 316–318.
3. Иванов, В.К. Дифференциально-операторные уравнения и некорректные задачи / В.К. Иванов, И.В. Мельникова, А.И. Филингов. – М.: Наука, 1995.

КОНЕЧНЫЕ ПРОСТЫЕ ГРУППЫ, В КОТОРЫХ ЦЕНТРАЛИЗАТОРЫ ЭЛЕМЕНТОВ С МАЛЫМ ЧИСЛОМ ПРОСТЫХ ДЕЛИТЕЛЕЙ

Р.Ж. Алеев, И.А. Тюрина

В работе описываются новые результаты и строятся новые примеры исследованных ранее классов групп.

Ключевые слова: группа, конечная группа, простое число, централизатор.

Пусть $w(n)$ – количество множителей в представлении натурального числа n в виде произведения простых чисел. Если H – подгруппа конечной группы G , то $w(H) = w(|H|)$ и $v(G) = \max \{w(C(g)) \mid g \in G \setminus Z(G)\}$. Если p – нечетное простое число, то

$$l(p^n) = \begin{cases} \max \left\{ w(p^n - 1), w\left(\frac{p^n + 1}{2}\right) \right\}, & \text{если } p^n \equiv 1 \pmod{4} \\ \max \left\{ w(p^n + 1), w\left(\frac{p^n - 1}{2}\right) \right\}, & \text{если } p^n \equiv -1 \pmod{4}. \end{cases}$$

В работах [1–4] доказаны следующие результаты.

Лемма 1. В конечной простой группе G условие $v(G) = 5$ выполняется тогда и только тогда, когда G изоморфна одной из следующих групп:

- 1) $PSL(2, p)$, $l(p) = 5$;
- 2) $PSL(2, p^2)$, $p \in \{7, 11, 13\}$;
- 3) $PSL(2, p^3)$, $l(p^3) = 5$
- 4) $PSL(2, p^5)$, $p = 2$ или $l(p^5) \leq 5$;
- 5) $PSL(2, 3^4)$, $PSL(3, 3)$, M_{11} , J_1 .

Лемма 2. В конечной простой группе G условие $v(G) = 6$ выполняется тогда и только тогда, когда G изоморфна одной из следующих групп:

- 1) $PSL(2, p)$, $l(p) = 6$;
- 2) $PSL(2, p^2)$, $l(p^2) = 6$;
- 3) $PSL(2, p^3)$, $l(p^3) = 6$
- 4) $PSL(2, p^5)$, $l(p^5) = 6$;
- 5) $PSL(2, 5^4)$, $PSL(2, 2^6)$, $PSL(2, 3^6)$, $PSL(3, 4)$,
 $PSU(3, 3)$, $PSU(3, 5)$, $Sz(8)$.

В качестве примеров для пунктов 1, 3, 4 леммы 1 и пунктов 1–4 леммы 2 указаны простые числа $p < 100$. Естественно возникает вопрос о построении большего числа примеров таких групп, а для этого необходимо рассматривать числа вида $p^n - 1$ при $n \leq 5$. Нетрудно заметить, что множители вида $p^n - 1$ при простом p очень часто встречаются в порядках простых и близких к ним групп. Поэтому задачи о спектре групп, которые изучаются школами В.Д. Мазурова и А.С. Кондратьева (как и многими другими) тоже приводят к изучению простых делителей чисел такого вида. Все это говорит о том, что задача о количестве простых делителей чисел вида $p^n - 1$ при простом p весьма интересна и может иметь разнообразные приложения.

Простое число q называется простым числом Софи Жермен, если $p = 2q + 1$ – также простое число. В этом случае будем называть пару (q, p) парой Софи Жермен.

Титчмарш, Харди и Рамунуджан, Туран, Эрдёш [5, Глава V, § 7] показали, что число различных (простых) делителей даже у числа $p - 1$ в среднем возрастает с ростом p (более точные формулировки и понятия в [5]). Поэтому нужно сделать ограничения на количество делителей числа $p - 1$ для простого p . Случай $2^n - 1$ для небольших n тривиален, поэтому будем рассматривать только нечётные простые p с условием, что количество простых делителей $p - 1$ равно 2. Тогда $q = \frac{p-1}{2}$ – простое число Софи Жермен и (q, p) – пара Софи Жермен.

Лемма 3. Пусть (q, p) – пара Софи Жермен, тогда

- 1) $w(p^2 - 1) = 2 + w(p + 1) \geq 5$ при $p \geq 7$,
- 2) $w(p^3 - 1) = 2 + w(p^2 + p + 1) \geq 3$,
- 3) $w(p^4 - 1) = 2 + w(p + 1) + w(p^2 + 1) \geq 7$ при $p \geq 7$,
- 4) $w(p^5 - 1) = 2 + w(p^4 + p^3 + p^2 + p + 1) \geq 3$.

Отметим, что все ограничения в лемме 3 существенны, так как $w(7^2 - 1) = w(48) = 5$, $w(5^3 - 1) = 3$, $w(11^4 - 1) = w(10) + w(12) + w(122) = 7$ и $w(7^5 - 1) = w(6) + w(2801) = 3$.

Доказательство леммы 3. Ясно, что $p \equiv 3 \pmod{4}$. Отсюда следует, что 4 делит $p + 1$. Поэтому $w(p + 1) \geq 3$. Теперь все понятно. $\square$

При $q = 2$ получаем $p = 5$ и $p^2 + p + 1 = 31$, при $q = 3$ получим $p = 7$ и $p^2 + p + 1 = 57$, а при $q = 5$ имеем $p = 11$ и $p^2 + p + 1 = 133$.

Теорема 1. Пусть (q, p) – пара Софи Жермен и $q > 5$.

1) Наименьшим простым делителем $p^2 + p + 1$ среди простых чисел $p < 19$ могут быть только 7 и 13.

2) Если 7 делит $p^2 + p + 1$, то $p \equiv 11 \pmod{84}$ или $p \equiv 23 \pmod{84}$, и эти возможности реализуются соответственно 11 и 23.

3) Если 13 делит $p^2 + p + 1$, то $p \equiv 35 \pmod{156}$ или $p \equiv 107 \pmod{156}$, и эти возможности реализуются соответственно 347 и 107.

4) Если 7^2 делит $p^2 + p + 1$, то $p \equiv 263 \pmod{588}$ или $p \equiv 275 \pmod{588}$, и эти возможности реализуются соответственно 263 и 863.

5) Если 13^2 делит $p^2 + p + 1$, то $p \equiv 191 \pmod{2028}$ или $p \equiv 1667 \pmod{2028}$, и эти возможности реализуются соответственно 2219 и 11807.

6) Если $7 \cdot 13 = 91$ делит $p^2 + p + 1$, то $p \equiv 191, 347, 107, 263 \pmod{1092}$, и эти возможности реализуются соответственно 1283, 347, 107 и 263.

7) Если $p^2 + p + 1$ – простое число, то $p \equiv 47, 59, 83 \pmod{84}$, и эти возможности реализуются соответственно 383, 59 и 167.

Доказательство. Докажем только 1), 2), и 7). Пусть простое число r делит $p^2 + p + 1$. Тогда r делит $p^3 - 1$. По малой теореме Ферма r делит $p^{r-1} - 1$. Следовательно r делит $p^d - 1$, где $d = \text{НОД}(3, r-1)$. Если $d = 1$, то r делит $\text{НОД}(p-1, p^2 + p + 1) = 3$, т.е. $r = 3$. Так как (q, p) – пара Софи Жермен, то $q = r = 3$, что противоречит условию. Таким образом $d = 3$, 3 делит $r-1$ и получаем $r \equiv 1 \pmod{7}$, что и доказывает утверждение.

1) Из малой теоремы Ферма получаем, что $p^3 \equiv 1 \pmod{7}$ и $p \not\equiv 1 \pmod{7}$. Это дает $p \equiv 2, 4 \pmod{7}$. Также ясно, что должно быть $p \equiv 2 \pmod{3}$ и $p \equiv 3 \pmod{4}$. По китайской теореме об остатках получаем требуемое.

2) Как в доказательстве утверждения 2) $p \equiv 3, 5, 6 \pmod{7}$, $p \equiv 2 \pmod{3}$ и $p \equiv 3 \pmod{4}$. Снова по китайской теореме об остатках получаем требуемое утверждение.

При $q = 2$ получаем $p = 5$ и $p^4 + p^3 + p^2 + p + 1 = 781 = 11 \cdot 71$, при $q = 3$ получим $p = 5$ и $p^4 + p^3 + p^2 + p + 1 = 2801$ – простое число, при $q = 5$ имеем $p = 11$ и $p^4 + p^3 + p^2 + p + 1 = 5 \cdot 3221$, а при $q = 11$ получаем $p = 23$ и $p^4 + p^3 + p^2 + p + 1 = 292561$ – простое число.

Теорема 2. Пусть (q, p) – пара Софи Жермен и $q > 11$.

1) Наименьшими простыми делителями числа $p^4 + p^3 + p^2 + p + 1$ среди простых чисел $p < 37$ могут быть только 11 и 31.

2) Если 11 делит $p^4 + p^3 + p^2 + p + 1$, то $p \equiv 47, 59, 71, 119 \pmod{132}$, и эти возможности реализуются соответственно 47, 59, 467 и 383.

3) Если число $p^4 + p^3 + p^2 + p + 1$ простое, то $p \equiv 35, 83, 95 \pmod{372}$ или $p \equiv 107, 131 \pmod{372}$, и эти возможности реализуются соответственно 563, 83, 227, 503 и 263.

4) Если $p^4 + p^3 + p^2 + p + 1$ – простое число, то $p \equiv 35, 83, 95 \pmod{132}$ или $p \equiv 107, 131 \pmod{132}$, и эти возможности реализуются соответственно 563, 83, 227, 503 и 263.

Доказательство. Рассуждения аналогичны доказательству теоремы 1. $\square$

Теоремы 1 и 2 позволяют значительно увеличить число примеров групп, удовлетворяющих ограничениям из лемм 1 и 2. Некоторые из построенных примеров приведены в таблице.

	p
$l(p) = 5$	47, 107, 167, 179, 467, 587, 887, 983, 1019, 1907, 2027, 2459, 2579, 2819, 2963, 3203, ...
$l(p^5) = 5$	5, 7, 11, 23, 47, ...
$l(p) = 6$	359, 503, 839, 1187, 1319, 1367, ...
$l(p^2) = 6$	47, 107, 167, 179, 263, ...
$l(p^3) = 6$	5, 7, 11, 83, ...
$l(p^5) = 6$	5, 7, 11, 47, 59, 263, 1307, 1523, ...

Библиографический список

1. Антонов, В.А. О конечных группах с малыми централизаторами элементов / В.А. Антонов, В.И. Зенков, И.А. Тюрина // Алгебра и лин. оптимиз. Труды межд. сем. памяти С.Н. Черникова. – Екатеринбург, 2002. – С. 44–46.
2. Антонов, В.А. О группах с малыми централизаторами, 2 / В.А. Антонов, В.И. Зенков, И.А. Тюрина // Междун. конф. «Алгебра и ее приложения»: тез. докл. – Красноярск, 2002. – С. 5–7.
3. Антонов, В.А. О группах с малыми централизаторами / В.А. Антонов, В.И. Зенков, И.А. Тюрина // Известия ЧНЦ (эл. журнал). – 2007. – № 2(36). – С. 2–5.
4. Тюрина, И.А. Конечные неразрешимые группы с тривиальным центром и малыми централизаторами нецентральных элементов / И.А. Тюрина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2006. – № 7. – С. 58–63.
5. Прахар, К. Распределение простых чисел / К. Прахар. – М.: Мир, 1967. – 512 с.

КРУГОВЫЕ ЕДИНИЦЫ ГРУППОВЫХ КОЛЕЦ ЦИКЛИЧЕСКИХ ГРУПП ПРОСТОГО ПОРЯДКА

Р.Ж. Алеев, С.А. Колясников

В данной работе описывается достаточно большая подгруппа конечного индекса группы единиц целочисленных групповых колец циклических групп простого порядка.

Ключевые слова: групповое кольцо, группа единиц кольца, циклическая группа, круговые единицы.

1. Введение. Основные понятия и результаты

Будем следовать подходу, развитому в работах [1–4], в более общем контексте центральных единиц целочисленных групповых колец конечных групп. В данной работе даётся приложение результатов, полученных для общего случая центральных единиц к случаю абелевых групп. Естественно, что необходимо начать изучение с самого «простого» случая (который может считаться *модельным*), когда рассматривается циклическая группа простого порядка $p > 3$ (случаи $p \in \{2, 3\}$ приводят к тривиальным единицам). Однако, даже в этом случае невозможно быть полностью уверенными в полном описании групп единиц, поскольку возникает такое препятствие как классическая теоретико-числовая задача полного описания единиц колец целых круговых полей. Однако круговые единицы хорошо описываются и составляют подгруппу конечного индекса во всей группе единиц кольца целых кругового поля.

Зафиксируем следующие обозначения:

$G = \langle x \rangle$ – циклическая группа простого порядка $p > 3$,

α – первообразный (комплексный) корень степени p ,

$\mathbb{Q}_p = \mathbb{Q}(\alpha)$ – p -е круговое поле,

$m = (p-3)/2$,

g – первообразный корень по модулю p ,

$\sigma \in \text{Gal}(\mathbb{Q}_p)$ с условием $\sigma(\alpha) = \alpha^g$,

$\tau_i = \sigma^{i-1} \left(\frac{1 - \sigma(\alpha)}{1 - \alpha} \right)$ для $i \in \{1, \dots, m\}$.

Следующий результат полезен.

Предложение. В группе единиц кольца целых кругового поля $\mathbb{Q}_p$ подгруппа

$$K_p = \langle -\alpha \rangle \times \prod_{i=1}^m \langle \tau_i \rangle$$

имеет конечный индекс $h_+(p)$.

Индекс $h_+(p)$ равен числу классов максимального действительного подполя поля $\mathbb{Q}_p$. Отметим также, что $h_+(p)=1$ для $p < 71$ и при условии справедливости обобщённой гипотезы Римана $h_+(p)=1$ для $p < 163$ (см. [5]).

В работе [2] были введены локальные единицы, которые в рассматриваемом случае задаются следующим образом. Все неглавные характеры группы G алгебраически сопряжены и потому для любого фиксированного неглавного характера $\chi \in \text{Irr}(G)$ имеем

$$\text{Irr}(G) \setminus \{1_G\} = \left\{ \chi^{\sigma^i} \mid i \in \{0, \dots, p-2\} \right\}.$$

Тогда единице λ кольца целых поля $\mathbb{Q}_p$ соответствует локальная единица

$$u(\lambda) = 1 + \sum_{i=0}^{p-2} \sigma^i(\lambda) e(\chi^{\sigma^i}),$$

где $e(\chi^{\sigma^i})$ – минимальный центральный идемпотент комплексной групповой алгебры $\mathbb{C}G$, соответствующий характеру χ^{σ^i} .

В силу вышеизложенного ограничимся только круговыми единицами кольца целых кругового поля $\mathbb{Q}_p$, соответствующие локальные единицы назовём *круговыми*, и они образуют подгруппу $K(G)$ группы единиц кольца целых рациональной групповой алгебры $\mathbb{Q}G$, изоморфную подгруппе K_p круговых единиц кольца целых кругового поля $\mathbb{Q}_p$.

Основным результатом является следующий.

Теорема 1.

$$K(G) \cap U(\mathbb{Z}G) = \langle -x \rangle \times \left\langle u \left(-\tau_m^{\frac{p-1}{2}} \right) \right\rangle \times \prod_{i=1}^{m-1} \left\langle u \left(\tau_i \tau_m^{p-2} \right) \right\rangle.$$

В случае, когда $h_+(p)=1$, имеем $U(\mathbb{Z}G) \subset K(G)$.

2. Доказательство теоремы

Лемма 1. Для любого $i \in \{1, \dots, m\}$

$$\text{tr } \tau_i = p - g.$$

Доказательство.

$$\text{tr } 1 = p - 1 \text{ и для } k \in \{1, \dots, p-1\} \text{ имеем } \text{tr } \alpha^k = \sum_{j=1}^{p-1} \alpha^j = -1.$$

Так как $\tau_i = 1 + \alpha^{g^{i-1}} + \dots + \alpha^{(g-1)g^{i-1}}$, то всё доказано. $\square$

Лемма 2. Для любого натурального k и любого $i \in \{1, \dots, m\}$

$$\text{tr } \tau_i^k \equiv -g^k \pmod{p}.$$

Доказательство. Произвольные элементы β и γ из $\mathbb{Q}_p$ разложим по базису $\alpha, \dots, \alpha^{p-1}$. Тогда

$$\begin{aligned} \text{tr } \beta\gamma &= \sum_{k=2}^{2p-2} \left(\sum_{i+j=k} c_i d_j \right) \text{tr } \alpha^k = \sum_{k=2}^{2p-2} \left(\sum_{i+j=k} c_i d_j \right) \text{tr } \alpha^k (-1) + p \left(\sum_{i=1}^{p-1} c_i d_{p-i} \right) = \\ &= -\text{tr } \beta \cdot \text{tr } \gamma + p \left(\sum_{i=1}^{p-1} c_i d_{p-i} \right) \equiv -\text{tr } \beta \cdot \text{tr } \gamma \pmod{p}. \end{aligned}$$

Отсюда по индукции и лемме 1 получаем нужное. $\square$

Лемма 3.

1. Для любого $i \in \{1, \dots, m\}$ имеем $\text{tr } \tau_i^k \equiv -1 \pmod{p}$ тогда и только тогда, когда $p-1$ делит k .

2. $\text{tr } \tau_i^{\frac{p-1}{2}} \equiv 1 \pmod{p}$.

3. $\text{tr } \tau_i^k \not\equiv \pm 1 \pmod{p}$ для $k \in \{1, \dots, m\}$.

Доказательство. Докажем только утверждение 1, остальные доказываются аналогично.

По определению первообразного корня $\langle g \rangle = U(\mathbb{Z}_p)$. Поэтому

$$g^k \equiv 1 \pmod{p} \Leftrightarrow p-1 \text{ делит } k.$$

По лемме 2

$$\text{tr } \tau_i^k \equiv -g^k \equiv -1 \pmod{p} \Leftrightarrow p-1 \text{ делит } k. \quad \square$$

Следующий результат легко следует из леммы 3 и начала доказательства леммы 2.

Лемма 4. Пусть $\varepsilon \in \{1, -1\}$, $x_1, \dots, x_m$ — целые числа. Тогда

$$\varepsilon u_\chi \left(\tau_1^{x_1} \cdots \tau_m^{x_m} \right) \in U(\mathbb{Z}G) \Leftrightarrow x_1 + \cdots + x_m \equiv \frac{1-\varepsilon}{2} \cdot \frac{p-1}{2} \pmod{(p-1)}.$$

Доказательство теоремы. Для любого $i \in \{1, \dots, m-1\}$ положим

$$\lambda_i = \tau_i \tau_m^{\frac{p-1}{2}} \text{ и } \mu = -\tau_m^{\frac{p-1}{2}}.$$

Рассмотрим случай $\varepsilon = 1$. Имеем

$$\tau_1^{x_1} \cdots \tau_m^{x_m} \text{ с условием } x_1 + \cdots + x_m \equiv 0 \pmod{(p-1)}.$$

Теперь

$$\begin{aligned} \tau_1^{x_1} \cdots \tau_m^{x_m} &= \lambda_1^{x_1} \cdots \lambda_{m-1}^{x_{m-1}} \cdot \tau_m^{x_m - (p-2)(x_1 + \cdots + x_{m-1})} = \\ &= \lambda_1^{x_1} \cdots \lambda_{m-1}^{x_{m-1}} \cdot \tau_m^{-(p-2)(x_1 + \cdots + x_m) + (p-1)x_m}. \end{aligned}$$

Если $x_1 + \dots + x_m = k(p-1)$, то

$$\begin{aligned} -(p-2)(x_1 + \dots + x_m) + (p-1)x_m &= -(p-2)k(p-1) + (p-1)x_m = \\ &= \frac{p-1}{2} \cdot 2 \cdot (-k(p-2) + x_m). \end{aligned}$$

Отсюда

$$\tau_1^{x_1} \dots \tau_m^{x_m} = \lambda_1^{x_1} \dots \lambda_{m-1}^{x_{m-1}} \cdot \mu^{2(-k(p-2)+x_m)}.$$

В случае, когда $\varepsilon = -1$ аналогично получим

$$-\tau_1^{x_1} \dots \tau_m^{x_m} = \lambda_1^{x_1} \dots \lambda_{m-1}^{x_{m-1}} \cdot \mu^{-k(p-2)+2(-k(p-2)+x_m)}. \quad \square$$

Более наглядное описание подгруппы $K(G) \cap U(\mathbb{Z}G)$ было получено в работе [6]. Покажем в следующем разделе что результат полученный выше к нему сводится с помощью замены базиса.

3. Описание через круговой многочлен

Пусть g ($g > 2$) и h различные простые числа, абсолютные значения

первообразных корней по модулю p . Обозначим через $\omega_i = \alpha^{\frac{1-g}{2} \tau_{\text{ind}(i)+1}}$,

$\varepsilon_i = \omega_{ih} \omega_i^{-1} = \alpha^{\frac{(1-g)(h-1)}{2} i} \Phi_{gh}(\alpha^i)$, где $\Phi_{gh}(x)$ – круговой многочлен. Тогда получаем следующий результат.

Теорема 2.

$$K(G) \cap U(\mathbb{Z}G) = \langle -x \rangle \times \prod_{i=1}^m \langle u_i \rangle, \text{ где } u_i = x^{\frac{(1-g)(h-1)}{2} i} \Phi_{gh}(x^i).$$

Библиографический список

1. Алеев, Р.Ж. Центральные единицы целочисленных групповых колец конечных групп / Р.Ж. Алеев // Докл. РАН. – 369, № 2. – 1999. – С. 151–152.
2. Алеев, Р.Ж. Единицы полей характеров и центральные единицы целочисленных групповых колец конечных групп / Р.Ж. Алеев // Матем. Труды. – 3, № 1. – 2000. – С. 3–37.
3. Алеев, Р.Ж. Числа Хигмана конечных групп / Р.Ж. Алеев // Матем. Труды. – 3, № 2. – 2000. – С. 3–28.
4. Алеев, Р.Ж. Центральные элементы целочисленных групповых колец / Р.Ж. Алеев // Алгебра и логика. – 39, № 5. – 2000. – С. 513–525.
5. F. van der Linden. Class number computations of real abelian number fields // Math. Comp. – 1982. – Vol. 39. – P. 693–707.
6. Колясников, С.А. Единицы целочисленного группового кольца циклической группы простого порядка и круговой многочлен / С.А. Колясников // Вестник ЧГАУ. – 2002. – Т. 36. – С. 76–81.

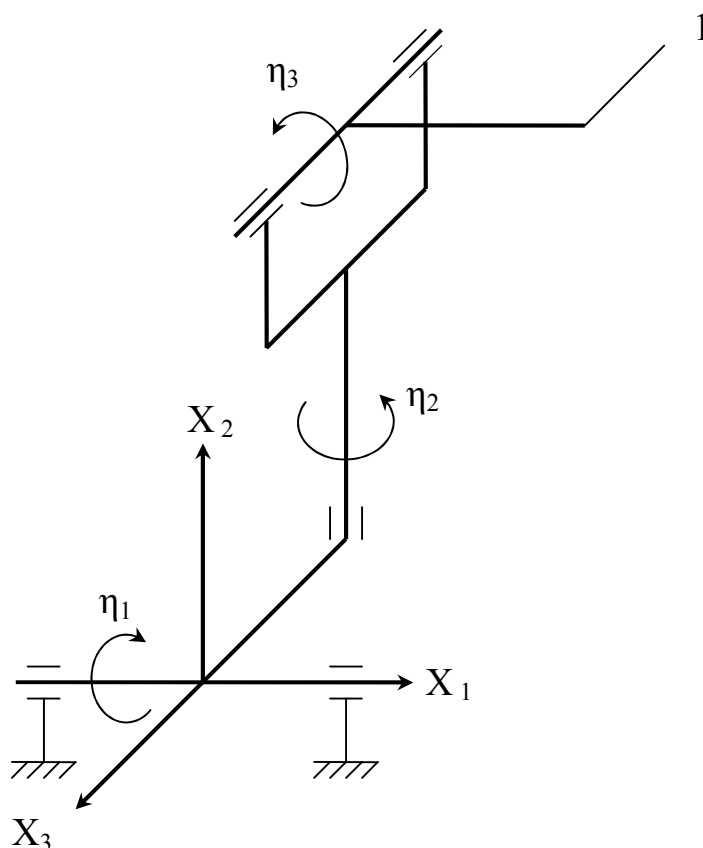
К ЗАДАЧЕ ПРИВЕДЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ МНОГОСВЯЗНОГО ОБЪЕКТА К СИСТЕМЕ ЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

А.А. Брагина

В работе предложен алгоритм построения математической модели многосвязного электромеханического манипуляционного робота (МР), приводимой к классическому виду линейной системы дифференциальных уравнений.

Ключевые слова: опорные и обобщенные координаты, обобщенные силы, структурная матрица, тензор инерции.

Сформируем модель динамики МР, исполнительный механизм которого составлен из n шарнирно связанных между собой звеньев и сопряжен с системой n исполнительных приводов, конкретизируя ее далее для МР, кинематическая схема которого представлена на рисунке.



Кинематическая схема манипулятора робота:

1 – характеристическая точка крепления рабочего органа

При построении модели функционирование МР будем рассматривать с общих позиций движения электромеханических систем, что позволяет получить уравнения движения системы в форме уравнений Лагранжа–Максвелла [1]. Следуя [2], назовем звенья манипулятора с соответствующими приводами опорными телами МР. Введем координаты опорного тела (опорные координаты). В качестве «механических» опорных координат примем координаты центра инерции тела x_{c_k} в неподвижной системе координат Ox_k ($k=1,2,3$) и эйлеровы углы связанных осей ψ, ϑ, γ , «электрическими» опорными координатами будем считать в соответствии с известным в теории цепей принципом дуальности заряды Q_a, Q_b , протекающие через поперечные сечения обмоток якоря и возбуждения электродвигателей приводов. Полную кинетическую энергию опорного тела определим выражением

$$T_k = \frac{1}{2} m \dot{x}_{c_i} \dot{x}_{c_k} + \frac{1}{2} (J_{c_{ik}} \varphi_{ip} \varphi_{kq}) \dot{\psi}_p \dot{\psi}_q + \frac{1}{2} L_a \dot{Q}_a^2 + \frac{1}{2} L_b \dot{Q}_b^2 + M \dot{Q}_a \dot{Q}_b \quad (1)$$

$i, k, p, q = 1, 2, 3.$

Здесь m – масса опорного тела, $J_{c_{ik}}$ – тензор инерции тела, $\dot{Q}_i, \dot{Q}_k$ – токи обмоток якоря и возбуждения электродвигателя, L_a, L_b – собственные, M – взаимная – индуктивности обмоток якоря и возбуждения, $\varphi_{ip}, \varphi_{kq}$ – матрицы преобразования, связывающие угловые скорости тела, заданные в связанной системе координат с началом в центре инерции опорного тела, с эйлеровыми углами. Введем обозначения опорных координат $\xi_p, p=1, \dots, 8$, и перейдем далее индексным обозначениям, снимающим громоздкость выражений. Кинетическая энергия опорного тела примет вид

$$T_k = b_{pq} \dot{\xi}_p \dot{\xi}_q \quad i, p = 1, \dots, 8, \quad (2)$$

где

$$b_{pq} = \begin{pmatrix} N & 0 & 0 \\ 0 & H_{lt} & 0 \\ 0 & 0 & L_{rs} \end{pmatrix}, \quad N = \begin{pmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & m \end{pmatrix}, \quad L_{rs} = \begin{pmatrix} L_a & \frac{M}{2} \\ \frac{M}{2} & L_b \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$H_{lt} = (J_{c_{ik}} \varphi_{il} \varphi_{kl}) \quad p, q = 1, \dots, 8, \quad r, s = 1, 2, \quad i, k, l, t = 1, 2, 3. \quad (4)$$

Структуру манипулятора определяет способ соединения опорных тел, описываемый уравнениями связей. После их наложения число степеней свободы МР задается его обобщенными координатами, которые однозначно определяют опорные координаты МР. Будем считать механические связи голономными и стационарными, что характерно для большинства МР, и представим уравнения связей в виде:

$$\xi_p = \xi_p(\eta_\lambda), \quad \lambda = 1, \dots, m, \quad p = 1, \dots, 8n, \quad m = m_m + m_e, \quad (5)$$

где η_λ – обобщенные координаты МР, имеющего m_m «механических» и m_e «электрических» степеней свободы. Дифференцируя уравнения связей (5) по времени, для склерономных связей имеем:

$$\dot{\xi}_p = \frac{\partial \xi_p}{\partial \eta_\lambda} \dot{\eta}_\lambda, \quad \ddot{\xi}_p = \frac{\partial^2 \xi_p}{\partial \eta_\lambda \partial \eta_\mu} \dot{\eta}_\lambda \dot{\eta}_\mu + \frac{\partial \xi_p}{\partial \eta_\lambda} \ddot{\eta}_\lambda, \quad \lambda, \mu = 1, \dots, m, \quad p = 1, \dots, 8n, \quad (6)$$

откуда следует

$$\frac{\partial \dot{\xi}_p}{\partial \dot{\eta}_\lambda} = \frac{\partial \xi_p}{\partial \eta_\lambda} \quad (7)$$

Перейдем к записи кинетической энергии МР в обобщенных координатах. Из соотношения (2), записанного для МР,

$$T = b_{pq} \dot{\xi}_p \dot{\xi}_q, \quad \lambda = 1, \dots, m, \quad p = 1, \dots, 8n, \quad (8)$$

обозначив $b_{pq} \frac{\partial \xi_p}{\partial \eta_\lambda} \frac{\partial \xi_q}{\partial \eta_\mu} = c_{\lambda\mu}$, получим

$$T = \frac{1}{2} c_{\lambda\mu} \dot{\eta}_\lambda \dot{\eta}_\mu, \quad \lambda, \mu = 1, \dots, m, \quad (9)$$

где $c_{\lambda\mu}$ – тензор инерции МР, вычисленный по приведенной формуле.

В уравнениях Лагранжа II рода, описывающих движение динамической системы,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{\eta}_\lambda} \right) - \frac{\partial T}{\partial \eta_\lambda} = -Y_\lambda, \quad \lambda, \mu = 1, \dots, m, \quad (10)$$

обобщенные силы Y_λ даются внешними силами и моментами и определяются из выражения элементарной работы. Так как связи не зависят от времени, возможные перемещения опорных тел совпадают с истинными перемещениями. Левые части уравнений (10) содержат слагаемые, которыми определяются вращающие моменты на выходных валах приводов, и элементарная работа δA и обобщенные силы Y_λ при переходе к обобщенным координатам МР могут быть представлены в виде

$$\delta A = X_p \frac{\partial \xi_p}{\partial \eta_\lambda} d\eta_\lambda, \quad Y_\lambda = X_p \frac{\partial \xi_p}{\partial \eta_\lambda} = s_{\lambda\mu} \eta_\mu, \quad p = 1, \dots, 8n, \quad \lambda = 1, \dots, m, \quad (11)$$

где X_p – главные векторы и главные моменты внешних сил, $s_{\lambda\mu}$ – известная матрица. Из (9)–(11) имеем систему линейных дифференциальных уравнений второго порядка, описывающих динамику МР:

$$c_{\lambda\mu}\ddot{\eta}_{\mu} + s_{\lambda\mu}\eta_{\mu} = 0 \quad \lambda = 1, \dots, m. \quad (12)$$

Перейдем к векторной форме записи системы (12). Введем матрицы $S = (s_{\lambda\mu})$, $C = (c_{\lambda\mu})$ и вектор $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_m)^T$ $\lambda, \mu = 1, \dots, m$, тогда система (12) примет вид

$$C\ddot{\eta} + S\eta = 0 \quad \lambda, \mu = 1, \dots, m. \quad (13)$$

Полагая, что C – неособая матрица, получим:

$$\ddot{\eta} + C^{-1}S\eta = 0 \quad (14)$$

Перейдем к системе $2m$ уравнений первого порядка. Обозначим

$\dot{\eta} = (\dot{\eta}_1, \dots, \dot{\eta}_m)^T = h$ и построим $2m$ -мерный вектор $v = \begin{pmatrix} \eta \\ h \end{pmatrix}$. Тогда для вектора v имеем систему

$$\dot{v} = Bv. \quad (15)$$

Здесь $B = \begin{pmatrix} 0 & E_m \\ -C^{-1}S & 0 \end{pmatrix}$, 0 – нулевые матрицы порядка m .

Представленный алгоритм позволяет синтезировать модель динамики робота с произвольной кинематической схемой манипулятора. Может быть использован на стадии проектирования при выборе конструктивных вариантов манипулятора и решении задач синтеза стабилизирующего управления.

Библиографический список

1. Ширяев, В.И. Синтез алгоритма сигнальной адаптивной стабилизации манипуляционного робота с электроприводами / В.И. Ширяев, А.А. Брагина // Тр. Междунар. конф. с элементами научной школы для молодежи. – СПб.: Политехника-сервис, 2010. – С. 219–227.
2. Корнев, Г.В. Целенаправленная механика управляемых манипуляторов / Г.В. Корнев. – М.: Наука, 1979. – 447 с.

ОБ ИСТЕЧЕНИИ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СМЕСИ В ВАКУУМ

И.В. Березанский, В.С. Суров

Для многоскоростной модели гетерогенной среды, в которой учтены свойства смеси в целом, получено решение автомодельной задачи об истечении многокомпонентной смеси в вакуум. Представлены результаты расчетов истечения различных водно-воздушных смесей.

Ключевые слова: многокомпонентная многоскоростная среда, гиперболические системы уравнений в частных производных, автомодельное решение.

В настоящей работе используется модель среды, учитывающая собственные скорости составляющих смесь фракций [3]. В этой модели, в отличие от моделей из работ [4–5], вводятся параметры, характеризующие свойства смеси в целом, что позволяет использовать ее при моделировании волновых процессов, например, в пузырьковых жидкостях.

Модель гетерогенной среды. Система уравнений n -компонентной смеси с первыми m сжимаемыми фракциями, описывающая течение многоскоростной гетерогенной среды [3], имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} &= 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} - c^2 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) &= 0, \\ \frac{\partial \alpha_i \rho_i^0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_i \rho_i^0 u_i}{\partial x} &= 0, \quad \alpha_i \rho_i^0 \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial \alpha_i p}{\partial x} = \lambda_i (u - u_i) \equiv S_i, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\alpha_i \rho_i^0 \left(\varepsilon_i + \frac{1}{2} u_i^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\alpha_i \rho_i^0 \left(\varepsilon_i + \frac{1}{2} u_i^2 \right) u_i \right] &+ \\ + \frac{\partial \alpha_i p u_i}{\partial x} &= \lambda_i u_i (u - u_i), \quad i = 1, \dots, m-1, \\ \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_j u_j}{\partial x} &= 0, \quad \alpha_j \rho_j^0 \left(\frac{\partial u_j}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_j}{\partial x} \right) + \frac{\partial \alpha_j p}{\partial x} = \lambda_j (u - u_j) \equiv S_j, \\ j &= m+1, \dots, n, \end{aligned} \tag{1}$$

где u , ρ и c – осредненные скорость, плотность и скорость звука в смеси в целом, p – давление, α_k – объемная доля k -й составляющей смеси, ρ_k^0 – истинная плотность k -й фракции, $k = i, j$.

При расчете сил сопротивления полагалось, что они пропорциональны

разнице скоростей смеси в целом и отдельного компонента.

Поведение сжимаемых фракций для определенности будем описывать с помощью двучленного уравнения состояния:

$$\varepsilon_i = \varepsilon_i(p, \rho_i^0) = \frac{p - c_{*i}^2 (\rho_i^0 - \rho_{*i})}{\rho_i^0 (\gamma_i - 1)} = \frac{b_i + pB_i}{\rho_i^0} - d_i, \quad (2)$$

где $B_i = 1/(\gamma_i - 1)$, $d_i = c_{*i}^2 B_i$, $b_i = d_i \rho_{*i}$ (γ_i , ρ_{*i} , c_{*i} – константы, индивидуализирующие i -ю фракцию).

При вычислении скорости звука в смеси использовалась формула обобщенно-равновесной модели [6]:

$$c = \sqrt{\frac{b_m + p \left[1 + B_m - \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\alpha_i (b_{im} + pB_{im})}{b_i + pB_i} \right]}{\rho \left[B_m + \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\alpha_i (b_m B_i - b_i B_m)}{b_i + pB_i} \right]}}, \quad (3)$$

где $b_{im} = b_i - b_m$, $B_{im} = B_i - B_m$.

Автомодельное решение. Решение системы (1) будем искать в виде $\rho = \rho(\xi)$, $u = u(\xi)$, $p = p(\xi)$, $\rho_i^0 = \rho_i^0(\xi)$, $u_i = u_i(\xi)$, $\alpha_i = \alpha_i(\xi)$, $u_j = u_j(\xi)$, $\alpha_j = \alpha_j(\xi)$, где $\xi = x/t$. При специальном выборе коэффициентов сопротивления вида $\lambda_i = \lambda_i^*/t$ и $\lambda_j = \lambda_j^*/t$, система (1) приводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dp}{d\xi} &= \Phi, \quad \frac{du}{d\xi} = -\frac{(u - \xi)\Phi}{\rho c^2}, \quad \frac{d\rho}{d\xi} = \frac{\Phi}{c^2}, \\ \frac{du_i}{d\xi} &= \frac{(u_i - \xi) \left[\rho_i^0 S_i (\alpha_i G_i + \rho_i^0 F_i) - (\alpha_i G_i + \rho_i^0 F_i + pE_i)\Phi \right]}{\rho_i^0 \left[(\alpha_i G_i + \rho_i^0 F_i)(u_i - \xi)^2 - pF_i \right]}, \\ \frac{d\alpha_i}{d\xi} &= \frac{\alpha_i \left\{ \left[F_i + E_i(u_i - \xi)^2 \right] \Phi - \rho_i^0 F_i S_i \right\}}{(\alpha_i G_i + \rho_i^0 F_i)(u_i - \xi)^2 - pF_i}, \\ \frac{d\rho_i^0}{d\xi} &= \frac{\left[\alpha_i G_i + pE_i - \rho_i^0 E_i(u_i - \xi)^2 \right] \Phi - \alpha_i \rho_i^0 G_i S_i}{(\alpha_i G_i + \rho_i^0 F_i)(u_i - \xi)^2 - pF_i}, \quad i = 1, \dots, m-1, \\ \frac{du_j}{d\xi} &= -\frac{(u_j - \xi)(\rho_j^0 S_j - \Phi)}{p - \rho_j^0 (u_j - \xi)^2}, \\ \frac{d\alpha_j}{d\xi} &= \frac{\alpha_j (\rho_j^0 S_j - \Phi)}{p - \rho_j^0 (u_j - \xi)^2}, \quad j = m+1, \dots, n, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\text{где } E_i = \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial p} = \frac{B_i}{\rho_i^0}, \quad F_i = \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \rho_i^0} - \frac{p}{(\rho_i^0)^2} = -\frac{b_i + p(1 + B_i)}{(\rho_i^0)^2}, \quad G_i = \frac{p}{\alpha_i \rho_i^0},$$

$$\Phi \equiv - \frac{\sum_{i=1}^{m-1} \frac{\alpha_i \rho_i^0 F_i S_i}{[(\alpha_i G_i + \rho_i^0 F_i)(u_i - \xi) - p F_i]} \frac{\partial f}{\partial \alpha_i} + 2(u - \xi)}{\frac{\partial f}{\partial p} + \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \rho} + \sum_{i=1}^{m-1} \frac{[F_i + E_i(u_i - \xi)^2]}{[(\alpha_i G_i + \rho_i^0 F_i)(u_i - \xi) - p F_i]} \frac{\partial f}{\partial \alpha_i} + \frac{2(u - \xi)^2}{\rho f}}.$$

Система обыкновенных дифференциальных уравнений (4) интегрируется от $\xi = \xi_-$, где параметры смеси совпадают с начальным состоянием ($p = p_0$, $\rho = \rho_0$, $u = u_i = u_j = 0$, $\rho_i^0 = \rho_{i0}^0$, $\alpha_i = \alpha_{i0}$, $\alpha_j = \alpha_{j0}$) до ξ_+ , которому соответствует значение давления $p = 0$. Величина ξ_- находится из соотношения

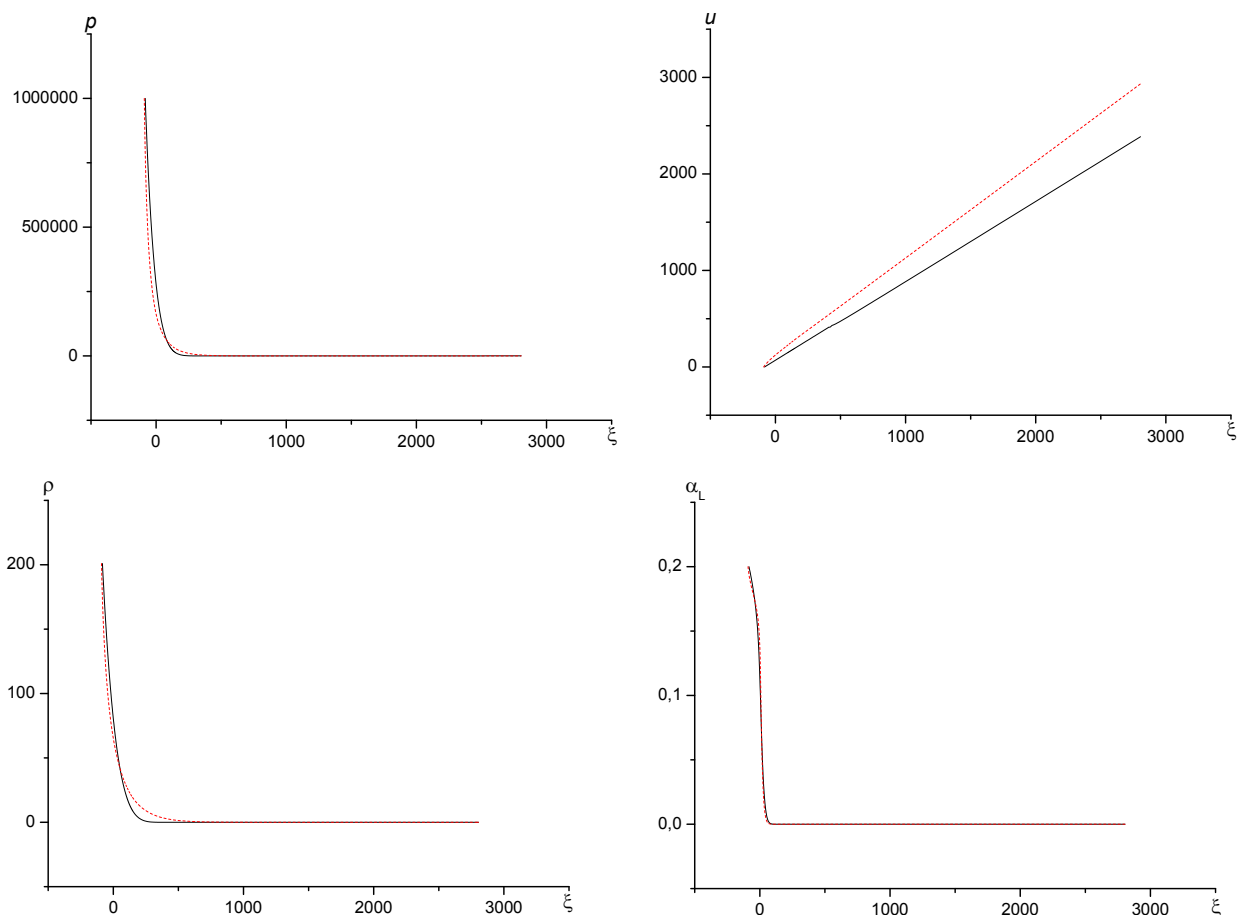
$$\xi_- = -c_0 = - \sqrt{\frac{b_m + p_0 \left[1 + B_m - \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\alpha_{i0}(b_{im} + p_0 B_{im})}{b_i + p_0 B_i} \right]}{\rho_0 \left[B_m + \sum_{i=1}^{m-1} \frac{\alpha_{i0}(b_m B_i - b_i B_m)}{b_i + p_0 B_i} \right]}},$$

где c_0 – скорость звука в невозмущенной смеси. Из решения системы (4) также может быть найдена скорость «головы» фронта волны разрежения, которая вычисляется из выражения $u_+ = u(\xi_+)$.

Численное моделирование. В качестве примера использования приведенного выше алгоритма расчета рассмотрим истечение газожидкостной смеси в вакуум. Сначала будем полагать, что жидкая фракция является несжимаемой, т. е. $\rho_L^0 = \text{const}$, а газ идеальным: $\gamma = 1,4$, $c_{*G} = 0$, $\rho_{G0}^0 = \rho_{G*} = 1,19 \text{ кг/м}^3$. Затем учтем сжимаемость жидкой составляющей смеси: $\gamma_L = 5,59$, $c_{*L} = 1500 \text{ м/с}$, $\rho_{L0}^0 = \rho_{*L} = 1000 \text{ кг/м}^3$. Исходные данные для рассматриваемой задачи следующие: $p_0 = 10^6 \text{ Па}$, $\alpha_{L0} = 0,8$, $S_L = 0$.

На рисунке отмечены зависимости распределений $p(\xi)$, $u(\xi)$, $\rho(\xi)$, $\alpha_L(\xi)$ в газожидкостной смеси, полученные в расчетах.

Заключение. Представлено решение автомодельной задачи об истечении многокомпонентной смеси в вакуум, полученное в рамках многоскоростной модели [3], которое помимо самостоятельного значения, также может быть использовано при тестировании численных методов, предназначенных для интегрирования общих уравнений движения смеси. Приведены результаты численных расчетов истечения различных водно-воздушных смесей в вакуум.



Зависимости $p(\xi)$, $u(\xi)$, $\rho(\xi)$, $\alpha_L(\xi)$ в водно-воздушной смеси с несжимаемой (сплошные) и со сжимаемой (штриховые) жидкой фракцией

Библиографический список

1. Суров, В.С. К расчету истечения в вакуум односкоростной гетерогенной смеси / В.С. Суров // ИФЖ. – 2002. – Т. 75. – № 1. – С. 61–65.
2. Суров, В.С. О некоторых автомодельных задачах течения односкоростной гетерогенной среды / В.С. Суров // ИФЖ. – 2007. – Т. 80, № 6. – С. 164–172.
3. Суров, В.С. Гиперболическая модель многоскоростной гетерогенной среды / В.С. Суров // ИФЖ. – 2012. – Т. 85, № 3. – С. 495–502.
4. Baer, M. A two-phase mixture theory for deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials / M. Baer, J. Nunziato // Int. J. Multiphase Flow. 1986. V. 12. P. 861–889.
5. Lallemand, M.-H. Pressure relaxation procedures for multiphase compressible flows / M.-H. Lallemand, A. Chinnayya, O. Le Metayer // Int. J. Numer. Meth. Fluid. 2005. – V. 49. – P. 1–56.
6. Суров, В.С. Об уравнениях односкоростной гетерогенной среды / В.С. Суров // ИФЖ. – 2009. – Т. 82, № 1. – С. 75–84.
7. Уоллис, Г. Одномерные двухфазные течения / Г. Уоллис. – М.: Мир, 1972.

ЗАМЕЧАНИЕ К ТЕОРИИ ВОГНУТЫХ ОПЕРАТОРОВ

М.Л. Катков

М.А. Красносельским был замечен один геометрический факт, который привёл к определению монотонного вогнутого оператора. Значительным шагом в изучении и развитии теории монотонных вогнутых операторов является теория гетеротонных операторов. Авторство в создании этой теории принадлежит В.И. Опойцеву. В настоящей работе предлагается попытка освободиться от условия монотонности (гетеротонности). При сделанных предположениях устанавливается сходимость итерационной последовательности к неподвижной точке.

Ключевые слова: положительный оператор, вогнутый оператор, гетеротонный оператор, оператор медленного изменения.

Пусть X банахово K пространство. М.А. Красносельским был изучен класс монотонных вогнутых операторов, действующих в X . В.И. Опойцев расширил рамки теории монотонных вогнутых операторов, выделив класс гетеротонных операторов. В той же метрике, что и основатель теории, он сделал попытку отказаться от условия монотонности.

Определение метрики Биркгофа.

$$\rho(x; y) = \min \{ \alpha : e^{-\alpha} x \leq y \leq e^{\alpha} x; \ x, y \in K(u_0) \}.$$

Определение компоненты $K(u_0)$ дано в [1].

Определение вогнутого оператора. Положительный оператор $T : K \rightarrow K$ называется вогнутым, если он для любых $x \in K(u_0)$ и $\tau \in (0; 1)$ удовлетворяет условию

$$T(\tau x) \geq \tau T(x) \quad (T(\tau x) \neq \tau T(x)).$$

Вогнутый оператор T называется u_0 -вогнутым, если выполняется условие: для любых $x \in K(u_0)$ и $\tau \in (0; 1)$ найдётся такое $\eta(x; \tau) > 0$, что

$$T(\tau x) \geq (1 + \eta(x; \tau)) \tau T(x).$$

Определение гетеротонного оператора. Оператор T , действующий в X , полуупорядоченном конусом K называется гетеротонным, если для него найдётся оператор $\hat{T}$, действующий из $X \times X$ в X такой, что

$$1) \hat{T}(x; x) \equiv Tx;$$

$$2) \hat{T}(v; w) \text{ — монотонно возрастает по } v \text{ и убывает по } w.$$

Приёмы построения и выбора $\hat{T}$ подробно рассматривались, например, в [2]. Отметим, что монотонный и антимонотонный являются частными случаями гетеротонного оператора.

Определение псевдовогнутого оператора. Положительный гетеротонный оператор T называется псевдовогнутым, если

- 1) для любых ненулевых $x, y \in K$ $\hat{T}(x; y) \in K(u_0)$;
- 2) для любых $v, w \in K(u_0)$; $\tau \in (0; 1)$

выполняется неравенство

$$\hat{T}\left(\tau v; \frac{1}{\tau} w\right) \geq \tau \hat{T}(v; w) \quad \left(\hat{T}\left(\tau v; \frac{1}{\tau} w\right) \neq \tau \hat{T}(v; w) \right).$$

Определение u_0 -псевдовогнутого оператора. Псевдовогнутый оператор T называется u_0 -псевдовогнутым, если для любых $v, w \in K(u_0)$ и $\tau \in (0; 1)$ можно найти такое $\eta(v, w; \tau) > 0$, что выполняется неравенство

$$\hat{T}\left(\tau v; \frac{1}{\tau} w\right) \geq (1 + \eta(v, w; \tau)) \tau \hat{T}(v, w).$$

Автором данной заметки была предложена конструкция, которая позволила применить к гетеротонным операторам теорию вогнутых монотонных операторов. А также был рассмотрен класс операторов u_0 -медленного изменения, аналогичный по свойствам гетеротонным.

Одним из центральных вопросов теории вогнутых операторов является вопрос сходимости последовательности итераций к неподвижной точке. При этом предполагается, что существование неподвижной точки установлено. Для операторов выше указанных классов ответ на этот вопрос положительный.

Автором настоящей работы был выделен класс операторов u_0 -медленного изменения.

Определение оператора u_0 -медленного изменения. Пусть u_0 – ненулевой элемент конуса K .

Гетеротонный оператор $T: X \rightarrow X$ будем называть оператором u_0 -медленного изменения, если выполняются следующие условия:

- 1) для любых $v, w \in X$ $\hat{T}(v, w) \in K(y_0; u_0)$, где y_0 – фиксированный элемент X ;
- 2) для любых $v, w \in K(y_0; u_0)$ и любого $\gamma > 0$ найдётся такое $q = q(v; w; \gamma)$ и $(0 \leq q < 1)$, что

$$\hat{T}(v + a; w - a) \leq \hat{T}(v, w) + aq \quad (a = \gamma u_0).$$

Оказалось, что операторы u_0 -медленного изменения обладают такими же свойствами, что и u_0 -псевдовогнутые. Отметим, что для таких операторов

ров не требуется положительность, что позволяет применять эту теорию в более широких рамках.

Для исследования свойств таких операторов использовалась метрика, отличная от метрики Биркгофа. Нетрудно заметить, что как u_0 -псевдовогнутые операторы, так и операторы u_0 -медленного изменения являются сжимающими отображениями в соответствующих метриках.

В настоящей работе устанавливается сходимость итерационной последовательности к неподвижной точке в той же метрике, что и для операторов u_0 -медленного изменения. При этом оператор не предполагается монотонным (гетеротонным).

Определение. Пусть $x_0 \in X$; $u_0 \in K$. Компонентой $K(x_0; u_0)$ называется множество элементов $y \in X$, для которых при некотором $\alpha \geq 0$ выполняются неравенства:

$$x_0 \leq y + \alpha u_0; \quad y \leq x_0 + \alpha u_0. \quad (1)$$

Определение метрики. Пусть $x, y \in K(x_0; u_0)$. Метрика $d(x, y)$ определяется как минимальное α , при котором выполняется неравенство (1).

Определение u_0 -сжатия. Оператор T , действующий в X , будем называть u_0 -сжатием, если он удовлетворяет двум условиям:

- 1) для любого $x \in X$ $Tx \in K(x_0; u_0)$;
- 2) для любого $x \in K(x_0; u_0)$ существует такое положительное $q(x; t) < 1$, при котором из неравенств $x - tu_0 \leq y \leq x + tu_0$ следуют неравенства $Tx - qtu_0 \leq Ty \leq Tx + qtu_0$.

Теорема. Пусть оператор T является u_0 -сжатием и имеет неподвижную точку $x^* \in K(x_0; u_0)$. Тогда для любого $y_0 \in X$ последовательность $\{y_n\}$, где $y_n = Ty_{n-1}$ сходится к x^* по метрике d .

Доказательство. Пусть $t_n = d(y_n, x^*)$. Последовательность $\{t_n\}$ — не возрастает. Предположим, что

$$t = \lim_{n \rightarrow \infty} t_n \neq 0.$$

Положим $z = x^* + \frac{t}{t_n}(y_n - x^*)$. Очевидно, что $d(z, x^*) = t$; $d(z, y_n) = t_n - t$.

Получаем противоречие:

$$t \leq d(x^*; y_{n+1}) \leq d(x^*; Ty_n) + d(Ty_n; y_{n+1}) \leq qt + d(z, y_n),$$

или

$$t \leq qt + t_n - t.$$

Следовательно, $\lim_{n \rightarrow \infty} d(y_n, x^*) = 0$.

Утверждение доказано.

Пример u_0 -сжатия.

Рассмотрим оператор Урысона

$$Ax(t) = \int_{\Omega} K(t, s; x(s)) ds,$$

действующий в пространстве $C(\Omega)$ непрерывных функций, определённых на компактном множестве $\Omega \subset R^n$. Будем считать, что мера Ω равна 1, $u_0(t) \equiv 1$.

Будем считать, что функция $K(t, s, z)$ удовлетворяет следующему условию.

Для любых $a, b \in R$ найдётся такое $q = q(a; b)$ ($0 \leq q(a; b) < 1$), что для всех $z \in [a; b]$ и для всех y , удовлетворяющих неравенству $|z - y| < \delta$ ($\delta > 0$) выполняется неравенство

$$|K(t, s, y) - K(t, s, z)| < q\delta.$$

Условия 1) и 2) определения проверяются без труда. Действительно, положим $a = \min_{s \in \Omega} x(s)$; $b = \max_{s \in \Omega} x(s)$.

Тогда из неравенств $x(s) - \delta u_0 \leq y(s) \leq x(s) + \delta u_0$ следуют неравенства

$$\int_{\Omega} K(t, s, x(s)) ds - q\delta u_0 \leq \int_{\Omega} K(t, s, y(s)) ds \leq \int_{\Omega} K(t, s, x(s)) ds + q\delta u_0,$$

следовательно,

$$Ax(t) - q\delta u_0 \leq Ay(t) \leq Ax(t) + q\delta u_0.$$

Таким образом, рассмотренный оператор является u_0 -сжатием.

Библиографический список

1. Красносельский, М.А. Геометрические методы нелинейного анализа / М.А. Красносельский, П.П. Забрейко. – М.: Наука, 1975. – 512 с.
2. Опойцев, В.И. Обобщение теории монотонных и вогнутых операторов / В.И. Опойцев // Труды Московского математического общества. – 1978. – Т. 36. – С. 237–380.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ НЕКОРРЕКТНЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ОРИЕНТАЦИОННОЙ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ

Н.А. Евдокимова, Д.В. Лукьяненко, А.Г. Ягола

Одной из важных задач современной физической химии является определение ориентационной функции распределения частиц (ОФР). Рассматриваемый метод ее определения – метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Из спектров ЭПР может быть получена более детальная информация об ориентационном распределении парамагнитных частиц. Интенсивность резонансного сигнала в каждой точке спектра H определяется из интегрального двумерного уравнения Фредгольма первого рода, в котором ОФР неизвестна. При решении уравнения возникает необходимость минимизировать регуляризирующий функционал Тихонова и применения многопроцессорной системы.

Ключевые слова: ориентационная функция распределения, регуляризирующий функционал Тихонова, интегральное уравнение Фредгольма первого рода, распараллеливание задачи.

Ориентационная функция распределения частиц $\rho(\alpha, \beta, \gamma)$, показывающая долю частиц, ориентированных в угловых интервалах $\alpha + d\alpha$, $\beta + d\beta$, $\gamma + d\gamma$ (α, β, γ – углы Эйлера, связывающие систему координат отдельной частицы с системой координат образца), является наиболее точной характеристикой упорядоченности молекул. Определение ориентационного распределения частиц в частично упорядоченных системах, таких, как растянутые полимеры, жидкие кристаллы, пленки Ленгмюра – Блоджетт, синтетические и биологические мембраны и другие, является одной из важных проблем современной физической химии.

Одним из эффективных методов определять ориентационную функцию распределения частично ориентированных молекул является метод электронного парамагнитного резонанса. Известно, что форма спектров ЭПР образца, в котором парамагнитные частицы ориентационно упорядочены, зависит от положения этого образца в магнитном поле спектрометра. Угловая зависимость спектров, очевидно, содержит информацию об ориентационной функции распределения частиц.

Следует заметить, что функция распределения, определяемая из анализа спектров ЭПР, всегда симметрична относительно центра координат. Действительно, при повороте вектора напряжённости магнитного поля на 180° эффективные магнитные параметры парамагнитной частицы не изме-

няются, таким образом, часть информации об ориентации частиц в образце неизбежно теряется.

Для однозначного определения ориентационной функции распределения парамагнитных частиц в образце необходимо одновременно анализировать несколько спектров ЭПР,

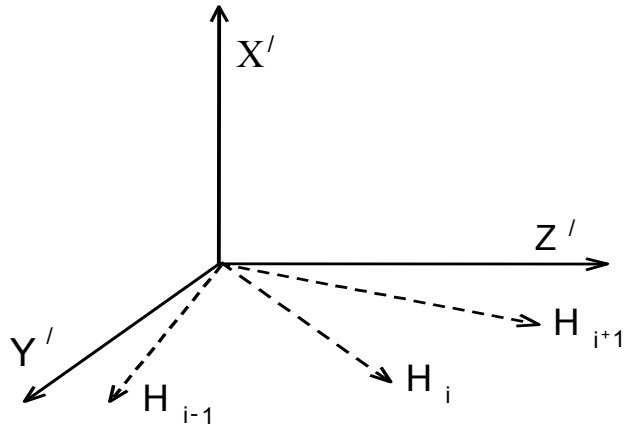


Рис. 1. Положения вектора напряжённости магнитного поля в системе координат образца при повороте образца вокруг оси X' , перпендикулярной вектору магнитного поля

зарегистрированных при различных положениях изучаемого образца относительно магнитного поля.

Неоднозначности в определении ориентационного распределения частиц можно избежать путём регистрации спектров ЭПР при повороте образца вокруг его трёх взаимно перпендикулярных осей (рис. 1).

Интенсивность резонансного сигнала в каждой точке спектра H определяется следующим образом:

$$I(H, \theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} F(H, g, A, h) \cdot \rho(\alpha, \beta, \gamma) \cdot \sin \beta \cdot d\alpha d\beta d\gamma.$$

Углы θ и α фиксированы. Поэтому, как в [1], достаточно решить интегральное уравнение

$$I(H, \varphi) = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} F(H, g, A, h) \cdot \rho(\beta, \gamma) \cdot \sin \beta d\beta d\gamma, \quad (1)$$

где $\rho(\beta, \gamma)$ – ориентационная функция распределения – неизвестная функция, которую требуется найти, $I(H, \varphi)$ – интенсивность резонансного сигнала – известная функция, которую получают посредством эксперимента, $F(H, g, A, h)$ – форма индивидуальной резонансной линии (задается из теоретических соображений), $g_{\text{эфф}}$ и $a_{\text{эфф}}$ – эффективные значения g -фактора и константы СТВ соответственно, h – значение ширины индивидуальной резонансной линии (расстояние между точками максимального наклона). Углы θ и φ определяют положение вектора напряжённости магнитного поля H в системе координат, связанной с образцом ($X'Y'Z'$) (θ – угол между H и осью Z' , φ – угол между проекцией H на плоскость ($X'Y'$) и осью Y'). Углы Эйлера α , β и γ связывают систему координат образца ($X'Y'Z'$) с системой координат отдельной парамагнитной частицы ($X''Y''Z''$).

При решении интегрального уравнения (1) возникает необходимость минимизировать регуляризирующий функционал Тихонова [2]

$$M^\alpha[\rho] = \int_{H_1}^{H_2} \int_{\phi_1}^{\phi_2} dH d\phi \left\{ \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \hat{F}(H, \phi, \beta, \gamma) \rho(\beta, \gamma) \cdot \sin \beta d\beta d\gamma - I(H, \phi) \right\}^2 + \alpha \Omega[\rho],$$

конечно-разностная аппроксимация которого принимает следующий вид:

$$M^\alpha[\rho] = \sum_{k=1}^{N_H} \sum_{l=1}^{N_\phi} h_H h_\phi \left[\sum_{i=1}^{N_\beta} \sum_{j=1}^{N_\gamma} h_\beta h_\gamma \hat{F}_{klij} \rho_{ij} \sin \beta_i - I_{kl} \right]^2 + \alpha \Omega[\rho], \quad (2)$$

где $\rho_{ij} = \rho(\beta_i, \gamma_j)$, $I_{kl} = I(H_k, \phi_l)$, $\hat{F}_{klij} = \hat{F}(H_k, \phi_l, \beta_i, \gamma_j)$, $H_k, \phi_l, \beta_i, \gamma_j$ – сетки по H, ϕ, β, γ с шагами $h_H, h_\phi, h_\beta, h_\gamma$ и числом узлов сетки $N_H, N_\phi, N_\beta, N_\gamma$.

При минимизации функционала Тихонова необходимо вычислять его градиент, который имеет вид:

$$\begin{aligned} \left(\text{grad } M^\alpha[\rho] \right)_{ij} &= \frac{\partial M^\alpha[\rho]_{ij}}{\partial \rho_{ij}} = \\ &= 2h_\beta h_\gamma \sum_{k=1}^{N_H} \sum_{l=1}^{N_\phi} h_H h_\phi \hat{F}_{klij} \left[\sum_{p=1}^{N_\beta} \sum_{q=1}^{N_\gamma} h_\beta h_\gamma \hat{F}_{klpq} \rho_{pq} \sin \beta_i - I_{kl} \right] + \alpha \frac{\partial \Omega(\rho_{ij})}{\partial \rho_{ij}}. \end{aligned}$$

При решении данной задачи почти все время уходит на вычисление функционала Тихонова и его градиента. Основной вклад во время вычисления функционала Тихонова вносит невязка. Время вычисления стабилизатора пренебрежимо мало.

Это дает возможность применения многопроцессорной системы. Задачу можно распараллелить, т. е. переписать программу таким образом, чтобы независимые части программы выполнялись на разных процессорах [3]. Схема распараллеливания градиента приводится (рис. 2).

Сотрудниками химического факультета МГУ были предоставлены экспериментальные данные спектра ЭПР для заданной функции распределения. Матрица ядер интегрального уравнения $F(H, \phi, \beta, \gamma)$ была рассчитана для ϕ от 0 до 90 градусов с шагом 10 (всего 10 значений), β от 0 до 180 градусов с шагом 18 (всего 11 значений), γ от 0 до 360 градусов с шагом 36 (всего 11 значений), соответствующие различным значениям напряженности магнитного поля (400 точек с постоянным шагом от 3240 Гс до 3380 Гс). Таким образом, уравнение (2) содержит $10 \times 11 \times 11 \times 400 = 484000$ неизвестных в предоставленной программе.

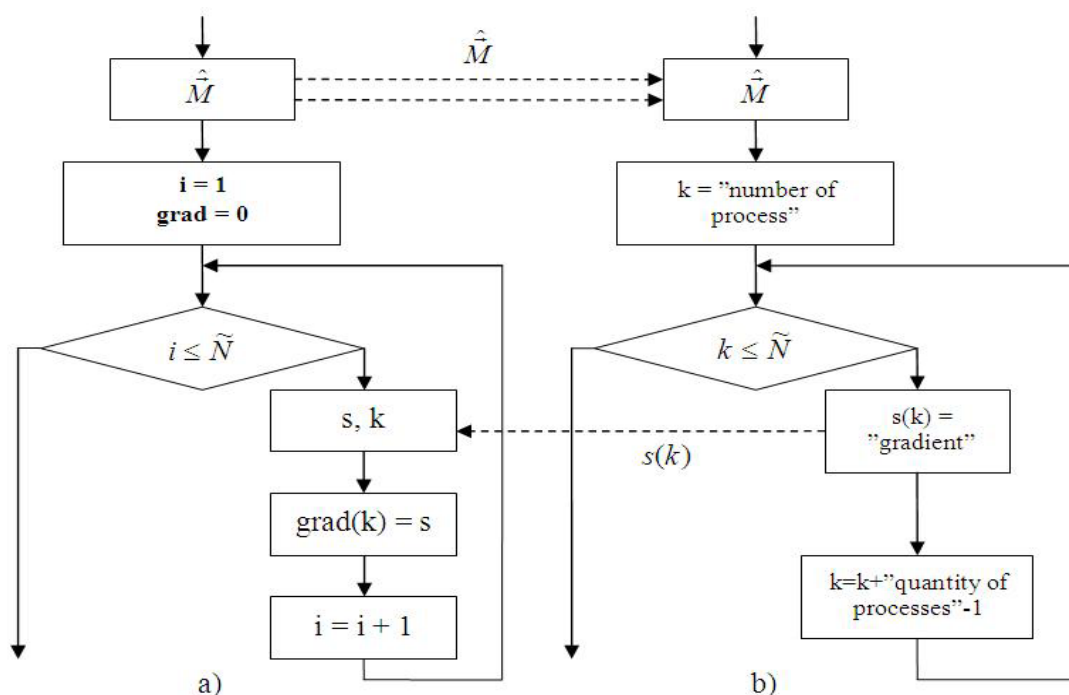


Рис. 2. Схема расчета значения градиента функционала:
а) для нулевого процесса, б) для ненулевого процесса

Была написана программа решения двумерного интегрального уравнения Фредгольма первого рода для линейного случая. Программа написана на языке Fortran 90, с использованием функций MPI. Решение задачи осуществлялось на кластерах НИВЦ МГУ и ЮУрГУ.

Работа проводилась при финансовой поддержке гранта РФФИ № 11-01-00040.

Библиографический список

1. Евдокимова, Н.А. Восстановление ориентационной функции распределения частиц / Н.А. Евдокимова, Д.В. Лукьяненко, А.Г. Ягола // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 40. – С. 172–176.
2. Численные методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, А.В. Гончарский, В.В. Степанов, А.Г. Ягола. – М.: Наука, 1990. – 282 с.
3. Evdokimova, N.A. Application of inversion methods in solving ill-posed problems for magnetic parameter identification of steel null vessel / N.A. Evdokimova, D.V. Lukyanenko, A.G. Yagola. – J. Inv. Ill-posed Problems 18 (2011), 1013–1029 DOI 10.1515/ JIP.2011.018.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
АДИАБАТИЧЕСКОГО ТЕПЛОВОГО ВЗРЫВА
ДЛЯ РЕАКЦИЙ ОКИСЛЕНИЯ ВОДОРОДА И МЕТАНА**

Е.Е. Пигасов, В.К. Рябинин, Ю.М. Ковалев

В данной работе представлены результаты математического моделирования адиабатического реактора, заполненного газовыми смесями водорода или метана. Несмотря на то, что реакции окисления (горения) водорода и метана очень широко используются в практических целях и существует достаточно большое количество публикаций, разработка кинетических схем горения водорода и метана является актуальной и в настоящее время. В работе были апробированы различные кинетические схемы горения водорода и метана и было показано, что наиболее точное описание экспериментальных данных удастся получить, используя полную кинетику окисления. Показано, что использование сокращенной кинетики окисления допустимо лишь для описания высокотемпературной асимптоты, а упрощение механизма до одной брутто-реакции пригодно только для приблизительных оценок.

Ключевые слова: математическое моделирование, горение и взрыв, период индукции.

Повсеместно в нашей жизни мы сталкиваемся с различными химическими реакциями и процессами. Одним из немаловажных и весьма распространенных классов таких реакций являются реакции окисления (горения). Умение управлять и предсказывать поведение процессов горения является одной из важнейших задач обеспечения безопасности и эффективности использования огня. Несмотря на то, что реакции окисления (горения) водорода и метана очень широко используются в практических целях и существует достаточно большое количество публикаций, разработка кинетических схем горения водорода и метана является актуальной и в настоящее время.

На протяжении длительного времени водород рассматривается как эффективное рабочее тело для двигательных установок вследствие его исключительной химической активности в сочетании с воздухом и кислородом в качестве окислителя, а также благодаря отсутствию токсических продуктов сгорания. Имеется ряд прямых свидетельств использования чистого водорода в качестве горючего для прямоточных воздушно-реактивных двигателей (ПВРД) и для камер сгорания жидкостных ракетных двигателей (ЖРД). Весьма часто [1] можно встретить упоминание об использовании водорода, как присадки к углеводородным горючим, осо-

бенно применительно к процессам горения в двигателях внутреннего сгорания (ДВС) с искровым зажиганием и воспламенением от сжатия (дизельные моторы).

Столь широкое использование водорода как энергоносителя в сочетании с очевидными проблемами безопасности технических устройств, где предполагается применение или появление водорода, требует ясного представления об его взрывных характеристиках при горении в специально организованном процессе (как в камере сгорания) или при аварийной ситуации (как при тяжелой аварии с потерей охлаждающего компонента на АЭС). При рассмотрении рабочего процесса в ПВРД, ЖРД, ДВС следует заботиться о высокой эффективности и устойчивости преобразования горючей смеси в камерах сгорания (ПВРД, ЖРД, ДВС) и газогенераторах (ЖРД). Особое внимание здесь следует обращать на переходные режимы горения при изменении рабочих параметров. Дополнительные вопросы появляются в связи с проблемой использования в двигательных установках комбинированных типов горючего, представляющих собой смесь водорода с углеводородами [2].

Одним из основных параметров, характеризующих реагирующую смесь, является *адиабатический период индукции*, расчет которого и рассмотрен в данной работе для различных кинетических окисления водорода и метана.

Рассмотрим *адиабатический реактор* – реактор, в котором отсутствует всякий тепло- и массообмен с окружающей средой, следовательно все тепло, получаемое в ходе экзотермических реакций окисления идет на разогрев системы. В таком реакторе тепловой взрыв происходит при любых начальных условиях. Отрезок времени от начала процесса до момента резкого увеличения температуры носит название адиабатического периода индукции (*задержка воспламенения*).

Расчет адиабатического периода индукции сводится к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений для описания поведения температуры смеси и концентраций реагентов:

$$\frac{dT}{dt} = \sum_{k=1}^m \frac{-H(T)}{C_p(T)C_k M_k} \sum_{i=1}^r T^{b_i} k_{0_i} e^{-E_i/RT} \prod_{j=1}^m C^{v_{ij}} ; \quad (1)$$

$$\frac{dC}{dt} = \sum_{i=1}^r v_{ij} T^{b_i} k_{0_i} e^{-E_i/RT} \prod_{j=1}^m C^{v_{ij}} , \quad (2)$$

где T – температура, t – время, r – число реакций, m – число реагентов, H – энтальпия, C_p – теплоемкость, C – концентрация, M – молярная масса, E – энергия активации, k_0 , b – кинетические параметры, v_{ij} – стехиометрический коэффициент для j -компоненты в i -реакции [1].

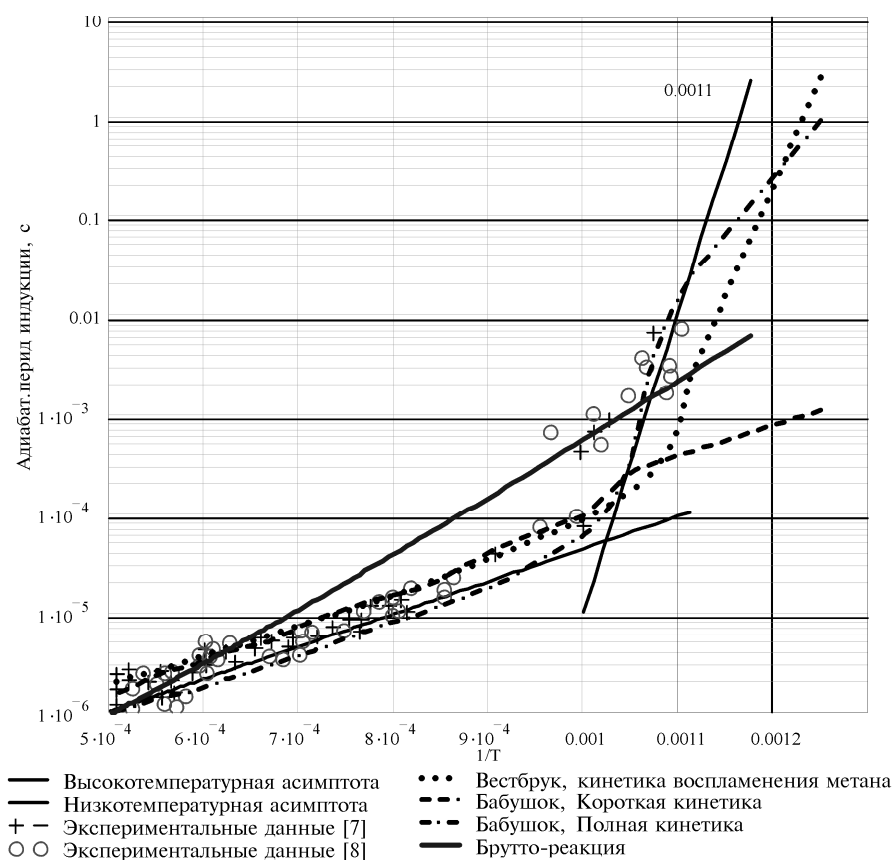
Теплоемкость C_p и энтальпия H рассчитываются при помощи аппроксимации их зависимостей от температуры. M – молярная масса k -го реагента.

Стоит отметить, что, несмотря на кажущуюся простоту, система является весьма сложной для численного решения вследствие высокой жесткости (коэффициент жесткости достигает 10^{12}).

Жесткость системы дифференциальных уравнений характеризует максимальные различия в характерных временных масштабах реакций. Обычно при численном моделировании необходимо разрешить самые короткие характерные времена, даже если нас интересуют лишь медленные (и таким образом лимитирующие) процессы. В противном случае численное решение становится неустойчивым.

Этой проблемы неустойчивости решения можно избежать, если использовать так называемые неявные методы решения. Другая возможность избежать этой проблемы – устранение быстрых стадий при помощи разделения временных масштабов [3].

Проведение расчетов связано с выявлением соотношений точности и скорости счета для различных кинетик. Так для реакции окисления водорода был получен ряд результатов, отображенный на рисунке.



Зависимость адиабатического периода индукции от температуры

Как видно из графика, экспериментальные данные распределены вдоль двух асимптот, рассмотренных в [4]. Наиболее точное описание экспериментальных данных удалось получить, используя полную кинетику [5]. Использование сокращенной кинетики [5] допустимо лишь для описания высокотемпературной асимптоты, а упрощение механизма до одной брутто-реакции пригодно лишь для приблизительных оценок, хотя во многих случаях достаточно и этого, особенно если принимать во внимание скорость счета при использовании такой кинетики.

В настоящее время идет работа над созданием эффективной схемы расчета для пространственных сеток.

Библиографический список

1. Bode Shrestha, S.O. Hydrogen as an additive to methane for spark ignition engine applications / S.O. Bode Shrestha, G.A. Karim // Intern. Journal of Hydrogen Energy. – 1994. – V. 24, № 5. – P. 521–586.
2. Гельфанд, Б.Е. Водород: параметры горения и взрыва / Б.Е. Гельфанд, О.Е. Попов. – М.: Физматлит, 2008.
3. Варнатц, Ю. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл. – М.: Физматлит, 2003.
4. Димитров, В.И. Простая кинетика / В.И. Димитров. – Новосибирск: Наука, 1982.
5. Бабушок, В.И. Глобальные кинетические параметры для высокотемпературных газофазных реакций / В.И. Бабушок, А.Н. Дакданча // ФГВ. – 1993. – № 4. – С. 48–80.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ УДАРНЫХ ВОЛН С ПЛОСКИМ ГЕТЕРОГЕННЫМ СЛОЕМ

Ю.М.Ковалев, Е.С.Шестаковская

Проведено численное исследование распространения цилиндрической расходящейся ударной волны над поверхностью с прилегающим слоем гетерогенной среды. Для решения уравнений динамики двухфазной среды использовалась модифицированная численная схема метода Неймана-Рихтмайера. Показано, что наличие гетерогенного слоя приводит к деформации фронта ударной волны и изменению ее структуры.

Ключевые слова: ударная волна; гетерогенная среда; математическая модель.

Исследование процессов, связанных с изучением распространения цилиндрических ударных волн в гетерогенных слоях, представляет практический интерес по ряду причин: оценка последствий взрывов болидов в атмосфере Земли, анализ эффективности воздействия ударных волн на фронт пожара [1], разработка систем гашения ударных волн [2] и т. д.

В настоящей работе проведено численное исследование взрыва цилиндрического заряда ВВ (рис. 1) над плоской поверхностью (поверхность Земли) и над плоской поверхностью с прилегающим к ней слоем гетерогенной среды (поверхность земли, покрытая лесом; городской массив и т.д.) с различной объемной долей конденсированной фазы (к-фазы).

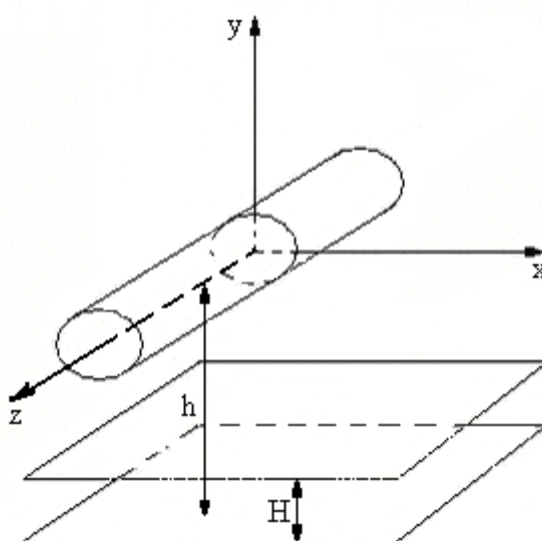


Рис. 1. Схема проведения расчетов

Пусть цилиндрический заряд ВВ расположен вдоль оси Oz на определенной высоте h над поверхностью Земли (рис. 1). Вблизи поверхности Земли располагается слой двухфазной гетерогенной среды высотой H . Задача является симметричной относительно плоскостей xOy и yOz , поэтому будем рассматривать только область $x \geq 0$.

Законы сохранения, описывающие динамику распространения УВ в двухфазной среде с неподвижной, недеформируемой к-фазой и инвариантные относительно преобразования Галилея [3], в лагранжевых массовых переменных имеют следующий вид

$$\frac{1}{\sigma} \frac{d\sigma}{dt} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (1)$$

$$\rho \frac{du}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + f_x, \quad \rho \frac{dv}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + f_y, \quad (2)$$

$$\frac{dx}{dt} = u, \quad \frac{dy}{dt} = v, \quad \vec{f} = -\frac{4}{d} c_d \alpha \rho |\vec{v}| \vec{v}, \quad c_d = 0,3 \quad (3)$$

$$\frac{dE}{dt} = -p \frac{d\sigma}{dt}, \quad p = (\gamma - 1) \rho E. \quad (4)$$

Здесь ρ – плотность газа; p – его давление; $\sigma = 1/\rho$ – удельный объем; E – удельная внутренняя энергия газа; γ – показатель адиабаты, u и v – x и y компоненты вектора скорости соответственно ($\vec{v} = \{u, v\}$); f_x и f_y – x и y компоненты силы межфазного взаимодействия, α – объемная доля к-фазы.

Система уравнений (1)–(4) решалась численно модифицированным методом Неймана – Рихтмайера [4]. На нижней и левой границах расчетной области (в силу симметрии задачи) задавались граничные условия для жесткой стенки. При моделировании заряда ВВ были использованы данные работы [5].

В расчетах моделировался взрыв цилиндрического заряда диаметром $D=3$ см, находящегося на высоте $h=1$ м от поверхности земли. Вблизи поверхности земли задавался слой двухфазной гетерогенной среды высотой $H=0,5$ м, так что взрыв заряда происходил над гетерогенным слоем. Диаметр частиц к-фазы выбирался равным $d=0,1$ мм. Расчеты проводились для различных объемных концентраций α частиц к-фазы в гетерогенном слое. В частности, при $\alpha=0$ получаем задачу об отражении цилиндрической УВ от поверхности без гетерогенного слоя [6], которая являлась тестовой при оценке эффективности и точности работы программы расчетов.

Рассмотрим взаимодействие УВ с гетерогенным слоем при $\alpha=0,001$ (рис. 2). Полученные результаты показывают, что, входя в гетерогенный

слой, УВ испытывает торможение. Так как объёмная доля частиц мала, УВ слабо отражается от поверхности слоя, проходит через него и отражается от плоской поверхности. Со временем регулярное отражение переходит в нерегулярное. При этом ножка Маха формируется на поверхности земли. Фронт УВ деформируется в гетерогенной области, однако его форма остаётся близкой к цилиндрической.

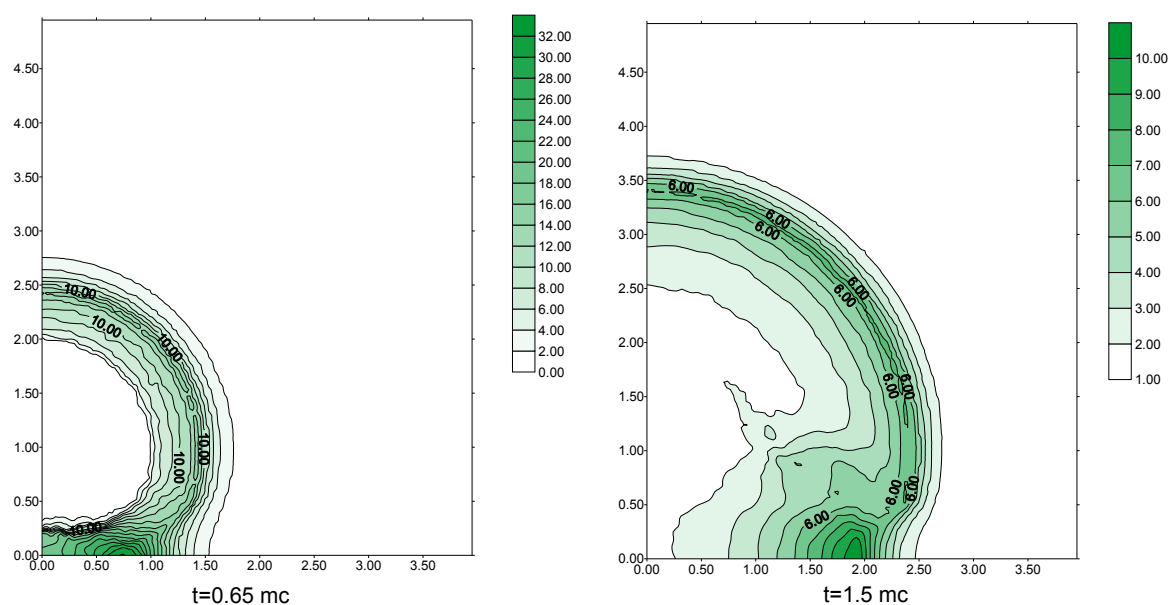


Рис. 2. Эволюция поля давления при взрыве шнурового заряда над гетерогенным слоем $\alpha=0,001$

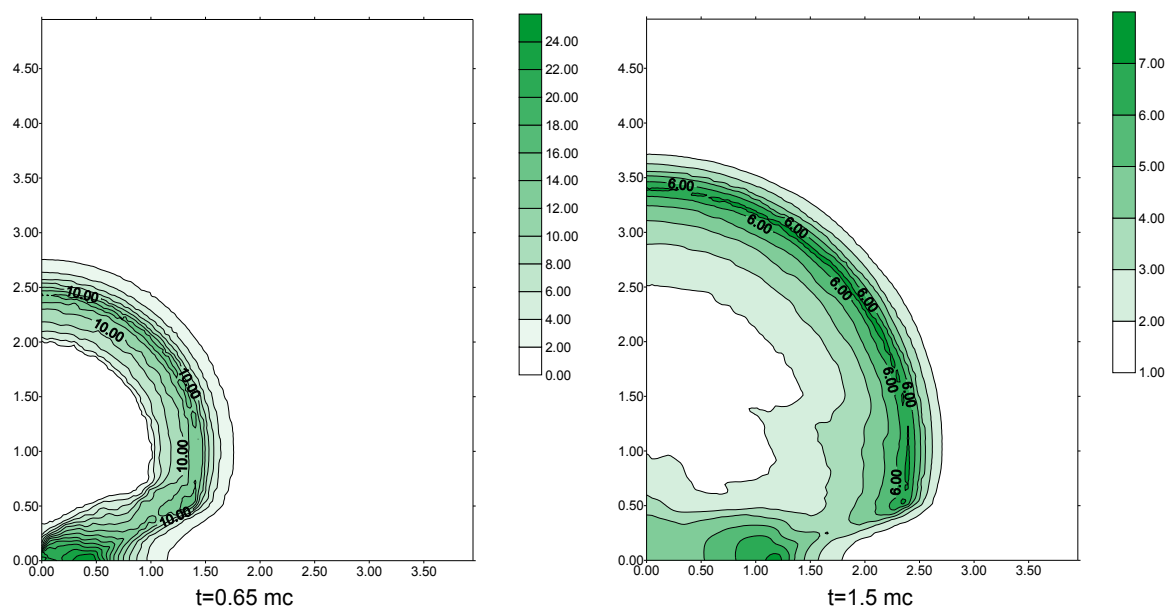


Рис. 3. Эволюция поля давления при взрыве шнурового заряда над гетерогенным слоем $\alpha=0,01$

При большей объемной доле к-фазы $\alpha=0,01$ (рис. 3) наблюдается более существенное отражение УВ от поверхности гетерогенного слоя, и формирование ножки Маха происходит уже на поверхности гетерогенного слоя. В пристеночном гетерогенном слое образуется область повышенного давления. Величина давления в этой области уменьшается существенно медленнее, нежели происходит эволюция УВ в чистом воздухе.

Заключение

Проведено численное исследование динамики распространения цилиндрических УВ в области, частично заполненной конденсированной фазой. Результаты проведенных расчетов показывают, что скорость продвижения ударной волны в гетерогенной среде существенно ниже, чем в воздухе. Наличие конденсированной фазы существенно влияет на форму фронта ударной волны.

Библиографический список

1. Гришин, А.М. Об усилении ударных волн при их взаимодействии с фронтом лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // ДАН СССР. – 1990. – Т. 312, № 1. – С. 50–54.
2. Ковалев, Ю.М. Ослабление воздушных ударных волн системой решеток / Ю.М. Ковалев, А.Ю. Черемохов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. «Мат. мод. физ. процессов». – 1997. – Вып. 3. – С. 39–43.
3. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности относительно преобразования Галилея некоторых моделей математических многокомпонентных сред / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 27. – С. 69–73.
4. Методика расчёта нестационарных двумерных задач газовой динамики в лагранжевых координатах / И.Д. Софронов, Н.А. Дмитриев, Л.В. Дмитриева, Е.В. Малиновская // Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики. – М.: Наука, 1979. – С. 175–201.
5. Моделирование взрыва шнуrowого заряда в пологе леса при отсутствии пожара / В.А. Антонов, А.М. Гришин, Ю.М. Ковалёв, Л.Ю. Наймушина // ФГВ. – 1993. – Т. 29, № 4. – С. 115–123.
6. Численное решение многомерных задач газовой динамики / С.К. Годунов, А.В. Забродин, М.Я. Иванов и др. – М.: Наука, 1976. – 400 с.

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРОГРАММ РЕШЕНИЯ ЖЕСТКИХ СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПРИМЕНительно К ЗАДАЧАМ ФИЗИКИ ГОРЕНИЯ

В.К. Рябинин

Исследуется сравнительная эффективность ряда жестко устойчивых солверов при решении характерных тестовых задач физики горения.

Ключевые слова: физика горения; химическая кинетика, жесткие дифференциальные уравнения.

Актуальной проблемой современной вычислительной физики является использование детальных механизмов химической кинетики при решении задач физики горения и химической газодинамики. При этом приходится описывать комплексы из сотен (и даже тысяч) химических реакций (N_R) с участием десятков-сотен реагентов (N_C) с включением в основную модель системы N_C обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетики, обладающей высокой степенью математической жесткости [1, 2]. Выбор технологии решения системы жестких дифференциальных уравнений при решении различных классов задач может определяться совершенно разными требованиями. В данной работе исследуется сравнительная эффективность ряда жестко устойчивых солверов применительно к набору характерных тестовых задач физики горения. Сравнивались следующие солверы.

STIFF – солвер, основанный на многошаговом методе Гира переменного порядка, адаптированный для решения задач химической кинетики [1, 2]. Недостатки этого солвера – относительно медленный рестарт при многократном запуске и необходимость вычисления матрицы Якоби.

METAN1 – полунявный одношаговый метод экстраполяции [1, 3], быстро стартует, но требует вычисления матрицы Якоби.

CHEMEQ2 – сравнительно новый солвер, ориентированный на применение в задачах вычислительной механики реагирующих сред [4]. Несмотря на невысокий порядок точности, является одношаговым, быстро стартовым и не требует вычисления матрицы Якоби.

Система программирования Compaq Visual FORTRAN v. 6.6. Все расчеты выполнены на процессоре Core 2 Duo 2930 MHz.

Тестовая задача 1: Нестационарный тепловой взрыв в адиабатическом реакторе [5].

Расчет адиабатического периода индукции t_{ad} является задачей, необходимой для оценки пожаро-взрывобезопасности веществ и технологиче-

ских процессов. Модель такого реактора описывается уравнением баланса энергии (1) и N_C уравнениями для концентраций каждого из реагентов (2).

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{j=1}^{N_C} \left[-h_j(T) \cdot \frac{dC_j}{dt} \right]}{\sum_{j=1}^{N_C} C_j \mu_j c_{Vj}(T)}; \quad (1)$$

$$\frac{dC_j}{dt} = \sum_{i=1}^{N_R} \nu_{i,j} W_i; \quad j = 1 \dots N_C. \quad (2)$$

Скорость i -й реакции определяется законом действующих масс и модифицированным законом Аррениуса

$$W_i = \prod_{j=1}^{N_C} C_j^{\nu_{i,j}} \cdot k_i T^{b_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right). \quad (3)$$

Рассчитываются адиабатические периоды индукции для стехиометрической смеси $2O_2 + CH_4$ на основе кинетики [6], (156 реакций, 23 активных реагента и один инерт N_2). Решается система из 25 дифф. уравнений (24 концентрации + температура). Расчеты проводятся одним потоком последовательно для 19 начальных температур от 700K до 2500K через 100K. Критерий определения t_{ad} – достижение максимума скорости тепловыделения. Результаты теста 1 приведены в табл. 1 и на рис. 1.

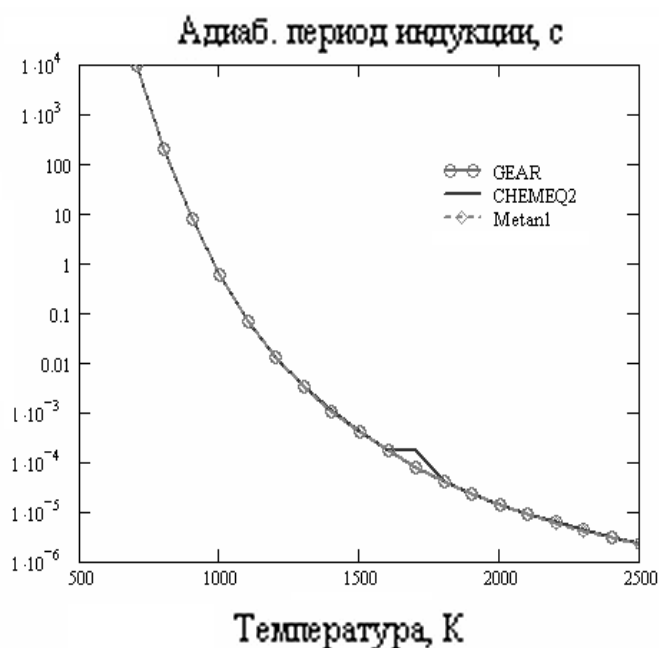


Рис. 1

Таблица 1

Солвер	STIFF ($\varepsilon = 10^{-4}$)	CHEMEQ2 ($\varepsilon = 10^{-2}$, $it_{\max} = 5$)	METAN1 ($\varepsilon = 10^{-4}$)
Время счета, с	0,25	6,3	17,98
$N_{\text{пр.ч.}}/N_{\text{якоб}}$	13 199 / 1 052	389 717	1 084 519

Здесь и далее: ε – относительная точность решения; $N_{\text{пр.ч.}}$, $N_{\text{якоб}}$ – количество вычислений правых частей и матрицы Якоби.

Тестовая задача 2. Осцилляционное горение в проточном реакторе идеального смешения.

Рассчитывается поведение реактора идеального смешения [7] для стехиометрической смеси $2\text{H}_2 + \text{O}_2$ на основе кинетики [8], (44 реакции, 8 активных реагента и один инерт N_2). Уравнения из задачи 1 дополняются слагаемыми для тепло-массообмена с окружающей средой.

$$\frac{dC_j}{dt} = \sum_{i=1}^{N_R} \nu_{i,j} W_i + \frac{C_{j,\text{BX}} - C}{t_{\text{пр}}}; \quad j = 1 \dots N_C. \quad (4)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\sum_{j=1}^{N_C} \left[-h_j(T) \cdot \frac{dC_j}{dt} \right]}{\sum_{j=1}^{N_C} C_j \mu_j c_{Vj}(T)} - \frac{T - T_0}{t_q} - \frac{T - T_{\text{BX}}}{t_{\text{пр}}}; \quad (5)$$

Решается система из 10 дифференциальных уравнений. Расчеты проводятся для случая линейного роста температуры стенки по формуле $T_0 = (700 + 5 \cdot t)$ К; $t_q = 0,04$ с; $t_{\text{пр}} = 4$ с. В реакторе наблюдается переход от режима без горения к устойчивому горению через сложную последовательность взрывных релаксационных автоколебаний убывающей амплитуды и периода (рис. 2, табл. 2). Расчет такого процесса создает трудности для любого солвера, так как непрерывно происходит многократная перестройка структуры спектра матрицы Якоби решаемой системы.

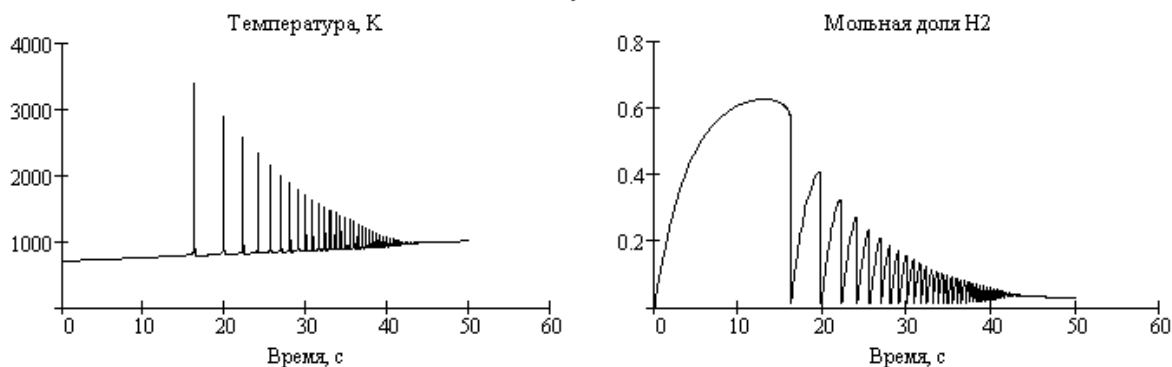


Рис. 2

Таблица 2

Солвер	STIFF ($\varepsilon = 10^{-4}$)	CHEMEQ2* ($\varepsilon = 10^{-4}$, $it_{\max}=1$)	METAN1 ($\varepsilon = 10^{-4}$)
Время счета, с	0,172	51,0	1,05
$N_{\text{пр.ч.}}/N_{\text{якоб}}$	33 674 / 5 144	11 271 140	214 444

Тестовая задача 3. Макрокинетическая модель дефлаграционной волны горения.

Уравнение баланса энергии (1) дополнено слагаемым, описывающим молекулярную теплопередачу

$$\frac{dT}{dt} = a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{N_g}{x} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\sum_{j=1}^{N_c} \left[-h_j(T) \cdot \frac{dC_j}{dt} \right]}{\sum_{j=1}^{N_c} C_j \mu_j c_{Vj}(T)}. \quad (6)$$

Уравнения для концентраций реагентов аналогичны (2).

Рассчитывается процесс распространения дефлаграционной волны горения в стехиометрической смеси $2O_2 + CH_4 + 7N_2$ на основе кинетики [6], (156 реакций, 23 активных реагента и один инерт N_2). Решается система из 25 дифференциальных уравнений. Исходная смесь с температурой 300 К при давлении 1 атм поджигается слева накаливаемым телом с температурой 2500 К в течение 0,0005 с. Образовавшийся фронт пламени движется вправо до столкновения противоположной адиабатической границей. Основная пространственная задача решается с помощью полунейвной схемы методом прогонки. Химические реакции рассчитываются в автономном программном блоке, вызываемом в каждой расчетной ячейке. Расчет выполняется на 500 пространственных узлах за 2500 временных шагов (табл. 3).

Таблица 3

Солвер	STIFF ($\varepsilon = 10^{-4}$)	CHEMEQ2 ($\varepsilon = 10^{-2}$, $it_{\max}=1$)	METAN1 ($\varepsilon = 10^{-4}$)
Время счета, с	327,1	234,6	1124
$N_{\text{пр.ч.}}/N_{\text{якоб}}$	12 247 544 / 2 966 262	14 656 582	65 818 06

Выводы

Солвер STIFF показал себя хорошо при решении всех задач. Солвер CHEMEQ2 совершенно неэффективен при решении задач неизотермической химической кинетики. Напротив, при решении пространственных задач он показал лучшие результаты. METAN1 везде показал посредственные результаты, при этом он очень капризен и неустойчив.

Библиографический список

1. Оран, Э. Численное моделирование реагирующих потоков / Э. Оран, Дж. Борис – М.: Мир, 1990. – 660 с.
2. Полак, Л.С. Вычислительные методы в химической кинетике / Л.С. Полак, М.Я. Гольденберг, А.А. Левицкий. – М.: Наука, 1984. – 280 с.
3. Deuflhard, P. A Semi-Implicit Midpoint Rule for Stiff Systems of Ordinary Differential Equations / P. Deuflhard // Num. Math. –1983. – 41. – P. 373–398.
4. Mott, D.R. and Oran, E.S. CHEMEQ2: A solver for the stiff ordinary differential equations of chemical kinetics // NRL Memorandum Report No. 6400-01-8553, 2001.
5. Рябинин, В.К. Математическое моделирование адиабатического периода индукции для метан – кислородных смесей в широком диапазоне начальных давлений и температур / В.К. Рябинин, Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 56–71.
6. Вестбрук, Ч. Применение химической кинетики для определения критических параметров газовой детонации / Ч. Вестбрук, П. Уртъев // ФГВ. – 1983. – Т. 19. – Вып.6. – С. 65–76.
7. Вилунов, В.Н. О моделировании колебательных режимов горения водорода и метана в проточном реакторе с перемешиванием / В.Н. Вилунов, В.К. Рябинин // ФГВ. – 1989. – Т. 25. – Вып. 1. – С. 16–26.
8. Бабушок, В.И. Структура предела цепочно-теплового самовоспламенения / В.И. Бабушок, Т.В. Крахтинова, В.С. Бабкин // Кинетика и катализ. – 1984. – Т. 25. – Вып. 1. – С. 5–12.

УДК 537.39 + 537.5

**НОВЫЕ КОНСТРУКТИВЫ ИСТОЧНИКОВ ЭНЕРГИИ,
ОСНОВАННЫЕ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ РАЗРЯДЕ
В ПОТОКЕ ЭЛЕКТРОЛИТА**

Г.Ф. Кузнецов, С.Ю. Гуревич, Д.Г. Клещев, С.И. Лаврентьев

Проведен сравнительный анализ новых конструктивов электро-разрядных источников тепловой и электрической энергии. Указаны пути повышения эффективности и управляемости их работы.

Ключевые слова: источники энергии, электрический разряд, поток электролита.

Многочисленные опыты, проведенными различными авторами в области разработки новых источников энергии и получения новых элементов (см., например, [1, 2], свидетельствуют не только о том, что в электрическом разряде в потоке жидкости возможно протекание реакций синтеза химических элементов и получения избыточной по сравнению с затраченной на организацию разряда энергией, но и указывают на сложность самого процесса и управляемость энергетическими показателями установок [3]. Последнее привело к трудностям внедрения новых источников энергии.

Например, известно устройство для получения тепловой энергии [4] содержащее замкнутый корпус, размещенные на его стенках активные ультразвуковые элементы и размещенные вне корпуса источники электрических и магнитных полей. Кавитационный режим для жидкости, находящейся внутри корпуса, достигается ультразвуковым воздействием, которое усиливается ортогональными электрическими и магнитными полями. Кавитация сопровождается появлением электрических разрядов, токов и напряжений с выделением тепловой энергии. Регулируемое влияние магнитных и электрических полей может либо усилить, либо ослабить тепловой эффект. Испытания описываемого конструктива [5] показали, что описанная конструкция решает проблему повышения эффективности и управляемости электрического разряда лишь частично. Это связано с тем, что лишь часть жидкости нагревается в ортогональных магнитном и электрическом полях с одной стороны, с другой – отсутствует синхронизация воздействия ультразвукового, магнитного и электрического полей.

Для решения указанных выше проблем авторами настоящей работы были разработаны несколько новых конструктивов источников энергии (тепловой и электрической), которые могут, в первом приближении, повы-

ситель эффективность работы источников энергии, основанных на электрическом разряде в потоке электролита.

Повышение эффективности и управляемости достигается тем, что в устройстве для получения тепловой энергии, содержащем замкнутый корпус с размещенными на его торцах активными ультразвуковыми элементами и размещенными вне корпуса источниками электрических и магнитных полей, замкнутый корпус с активными ультразвуковыми элементами размещен внутри катушки индуктивности, являющейся источником электромагнитного поля и соединенной гальванической связью с источником электромагнитных колебаний, обеспечивающим равенство частот ультразвукового и электромагнитного воздействия.

Подвергаемая ультразвуковому воздействию жидкость, заполняющая корпус, полностью находится в зоне электромагнитного поля, что повышает эффективность работы устройства. Кроме того, наличие одного источника электромагнитного поля вместо двух упрощает конструкцию устройства, обеспечивает равенство частот ультразвукового и электромагнитного воздействия, существенно повышает управляемость процессом выделения тепловой энергии, что приводит к повышению эффективности работы устройства.

Устройство содержит (рис. 1) замкнутый корпус 1 с размещенными на его торцах активными ультразвуковыми элементами 2, помещенный внутри катушки индуктивности 3, соединенной с источником электромагнитных колебаний 4.

Устройство работает следующим образом. В замкнутый корпус 1 помещена жидкость, в частности, вода. Воздействие на жидкость активных ультразвуковых элементов 2, расположенных на торцах замкнутого корпуса 1, приводит к возникновению кавитационного режима. Кавитация сопровождается появлением электрических зарядов, токов и напряжений с выделением тепловой энергии. Электромагнитное поле, создаваемое катушкой индуктивности 3, воздействует на всю жидкость, заполняющую замкнутый корпус 1. Частота колебаний электромагнитного поля задается частотой источника электромагнитных колебаний 4, регулировка которой позволяет либо усилить (при равенстве частот ультразвукового и электро-

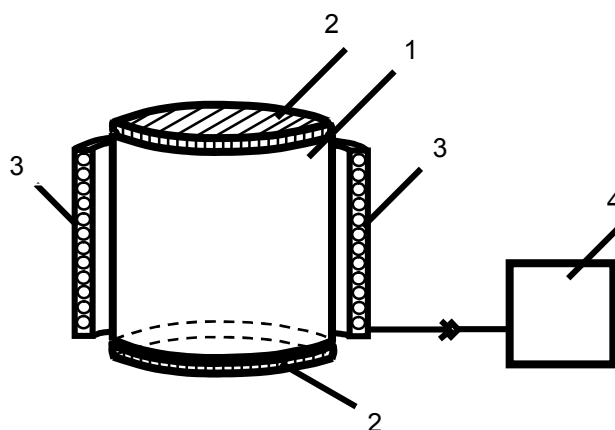


Рис. 1. Принципиальная схема устройства № 1 для получения энергии

магнитного воздействия), либо уменьшить тепловой эффект. В качестве активных ультразвуковых элементов 2 могут быть использованы, например, пьезоэлементы из цирконата титаната свинца, и диапазон частот источника электромагнитных колебаний 4 тогда будет от 10 кГц до 1 МГц.

В другом устройстве используется замкнутый корпус с размещенными на его стенках активными ультразвуковыми элементами и источниками ортогональных электрических и магнитных полей, источники электрических полей выполнены в виде электродов, имеющих непосредственный контакт с жидкостью внутри корпуса, при этом электрическое поле создано переменным током.

В переменном электрическом поле на уровне микропузырьков происходит разделение положительных и отрицательных электрических заряженных частиц вследствие их различных масс, что способствует возникновению кавитации. Частота электрических колебаний определяет интенсивность тепловыделения в объеме корпуса и зависит от геометрических размеров, формы электродов и свойств применяемой жидкости.

Устройство содержит (рис. 2) корпус 1 с размещенными в нем активными ультразвуковыми элементами 2. Внутри корпуса расположены источники электрического поля – электроды 3. Вне корпуса расположены источники магнитного поля 4. Позицией 5 обозначены провода электродов для подключения к источнику переменного тока.

Устройство работает следующим образом. В корпус 1 помещается жидкость. Ультразвуковые элементы 2 возбуждают в жидкости кавитационный режим. Электрическое поле, создаваемое переменным электрическим током и электродами 3, повышает эффективность и стабильность протекающих в жидкости процессов. Магнитное поле, создаваемое источниками магнитного поля 4, способствует в этих условиях повышению надежности

работы устройства.

Таким образом достигаются высокая эффективность и стабильность работы устройства для получения тепловой энергии.

Схема еще одного устройства представлена на рис. 3. В корпус 1 помещается жидкость. Ультразвуковые активные элементы 2, расположенные на верхней и нижней стенках корпуса, приводят к возникновению кавитационного режима в

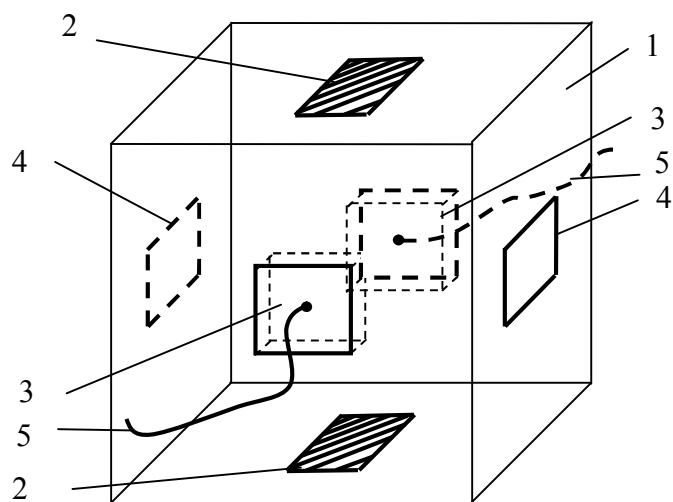


Рис. 2. Принципиальная схема устройства № 2 для получения энергии

жидкости. Под действием электрического поля, создаваемого источниками 3, происходит движение заряженных частиц. Эти частицы совершают упорядоченные когерентные колебания под действием пульсирующего магнитного поля, создаваемого источниками 4, что способствует разделению зарядов на кавитационных пузырьках. При этом увеличивается тепловой эффект от реализации кавитационного режима.

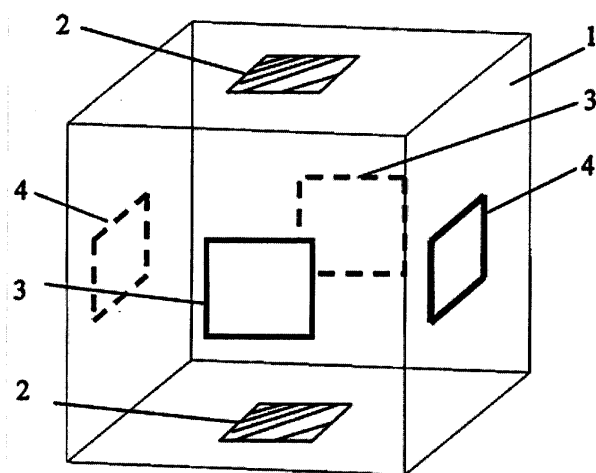


Рис. 3. Принципиальная схема устройства № 3 для получения энергии

Таким образом достигается повышение эффективности и стабильности работы устройства для получения тепловой энергии.

Разработка новых конструкций устройств и изучение эффективности их работы продолжается.

Библиографический список

1. Иванов, Н.И. Основные положения дейтонной горно-металлургической теории / Н.И. Иванов, А.В. Вачаев, Г.А. Павлова, Л.А. Скворцов // Изв. вузов. Серия чёрная металлургия. – 1998. – № 4. – С. 54–59.
2. Паньков, В.А. Демонстрационная методика синтеза элементов из воды в плазме электрического разряда / В.А. Паньков, Б.П. Кузьмин // Актуальные проблемы современной науки. – 2008. – № 5 (44). – С. 112–116.
3. Ивойлов, Н.Г. Трансформация ядер в условиях электроразряда / Н.Г. Ивойлов, М.М. Бикчантаев, О.А. Стребков и др. // Ученые записки Казанского гос. универ. – 2009. – Т. 151, кн. 3. – С. 52–62.
4. Пат. №105414 Российская федерация, МПК(51) F24J 3/00. Устройство для получения тепловой энергии / Г.Ф. Кузнецов, С.Ю. Гуревич, В.В. Крымский, Д.Г. Клещев, Л.П. Холпанов, С.И. Лавретьев. – № 2009133891/06; заявл. 09.09.2009; опубл. 10.06.09, Бюл. № 16. – 4 с.
5. О возможности получения энергии при электрических разрядах / Г.Ф. Кузнецов, Д.Г. Клещев, В.В. Крымский и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Энергетика». – 2001. – Вып. 2. – № 14. – С. 73–77.

НОВЫЕ АКУСТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ ВОЛНЫ В СРЕДЕ КЛИНОВИДНОЙ ФОРМЫ

Х.Б. Толипов

Исследование распространения волн в упругой клиновидной пластине выявили вблизи ребра новые эффекты, неизвестные в технической литературе. При движении поверхностной волны в этой области происходит непрерывная перестройка акустического поля и излучение объемных волн. При приближении к ребру скорость поверхностной волны падает до нуля, но обратная волна при движении набирает скорость. Все это свидетельствует о новом физическом явлении: обратная волна в клиновидной пластине возникает не за счет отражения от ребра в классическом понимании, а вследствие сжатия волнового потока. Возникающая при наложении падающих и обратных колебаний стоячая неоднородная волна формируется из возмущений малой амплитуды. Вдоль ребра клина возникает волновое движение оригинальной физической природы.

Ключевые слова: Неоднородная волна, интерференция, клиновидная пластина, волновое поле, теория упругости.

Как показали исследования [1, 2], что движение поверхностной волны в клиновидной пластине сопровождается принципиально новыми эффектами. Так, например, при движении волны Рэлея в некоторой области, прилегающей к ребру, имеет место потеря ее устойчивости (стационарности). При этом возникает особый тип поверхностной волны, сопровождающийся в ходе движения непрерывной перестройкой акустического поля и излучением объемных волн.

Причина этого феномена кроется в том, что при движении поверхностной волны изменяются условия распространения: смещения частиц среды в какой-то момент времени начинают достигать противоположной грани клина, ведущей к расщеплению движущейся волны на независимые поверхностную и объемную компоненты. Энергия поверхностной волны в ходе движения начинает уменьшаться, так как объемные волны, непрерывно оттекающие с поверхности вглубь среды, уносят с собой часть энергии. Эти эффекты, в конечном итоге, приводят к расщеплению волны Рэлея на независимые симметричную и антисимметричную моды.

Система уравнений волновой динамики обычно выводится из закона сохранения энергии без учета процессов диссипации. При распространении малых возмущений в клиновидной пластине энергия движущейся поверхностной волны не остается постоянной, а монотонно уменьшается за счет непрерывного оттока в объемные волны.

На рис. 1 для двух углов клина $\theta_0 = 26^\circ$ (кривые 1 и 2) и $\theta_0 = 13^\circ$ (кривые 3 и 4) приведены соответственно зависимости относительной скорости симметричных и антисимметричных волн от координаты r .

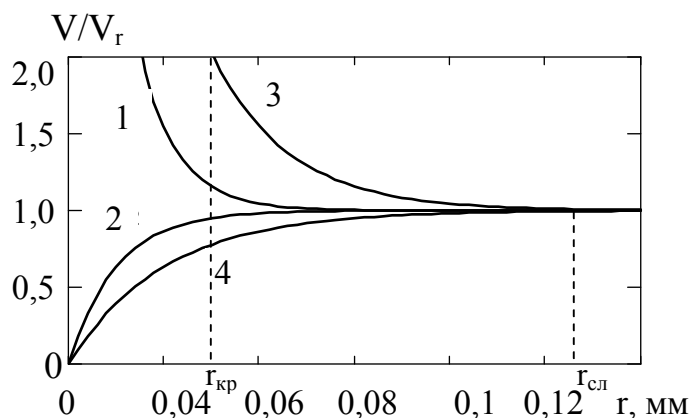


Рис. 1. Зависимость относительной скорости распространения антисимметричных (1 и 2) и симметричных (3 и 4) волн от расстояния до ребра клина: 1 и 3 – для $\theta_0 = 13^\circ$; 2 и 4 – для $\theta_0 = 26^\circ$ (V_r – скорость рэлеевской волны, $f = 2,5$ МГц)

Следует отметить особый характер полученных зависимостей скоростей этих мод. С приближением к ребру от бесконечности до точки $r_{сл}$ имеем устойчивое стационарное распространение поверхностной волны, а после этой точки происходит потеря устойчивости, сопровождающаяся возникновением двух мод. При этом оказывается, что скорости распространения этих мод при приближении к ребру будут изменяться различным образом. Скорость антисимметричной моды стремится к нулю, а симметричной – к скорости продольной волны. Область распространения этих мод также различная: если симметричная мода существует в узкой области от $r_{сл}$ до $r_{кр}$ границы неустойчивой зоны, то антисимметричная занимает всю область от границы $r_{сл}$ до ребра клина.

Акустическое поле в клиновидной пластине вблизи ребра фактически представляет наложение двух неоднородных волн – бегущей к ребру и отраженной от него. Соответственно этому исследование состояло из двух этапов [3, 4]. Вначале рассматривалась эволюция поверхностной волны, движущейся перпендикулярно ребру клина, а затем определялась возникающая интерференция двух встречных волновых потоков.

Стоячая акустическая волна формируется из антисимметричных волн, с изменяющимися в ходе движения скоростью и амплитудой. Скорость падающей волны в направлении ребра снижается от рэлеевской до нуля. В обратном направлении скорость волны убыстряется до рэлеевской. В силу равных условий распространения изменения скорости, как в прямом, так и

обратном направлениях имеют идентичный характер, что приводит к устойчивой волновой картине.

Амплитуда падающей волны определяется конкуренцией двух механизмов – с одной стороны уменьшением локальной толщины пластины, ведущей к сжатию волнового потока и нелинейному росту амплитуды, с другой – нелинейным затуханием возмущений, связанным с оттоком энергии при возникновении объемных волн. Однако амплитуда возмущений при обратном движении определяется только одним механизмом – увеличением локальной толщины пластины, ведущим нелинейному падению амплитуды. В этой ситуации взаимодействие с противоположной гранью не происходит, следовательно, трансформация поверхностной в объемные волны в этом случае не происходит.

На рис. 2 показана интерференционная структура акустического поля по направлению к ребру клина для угла клина 26° . Отметим, что расстояния между пучностями стоячей волны при приближении к ребру увеличиваются, что свидетельствует об уменьшении скорости моды поверхностной волны.

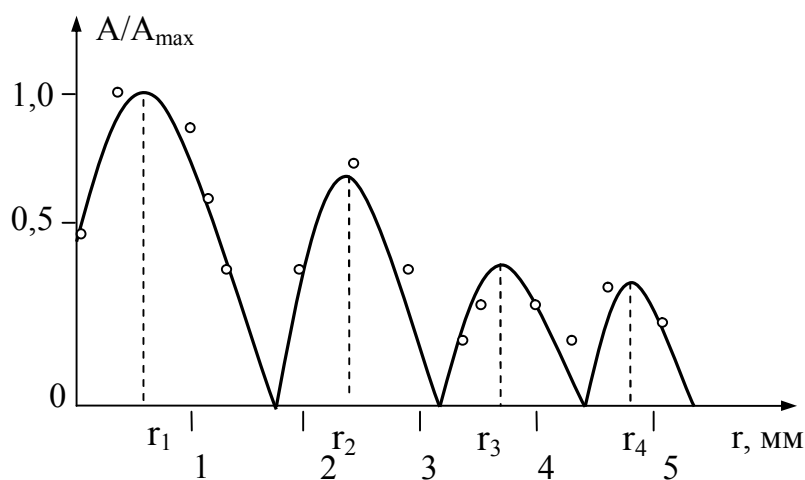


Рис. 2. Зависимость амплитуды стоячей волны от расстояния до ребра для угла клина 26° . (V_r – скорость рэлеевской волны)

С приближением к ребру уменьшается локальная толщина, что приводит к уменьшению скорости антисимметричной составляющей. При этом волновой поток, теряя скорость, сжимается, достигая у ребра максимальной плотности энергии. В обратном направлении поток расширяется, двигаясь от ребра и набирая скорость. Плотность энергии волнового потока при этом уменьшается, что ведет к спаду амплитуды. Этот эффект является специфическим и характерен только для клиновидной пластины.

Таким образом, уменьшение толщины пластины ведет к замедлению скорости волнового потока, движущего к ребру клина, и его сжатию. В обратном

направлении утолщение пластины приводит к увеличению скорости волнового потока. При распространении волны параллельно ребру клина скорость ее будет также зависеть локальной толщины клина (в области траектории волны) [5]. Различная скорость по фронту волны будет приводить к отклонению волновой нормали и обуславливать отвод энергии к ребру клина. Поэтому эта волна должна характеризоваться неустойчивой траекторией, что противоречит известным экспериментальным наблюдениям.

Известно, что акустическое волновое сопротивление пропорционально скорости распространения волны. В соответствии с принципом наименьшего действия, при распространении упругой энергии в анизотропной среде происходит снос энергии из области с большим волновым сопротивлением в область с меньшим волновым сопротивлением.

Следовательно, при излучении поверхностной волны первоочередным будет ее движение в сторону более низкого пространственного градиента скорости – к ребру клина в область с уменьшающимся по ходу движения волновым сопротивлением. Отражаясь от ребра, потоки энергий падающей и отраженной волн накладываются, что приводит к пространственному перераспределению интенсивности колебаний с возникновением чередования максимумов и минимумов.

В этой ситуации переноса энергии волны по направлению к ребру не происходит, а прямым следствием этого факта является переориентация направления потока энергии волны, который устремляется вдоль оси z .

Таким образом, вначале возникает волновое движение перпендикулярно к ребру клина и существующее только в начальный период времени до образования стоячей волны, а затем формируется интерференционный поток энергии в новом направлении – вдоль ребра клина.

Важно отметить, что траектория этой волны теперь будет устойчивой и проходить параллельно ребру клина.

Библиографический список

1. Толипов, Х.Б. Решение задачи взаимодействия рэлеевских волн с ребром клина при малых углах раствора / Х.Б. Толипов // ПМТФ. – 2010. – Т. 51, № 1. – С. 28–39.
2. Толипов, Х.Б. Поверхностные акустические волны в упругой среде клиновидной формы // Х.Б. Толипов // ЖТФ. – 2012. – № 9. – С. 139–142.
3. Tolipov, Kh. Stagnant Nonuniform Acoustic Waves / Kh. Tolipov // Advanced Material Research. – Vol. 684 (2013). – P. 667–670. – Trans Tech Publications. Switzerland. doi:10.4028/www.scientific.net/AMR.684.667.
4. Толипов, Х.Б. Акустические стоячие волны в ограниченной однородной среде / Х.Б. Толипов // АЖ. – 2013. – № 4. – С. 1–6.
5. Теоретическое и экспериментальное исследование волн, распространяющихся вдоль ребра клина // ПМТФ. – 2012. – Т. 51. – № 6. – С. 28–39.

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ АКУСТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ ВОЛН ЛЭМБА, ВОЗБУЖДЕННЫХ ИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ В ФЕРРОМАГНИТНОМ МЕТАЛЛЕ

Е.В. Голубев, С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров

Проведен анализ влияния свойств ферромагнитного металла, его температуры и характеристик лазерного импульса на параметры акустического импульса, возбуждаемого импульсным лазерным излучением

Ключевые слова: лазерные импульсы, ферромагнитный металл, фазовый переход, спектры акустических импульсов.

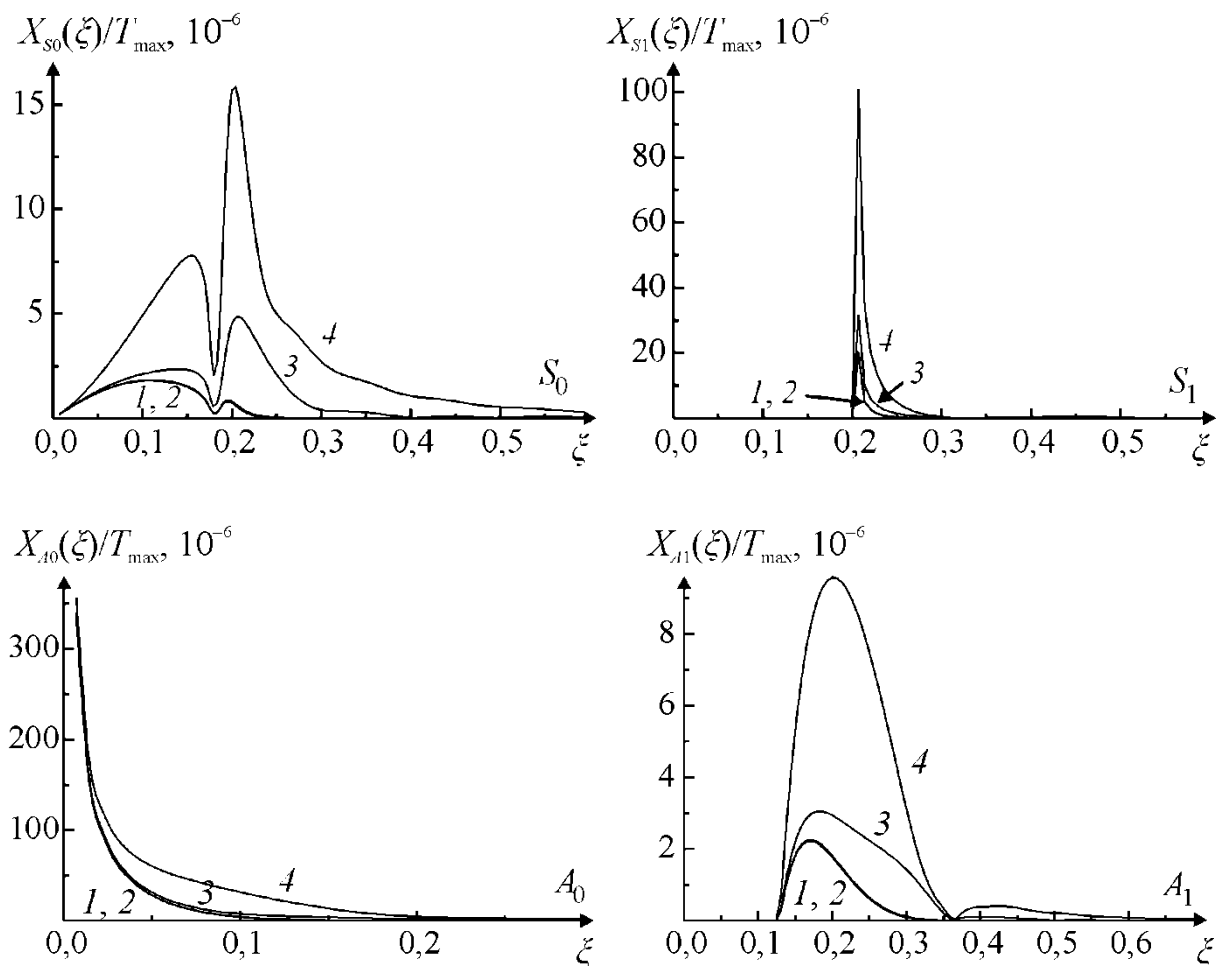
Неразрушающий контроль качества композитных материалов и листовых металлоизделий, широко используемых в авиа- и ракетостроении основан, как правило, на применении акустических методов контроля, в частности, на использовании волн Лэмба. В силу высоких технологических требований указанные методы должны быть бесконтактными. По этой причине внимание специалистов привлекает генерация ультразвука в изделии за счет оптико-акустического преобразования (термоупругий эффект) с использованием импульсного лазерного излучения и регистрация ультразвука на основе обратного электромагнитоакустического преобразования.

Впервые возникновение термоупругих волн в упругом полупространстве под действием внезапного нагревания границы было рассмотрено в так называемой «задаче Даниловской» [1]. В 1989 году было экспериментально обнаружено влияние магнитного фазового перехода на генерацию ультразвуковых импульсов в ферромагнитных металлах под действием лазерных импульсов [2]. Теория генерации объемных акустических волн с учетом указанного выше эффекта была представлена в работе [3]. Здесь впервые был произведен учет температурной зависимости термического коэффициента линейного расширения среды, испытывающего аномалии в районе точки Кюри, а при определении направленностей лазерных излучателей ультразвука – конечность значений скорости распространения тепла и времени релаксации теплового потока.

В дальнейшем были сформулированы основы теории лазерной генерации волн Рэлея и Лэмба в ферромагнитных металлах [4, 5], однако детального анализа спектров акустических импульсов не производилось.

Расчет спектров импульсов волн Лэмба, возбуждаемых импульсным лазером в ферромагнитной металлической пластине, производился по методике, изложенной в работе [5]. Некоторые результаты расчета показаны на

рисунке, где изображены графики модулей спектральных плотностей симметричных и антисимметричных мод низших номеров при различной энергии лазерного импульса.



Спектральные функции нормальных волн: S – симметричные моды. A – антисимметричные моды. Энергия импульса: 1 – 0,25 мДж; 2 – 0,5 мДж; 3 – 2,0 мДж; 4 – 5,0 мДж. Сплав 32НКД. $R_0 = 1$ мм, $h = 1$ мм, $T_0 = 300$ К, t_0 – длительность лазерного импульса, $T_{\max}$ – максимальная избыточная температура сплава, T_0 – равновесная температура сплава, R_0 – радиус лазерного пятна, h – толщина пластины

Спектральные функции определяются толщиной пластины, зависят от параметров лазерного импульса и параметров среды, которые могут изменяться с температурой T_0 и в процессе поглощения лазерного импульса. Расчеты, проведенные для пластин толщиной $h = 0,5 - 5$ мм, длительности оптического импульса $t_0 = 15$ нс и радиуса лазерного пятна $R_0 = 1$ мм показывают, что при малых h спектр носит выраженный полосатый характер.

При увеличении толщины пластины он существенно изменяется и, в результате уширения и наложения отдельных полос, спектр результирующего сигнала становится сплошным. При малых R_0 спектр результирующего сигнала сплошной и составлен из перекрывающихся полос, а при увеличении радиуса становится полосатым. Энергия лазерного импульса при больших радиусах лазерного пятна преобразуется, в основном, в энергию колебаний низших мод. Спектр акустических импульсов пропорционален энергии лазерного импульса, поэтому на рисунке спектры нормированы на максимальную избыточную температуру $T_{\max}$.

Как показывает расчет, характер зависимости температурного коэффициента линейного расширения от температуры влияет на спектральный состав всех мод, поддерживаемых пластиной. При приближении температуры сплава к точке Кюри, которая составляет 493 К, наблюдается появление высокочастотной части; также максимум спектра смещается в сторону более высоких частот. Это объясняется тем, что интенсивность оптико-акустических источников изменяется с температурой нелинейно и ее распределение по объему пластины носит более сложный характер.

Наибольшее влияние на спектр акустического импульса оказывает поведение температурного коэффициента линейного расширения в окрестности равновесной температуры. Поскольку наиболее существенные особенности этого коэффициента соответствуют фазовым переходам в материале образца, то и наибольшее изменение в спектральных функциях будет соответствовать случаю генерации акустических импульсов в среде, где происходит фазовый переход при поглощении лазерного импульса.

Экспериментальное определение параметров импульсов волн Лэмба при их лазерной генерации в ферромагнитном металле было проведено в работе [6]. Использовался импульсный лазер ЛТИ 403, работающий в режиме активной модуляции добротности, излучающей оптические импульсы длительностью 30 нс частотой следования 12,5 Гц. Длина волны лазерного излучения составляла 1,06 мкм, максимальная энергия импульса 400 мДж. Мощность лазерного излучения контролировалась прибором ИМО-2Н, диаметр лазерного пятна регулировался в пределах 0,5–5,0 мм. Лазерный луч, сфокусированный оптической линзой до диаметра 0,7 мм, направлялся на поверхность металлической ферромагнитной пластины. Средняя поверхностная плотность тепловой мощности лазерного излучения устанавливалась равной 180 МВт/см². Выбранные значения диаметра светового пятна и интенсивности лазерного излучения обеспечивали при минимальных размерах зоны генерации ультразвука достаточную для проведения исследований амплитуду импульсов волн Лэмба. Из результатов экспериментов, проведенных на пластине толщиной 0,6 мм следует, что достаточно устойчиво генерируются и регистрируются с помощью широкополосного электромагнитоакустического преобразователя (бесконтакт-

ного) электромагнитные импульсы, наведенные симметричными S_0 и антисимметричными A_0 волнами Лэмба. Амплитудные значения моды S_0 почти в три раза больше, чем амплитуда моды A_0 . Кроме того, квазичастота импульсов S_0 в два с лишним раза превышает аналогичную для A_0 . Далее был рассчитан спектр электромагнитного импульса, наведенного модой S_0 . Из расчета следует, что вся энергия импульса длительностью 3,5 мкс (по уровню e^{-1}) практически заключена в интервале 0–1,75 МГц при максимальном значении на частоте $\approx 1,0$ МГц. В то же время для оптического импульса длительностью ≈ 30 нс (по тому же уровню) верхний предел частотного диапазона ограничивается частотой до 30 МГц. Такое уменьшение частоты означает, что металл хорошо пропускает низкочастотную часть спектра акустического импульса (до 2,5 МГц) и интенсивно поглощает его высокочастотную (более 2,5 МГц) часть [7].

Библиографический список

1. Даниловская, В.И. Температурные напряжения в упругом полупространстве, возникающие вследствие внезапного нагревания поверхности / В.И. Даниловская // Прикл. матем. и механика. – 1950. – Т. 14, № 3. – С.129–133.
2. Возбуждение ультразвука в железе при фазовом переходе под действием лазерных импульсов / Г.А. Буденков, С.Ю. Гуревич, А.Д. Каунов, А.Ф. Маскаев // Акустич. журнал. – 1983. – Т. 29, № 4. – С. 561–562.
3. Гуревич, С.Ю. Основы теории и практического применения высокотемпературного ультразвукового контроля ферромагнитных металлоизделий: автореф. дис. ... д-ра техн. наук / С.Ю. Гуревич. – Челябинск: Изд-во Челяб. гос. техн. ун-та, 1995. – 43 с.
4. Голубев, Е.В. Влияние свойств ферромагнитного металла на спектр волн Рэлея, возбуждаемых импульсным лазерным излучением / Е.В. Голубев, С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров // Дефектоскопия. – 2010. – № 3. – С. 36–44.
5. Голубев, Е.В. К теории возбуждения волн Лэмба в металлах импульсным лазерным излучением / Е.В. Голубев, С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров // Акустич. журнал. – 2011. – Т. 57, № 5. – С. 600–606.
6. Петров, Ю.В. Экспериментальное определение параметров волн Лэмба при их лазерной генерации / Ю.В. Петров, С.Ю. Гуревич, Е.В. Голубев // Дефектоскопия. – 2010. – № 3. – С. 45–49.
7. Экспериментальная установка для регистрации импульсных электромагнитных полей, возбуждаемых волнами Лэмба в магнитополяризованной металлической пластине / С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров, Е.В. Голубев, А.А. Шульгинов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 7, № 34. – С. 146–148.

ТОНКАЯ СТРУКТУРА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ ГАММА-ФОНА

А.А. Шульгинов

Проведено исследование гамма-фона окружающей среды на предмет наличия тонкой структуры в распределении случайных величин, характеризующих процесс – количества всплесков за выделенный интервал, среднего интервала между всплесками и коэффициента вариации. Экспериментальные данные и результаты моделирования процесса показали возможность существования тонкой структуры в силу естественных причин.

Ключевые слова: радиоактивность; функция распределения; статистика Пуассона; коэффициент вариации; полиэкстремальность.

На протяжении более 40 лет научный коллектив, возглавляемый С.Э. Шнолем, проводил исследования закономерностей различных физических, химических и биологических процессов [1]. Было обнаружено, что радиоактивный распад – это процесс, который подчиняется статистике Пуассона, но гистограмма распределения имеет тонкую структуру – множественные пики и впадины (полиэкстремальность). Аналогичные результаты были получены при изучении закономерностей химических реакций и биологических процессов. Более того, авторы исследования доказали, что форма тонкой структуры процессов разной природы подвержена периодическим изменениям с периодами 24 ч, около 27 суток и 365 суток, однако этим фактам не было дано никаких объяснений и не было выдвинуто никаких гипотез о возможных механизмах возникновения этих явлений. На основании этих результатов можно сделать предположение о существовании неизвестной космофизической причины, которая влияет на случайные процессы различной природы. Эта публикация вызвала дискуссию в научных кругах. В частности, Е.А. Кушниренко и И.Б. Погожев дали критические замечания к статье С.Э. Шноля [2]. В своих комментариях авторы предположили, что в работе не хватает оценок статистической значимости, которые помогают отделить твёрдо установленные научные факты от правдоподобных предположений и научных гипотез.

На протяжении 10 лет А.В. Каравайкин работал над созданием устройства, которое способно повлиять на процесс радиоактивного распада [3]. Ему удалось создать прибор «НГК-ВЕГА» – генератор неэлектромагнитной информации. А.В. Каравайкин совместно с А.Г. Пархомовым провели измерения влияния излучения этого генератора на процесс радиоактивного распада препарата Co^{60} [4]. Оказалось, что такое воздействие никак не ска-

залось на средней активности препарата, но значительно уменьшило разброс результатов измерений. Это дало основание авторам исследования утверждать о возможности управления хаотическими явлениями такими, как радиоактивный распад. Эти выводы столь фундаментальны и совершенно изменяют устоявшиеся представления о закономерностях хорошо изученных ранее физических явлений, что нуждаются в тщательной проверке независимыми исследователями.

В настоящей статье представлены результаты исследования гамма-фона. Измерения проводились в одной из лабораторий Южно-Уральского государственного университета в круглосуточном режиме на протяжении 7 суток. Счётчик Гейгера с трубкой СБМ-20 был соединён с компьютером. Никаких источников радиоактивного излучения вблизи трубки Гейгера не было. Счёт производился непрерывно, но результаты измерений записывались с периодом 32,8 с. Всего было зафиксировано $N = 16300$ временных интервалов. Помимо текущего времени, в файл записывались следующие данные за каждый период j ($j = 1, \dots, N$): N_j – число всплесков, R_j – средний временной интервал между всплесками и V_{Rj} – коэффициент вариации временных интервалов между всплесками (среднеквадратичное отклонение, делённое на среднюю величину – σ_{Rj}/R_j). Число всплесков за определённый период должен иметь распределение Пуассона, а интервалы между всплесками – экспоненциальное распределение. Согласно [5] коэффициент вариации V_{Rj} экспоненциального распределения равен 1, а для пуассоновского процесса коэффициент вариации $V_{Nj} = 1/\sqrt{\langle N_j \rangle}$. Гистограмма количества скачков N_j в течение выбранного интервала времени показана на рис. 1, а. Никакой тонкой структуры, а тем более полиэкстремальности, гистограммы не отмечено. В дополнение к этому, было произведено моделирование процесса, результаты которого представлены на рис. 1, б. При моделировании процесса учитывалось, что счётчик Гейгера после всплеска в течение 0,2 с не регистрировал сигнал (время латентности). Поэтому, процесс не являлся чисто пуассоновским. Полагалось, что усреднённый по N измерениям средний временной интервал между всплесками, полученный в эксперименте ($\langle R_j \rangle = 2,17$ с) такой же, как и при моделировании. В то же время, усреднённый по N измерениям коэффициент вариации случайной величины R_j , по экспериментальным данным оказался равным $\langle V_{Rj}^{\text{эксп}} \rangle = 0,89$, а при моделировании $\langle V_{Rj}^{\text{модел}} \rangle = 0,81$. Это указывает на то, что при моделировании не были учтены какие-то факторы. На это же указывает некоторое отличие в ширине гистограмм (рис. 1).

Неожиданные результаты были получены при построении функции плотности вероятности нормированного среднего интервала между всплесками $\tilde{R}_j = (R_j - M(R_j))/\sigma_{Rj}$ (рис. 2). Оказалось, что $f(\tilde{R}_j)$ не является гауссовой кривой, как можно было ожидать, а имеет тонкую

структуру, в которой проявляется полиэкстремальность. Столь же интересные результаты были получены при построении функции плотности вероятности от двух переменных – $\tilde{R}_j$ и $\tilde{V}_j = (V_j - M(V_j)) / \sigma_{V_j}$ (рис. 3). Количество временных интервалов при моделировании варьировалось от 20 млн до 200 млн. Это не повлияло на график существенно. Было проведено моделирование процесса при условии, что время латентности равно нулю. Это лишь немного изменило форму изолиний, но тонкая структура осталась подобной.

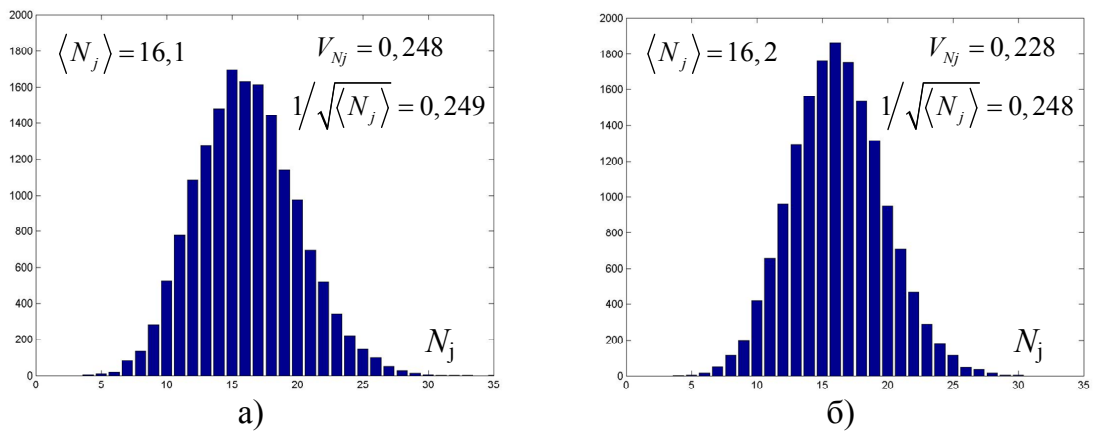


Рис. 1. Гистограмма количества скачков (N_j), полученная по экспериментальным данным (а) и путём моделирования (б)

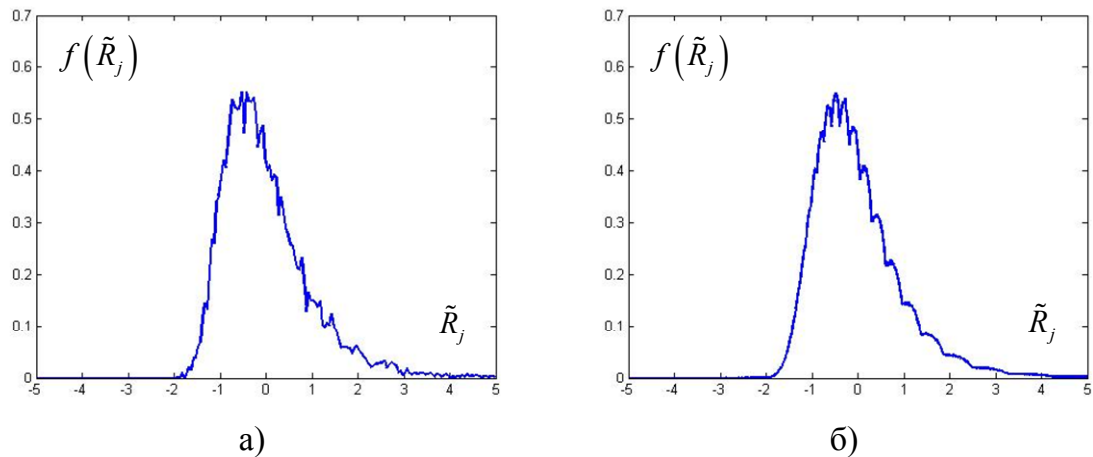


Рис. 2. Функция плотности вероятности $f(\tilde{R}_j)$, полученная по экспериментальным данным (а) и путём моделирования (б)

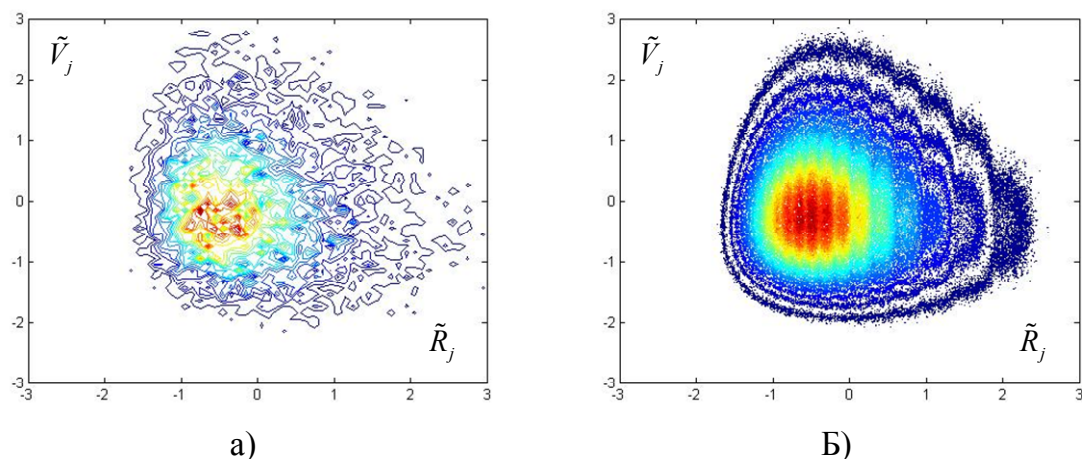


Рис. 3. Изолинии функции плотности вероятности $f(\tilde{R}_j, \tilde{V}_j)$, полученные по экспериментальным данным (а) и путём моделирования (б)

Выводы

1. Получено хорошее согласие экспериментальных результатов и результатов, полученных путём моделирования гамма-фона.
2. Тонкая структура распределения случайных величин, например, среднего временного интервала между всплесками тока в трубке Гейгера может проявиться по естественным причинам, даже если не предполагать влияние космофизических условий.

Библиографический список

1. О реализации дискретных состояний в ходе флуктуаций в макроскопических процессах / С.Э. Шноль, В.А. Коломбет, Э.В. Пожарский и др. // УФН. – 1998. – Т. 168, № 10. – С. 1128–1140.
2. Кушниренко, Е.А. Комментарии к статье С.Э. Шноля и др. / Е.А. Кушниренко, И.Б. Погожев // УФН. – 2000. – Т. 170, № 2. – С. 213–214.
3. Каравайкин, А.В. Некоторые вопросы неэлектромагнитной кибернетики / А.В. Каравайкин. – М.: Наука, 2005. – 288 с.
4. Пархомов, А.Г. Космос. Земля. Человек. Новые грани науки / А.Г. Пархомов. – М.: Наука, 2009. – 272 с.
5. Кобзарь, А.И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников / А.И. Кобзарь. – М.: Физматлит, 2006. – 816 с.

К ТЕОРИИ ЭНЕРГОВЫДЕЛЕНИЯ ПРИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ РАЗРЯДЕ В ПОТОКЕ ЭЛЕКТРОЛИТА

Г.Ф. Кузнецов, С.Ю. Гуревич, Д.Г. Клещев

В работе проведен теоретический и экспериментальный анализ процессов, протекающих при электрическом разряде в потоке электролита, и показана возможность повышения их управляемости.

Ключевые слова: электрический разряд, электролит, выделение энергии.

Известно [1], что для протекания реакций синтеза между легкими атомными ядрами, обеспечивающих высокую выделяющуюся энергию, необходима высокая температура ($\sim 10^8$ К) достаточная концентрация частиц в реакционном объеме. Однако уже в XX веке были проведены теоретические и экспериментальные работы, приближающие исследователей к получению реакций синтеза при более низких температурах [2], где для этих целей использовался мюонный катализ – явление синтеза (слияния) ядер изотопов водорода при нормальных условиях, протекающее при существенном участии мюонов.

За последние годы появилось достаточно много работ, как теоретических, так и экспериментальных, исследующих условия возникновения холодного ядерного синтеза и его результаты [3, 4]. Результаты экспериментов, как правило, хорошо воспроизводятся в твердых кристаллических телах, и плохо – в средах не имеющих дальнего упорядочения (например, жидкости, газы, плазма), свойства которых зависят от большого числа параметров: плотность электрического тока, концентрация химических элементов и примесей, размеров реакционного объема и т. п. Добиться совпадения всех этих параметров в разных опытах нелегко. Кроме того, существует зависимость [3] астрофизического фактора для подпороговой ядерной реакции от агрегатного состояния вещества.

Большинство ядер, вступающих в ядерные реакции, не перескакивают через кулоновский барьер, а просачиваются через него, в результате туннельного эффекта. Таким образом вероятность нахождения частицы в той или иной точке пространства всегда отлично от нуля. Авторы [5] высказали предположение о том, что все квантовые характеристики элементарных частиц (в том числе, масса и электрический заряд) периодически изменяются во времени с очень большой частотой по гармоническому закону. Амплитуда этих колебаний промодулирована другой синусоидой, имеющей значительно больший период и совпадающей с волной де Бройля.

Волны таким образом расплывались, но не исчезали. Частица как бы исчезала в предыдущей точке и появлялась в новой.

Такой подход к развитию квантовой механики является новым, исторически подготовленным, обусловленным новыми задачами. Он согласуется с результатами исследований, проводимых, как в России, так и за Рубежом [6, 7]. Вопросы согласования разрабатываемого подхода с формулировками 1-го и 2-го законов термодинамики рассмотрены в [5].

Существенную роль начинает играть фаза квантовых колебаний частицы. Подтверждением этого предположения являются экспериментальные данные о том, что протон – протонных столкновениях 6 % частиц вообще не взаимодействуют, а пролетают друг сквозь друга. Согласно данной модели заряд протона на короткое время может стать равным нулю, и протон подобно нейтрону может приблизиться к атомному ядру, протуннелировав сквозь кулоновский барьер. Предлагаемый в [5] механизм преодоления кулоновского барьера согласуется с результатами [3] для твердых тел, но сложнее применить его к взаимодействию частиц в плазме.

Коэффициент проникновения протона, обладающего кинетической энергией T , через потенциальный барьер $U(r)$, создаваемый ядром с зарядом Z , по традиционным формулам квантовой механики определяется выражением:

$$D \cong \exp\left(-\frac{4\pi}{h} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2\mu[U(r) - T]} dr\right),$$

где $\mu = Mm/(M + m)$; $T = Ze^2/r_2$; M – масса ядра; m – масса протона; r_1 и r_2 – пределы интегрирования. Расчет по этой формуле дает величину D , практически равную нулю ($D \sim 10^{-50}$), что и обуславливает негативное отношение к разработкам, касающихся холодного ядерного синтеза.

Вероятность ядерного взаимодействия частиц, рассчитанная по предлагаемой в работе [5] методике, дает значительно лучше согласуется с экспериментом, проведенным авторами [8]. Следует отметить также, что многими исследователями, например, авторами работы [6] обнаружено продолжение реакций холодного ядерного синтеза после выключения напряжения в электролитической ячейке, которое длится достаточно долго (6 ч и более).

В вышеизложенной части статьи были рассмотрены вопросы, касающиеся взаимодействия отдельных элементарных частиц. Однако еще больший интерес представляет реализация этих процессов в макрообъеме. Известные энергетические установки, например, описанная в работе [9] используют в качестве рабочего тела жидкие и газообразные вещества, где тем или иным способом создается упорядоченное взаимодействие коллектива частиц с образованием упорядоченной пространственной периодической структуры.

Еще Никола Тесла в 1929 году обнаружил, что в мощном импульсном газовом разряде на протяжении длительности импульса по непонятным причинам возникает много коротких всплесков тока, энергия которых превосходит энергию приложенного электрического импульса. Известны технические решения [10], позволяющие говорить энергетической о высокой эффективности процессов, протекающих при электрическом разряде в жидкостях.

Многими исследователями, в том числе авторами данной работы, отмечено что наиболее эффективный режим с выделением избыточного тепла и образованием новых элементов, протекает в реакторе через который пропускается электрический ток и в котором возникает «плазмод» (большая часть реактора занимает плазма, имеющая оранжево-розовую окраску). В плазме наблюдаются лэнгмюровские колебания электронов относительно тяжелых положительных ионов, которые за период этих колебаний не успевают заметно сдвинуться с места. Фактически электроны находятся в потенциальной яме, причем частота их колебаний достигает несколько МГц, что по величине близко к частоте колебаний электромагнитного поля в реакторе, экспериментально обнаруженного в работе [11]. Это дает основание предполагать, что лэнгмюровские колебания электронов являются источником возникновения переменного электрического тока в реакторе.

Если рассмотреть симметричную параболическую потенциальную яму с одинаковой высотой U стенок во всех направлениях, то генерации избыточного тока не будет [5]. Необходимо, чтобы потенциальная яма была асимметричной (рис. 1). При коллективном движении электронов каждый из них подчиняется обычному уравнению гармонического осциллятора [5] и моделируется функцией

$$U(x) = ax + b \arctg(x^2),$$

где величина a пропорциональна приложенному напряжению, а b – определяется геометрией и параметрами плазмы.

Дальнейшие исследования целесообразно проводить как в экспериментальном, так и расчетном направлениях, т.к. добиться оптимальных эффективных режимов, как свидетельствует опыт многих исследователей, чрезвычайно трудно. Согласно [5] величина энергии U , полученная электроном, зависит от малого параметра ε , входящего в уравнение

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \varepsilon a \frac{dx}{dt} + 2g\varepsilon^2 x^2 = 0,$$

где g – постоянная часть осциллирующего заряда частицы.

Используемый часто экспериментальный подход к исследованию ядерного холодного синтеза совершенно естественен, потому что традиционная квантовая механика не способна выявить параметры, влияющие на этот процесс. Для реализации новых источников энергии нужно разрабатывать

системы, использующие не только разогрев и сжатие материала, а столкновение ядер с малыми энергиями, но с тонкой регулировкой фазы их волновой функции.

Библиографический список

1. Физический энциклопедический словарь / под ред. А.М. Прохорова. – М.: Советская энциклопедия, 1983. – 928 с.
2. Зельдович, Я.Б. Ядерные реакции в холодном водороде / Я.Б. Зельдович, С.С. Гернштейн // УФН. – 1960. – Т. 71, Вып. 4.
3. Цыганов, Э.Н. Холодный ядерный синтез / Э.Н. Цыганов // Ядерная физика. – 2012. – Т. 75, № 2. – С. 174–180.
4. Олейник, В.П. К теории ядерных реакций при низких энергиях: физический механизм реакций / В.П. Олейник, Ю.Д. Арепьев // Физика сознания и жизни, космология и астрофизика. – 2002. – № 4. – С. 30–43.
5. Сапогин, Л.Г. Унитарная квантовая теория и новые источники энергии / Л.Г. Сапогин, Ю.А. Рябов, В.И. Участкин – М.: Изд-во МАДИ (ГТУ), 2003. – 173 с.
6. Канарев, Ф.М. Холодный синтез при плазменном электролизе воды / Ф.М. Канарев, М. Тадахико // Новая энергетика. – 2003. – № 1. – С. 5–10.
7. Ратис, Ю.А. Управляемый «термояд» или холодный синтез? Драма идей / Ю.А. Ратис. – Самара: Изд-во Самарского НЦ РАН, 2009. – 98 с.
8. Взаимопревращения химических элементов / под ред. В.Ф. Балакирева. Екатеринбург: УрО РАН, 2003. – 93 с.
9. Кузнецов, Г.Ф. О возможности получения энергии при электрических разрядах / Г.Ф. Кузнецов, Д.Г. Клещев, В.В. Крымский и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Энергетика». – 2001. – Вып. 2. – № 14. – С. 73–77.
10. Пат. 2096846 Российская Федерация, МКИ G 21 G 1/00, H 05 H 1/24. Способ получения элементов и устройство для его осуществления / А.В. Вачаев, Н.И. Иванов, Г.А. Павлова; заявл. 31.05.94, Бюл. № 32.
11. Кузнецов, Г.Ф. Исследование импульсного электромагнитного поля, возникающего при работе реактора экспериментальной установки / Г.Ф. Кузнецов, С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров // Наука ЮУрГУ: материалы 63-й научной конф. – Челябинск: Издат. центр ЮУрГУ, 2011. – С. 45–48.

УДК 544.7

ИЗУЧЕНИЕ СПОСОБОВ МОДИФИКАЦИИ ГЛАУКОНИТА

Е.А. Григорьева

Рассмотрены различные способы модификации глауконитов, которые позволяют повышать сорбционную активность минерала по отношению к катионам тяжелых металлов, ионам жесткости из водных растворов. Исследовано влияние предварительной термической обработки глауконита Каринского месторождения при $T = 350\text{ }^{\circ}\text{C}$ на сорбционную способность по отношению к ионам аммония.

Ключевые слова: глинистые минералы; глауконит Каринского месторождения; активация; модификация; термообработка; сорбция ионов аммония.

Глинистые минералы широко используются в процессах очистки бытовых и промышленных сточных вод от растворенных в них веществ. Основной причиной их использования является широкая распространенность в природе, невысокая стоимость, удовлетворительная адсорбционная емкость по отношению к ионам тяжелых металлов, ионам жесткости, а также возможность утилизации отработанных сорбентов в производстве строительных керамических материалов. К группе глинистых минералов относят: каолинит, монтмориллонит, глауконит, бентонит и др. Глауконит относится к слоистым железосодержащим алюмосиликатам, где слои неоднородны и чередуются (неразбухающие слюдяные и разбухающие монтмориллонитовые) в произвольном порядке. Разбухающие слои могут поглощать и удерживать вещества из окружающей среды, что и определяет сорбционные свойства глауконита. Адсорбционная емкость глауконита Каринского месторождения при его использовании в промышленных масштабах невелика. Существуют различные способы модификации глауконита, которые позволяют не только существенно увеличить сорбционную емкость, но и приводят к улучшению технологических параметров сорбента. Разработка и применение методов модифицирования глауконита является актуальной задачей.

Основные виды модификации глауконита: химическая (кислотная, введение неорганического сорбента), термическая активации.

1. Химическая активация

1.1. Широко распространен кислотный метод активации. В результате взаимодействия кислоты (соляной, серной, азотной или смесью кислот) с глауконитом происходит удаление основной массы оксидов, разрушение

кристаллической решетки до перехода в аморфную фазу (с размером кристаллитов до 5 нм). Кислотная активация ведет к увеличению числа дефектов в кристаллической структуре, удельной поверхности, объемов пор, пористости. Процесс активации сопровождается образованием ненасыщенных валентных связей за счет удаления большей части гидроксил-ионов из кристаллической решетки глауконита. Сорбционная емкость по нефтепродуктам активированного кислотой глауконита возрастает в среднем на 30 % [1, 2]. Однако следует отметить, что кислотный метод активации глауконита при очистке воды от ионов тяжелых металлов [3], редкоземельных элементов не эффективен. Сорбционная емкость активированного 0,1 М раствором HCl глауконита Каринского месторождения [4] по отношению к тяжелым металлам, редкоземельным элементам снижается на 10 %.

1.2. Модифицирование глауконита осигидратом марганца (IV). Через ионообменную колонну заполненную глауконитом, последовательно пропускают растворы перманганата калия и хлорида марганца (II). В результате данного взаимодействия на поверхности глауконита образуется пленка из осигидратов марганца (IV). Полученная пленка неорганического сорбента обладает концевыми OH- группами, которые функционируют как дополнительные ионообменные центры. Сорбционная емкость глауконита Каринского месторождения модифицированного осигидратом марганца (IV) в 1,5 раза больше, чем для исходного природного сырья по отношению к ионам аммония, железа (II). Модифицированный сорбент может широко использоваться в процессах водоподготовки для деферризации и деманганаии вод. Процессы адсорбционного и ионообменного обезжелезивания воды сопровождаются окислением имеющихся в растворе ионов Fe^{2+} до Fe^{3+} , при помощи высших оксидов марганца, которые при этом восстанавливаются до низших ступеней окисления, а затем, в свою очередь, окисляются. Отмечено, что образующаяся на поверхности зерен глауконита пленка из осигидратов марганца (IV) играет роль связующего компонента и частично предотвращает пептизацию минерала.

2. Термическая активация

Термическая обработка глауконита проводится с целью изменения структурных параметров ячейки минерала. За счет удаления адсорбционной (конституционной) воды увеличивается пространство в алюмосиликатном слое и уменьшается межплоскостное расстояние. В процессе нагревания теряется адсорбированная, межслоевая вода и гидроксильные группы. При температуре 350 °C и выше ионы водорода в структуре становятся неустойчивыми, легче замещаются катионами, поэтому сорбционная емкость глауконита увеличивается. Термообработка глауконита на воздухе ведет к окислению, содержащегося в нем железа и дегидратации по мере повышения температуры до 600–700 °C. После отжига при температуре 1000–1100 °C образуются новые минеральные фазы – магнетит, шпинель, кварц, магнезиоферрит.

Термическая обработка глауконита Каринского месторождения проводилась при температуре 350 °С в течение ½ часа, 1, 2, 3 часов в муфельной печи. Сорбционная способность активированного и исходного природного глауконита оценивалась по отношению к ионам аммония. Ионы аммония сорбировали на образцах глауконита при комнатной температуре из хлоридного раствора. Содержание ионов аммония в растворе оценивали колориметрическим методом с реактивом Несслера.

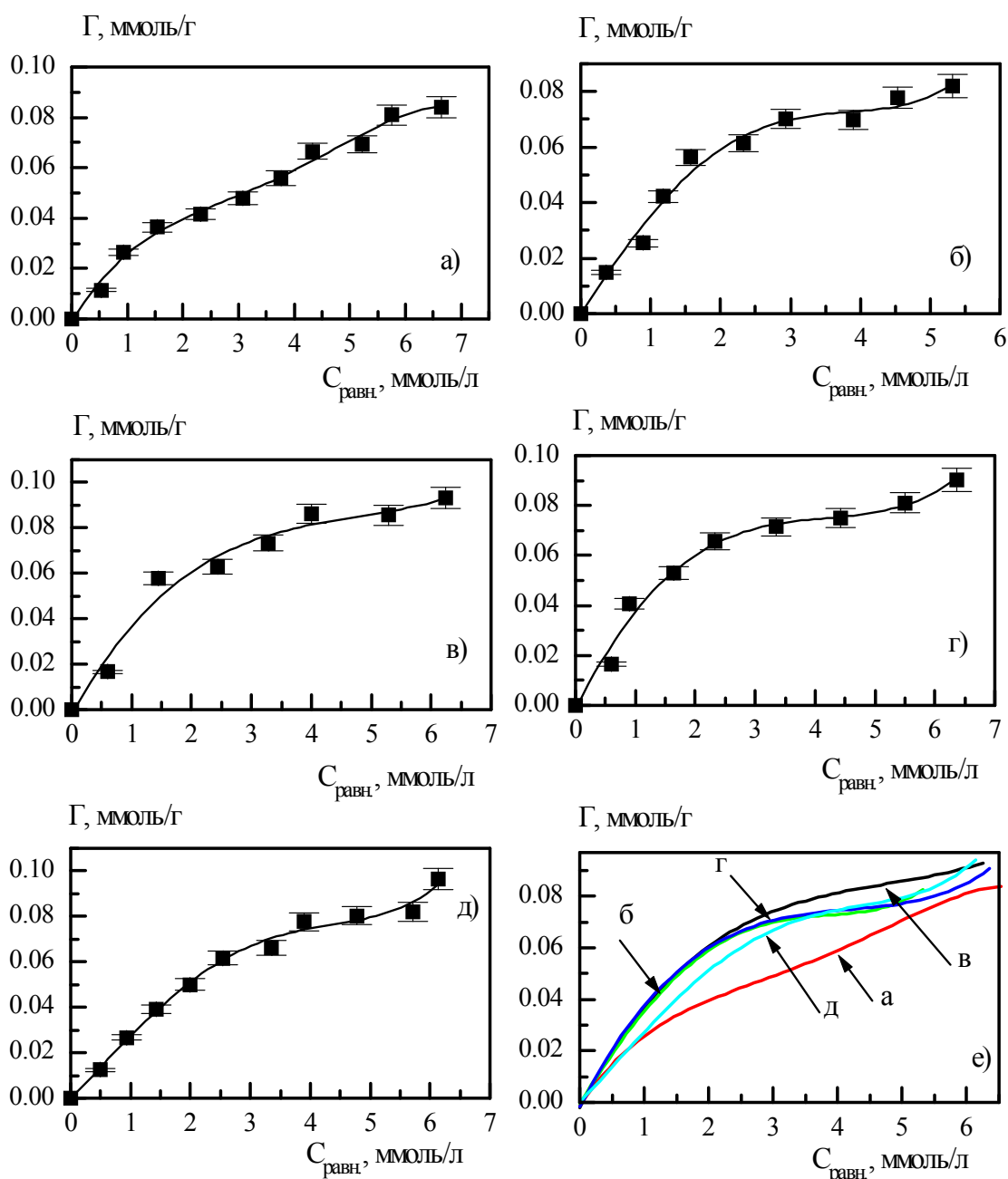


Рис. 1. Изотермы сорбции ионов NH_4^+ термообработанным глауконитом:
а) природный глауконит; б) прокаленный при 350 °С в течение 0,5 ч;
в) то же в течение 1 ч; г) то же в течение 2 ч;
д) то же в течение 3 ч; е) сводный график

На рис. 1 приведены изотермы сорбции ионов аммония образцами глауконита: исходного минерала и предварительно прокаленных образцов при температуре 350 °С в интервале равновесных концентраций 0–7 ммоль/л. Как видно из графиков, термическая обработка при 350 °С глауконита незначительно повышает сорбционную емкость (Γ , ммоль/г) по отношению к ионам аммония, по сравнению с исходным материалом. Продолжительность термообработки существенно не влияет на сорбционную емкость глауконита. Аналогичные результаты были получены в работах [2, 3] по отношению к ионам меди (II), свинца (II).

Анализ существующих способов модификации глауконита показывает, что для повышения сорбционной емкости к нефтепродуктам целесообразно применять кислотный метод активации; для извлечения ионов железа (II), марганца, ионов аммония из растворов – модифицировать из оксигидратом марганца (IV). Термическая обработка при температуре 350 °С неэффективно увеличивает сорбционную емкость глауконита по отношению к ионам аммония. Особенностью модификации глинистых минералов является отсутствие универсальных условий активации сорбента. Важным моментом при получении высококачественного активированного сорбента является подбор условий активации с учетом характера сорбируемого иона, реакции водного раствора из которого будет производиться извлечение и структурных особенностей минерала.

Библиографический список

1. Левченко, М.Л. Оптимальные технологии получения сорбентов и пигментов из природных силикатов сложного состава / М.Л. Левченко, А.М. Губайдулина, Т.З. Лыгина // Вестник Казанского технологического университета. – 2009. – № 4. – С. 48–51.
2. Левченко, М.Л. Структурно-текстурные характеристики природных и активированных алюмосиликатов (глауконитов) / М.Л. Левченко, А.М. Губайдулина, Т.З. Лыгина // Вестник Казанского технологического университета. – 2009. – № 4. – С. 58–61.
3. Влияние предварительной термической и химической обработки глауконита ГБРТО на его рентгеноструктурные характеристики и сорбционную емкость катионов меди (II) и свинца (II) / В.И. Вигдорович, Е.П. Богданова, Л.Е. Цыганкова и др. // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2012. – Т. 14, № 1. – С. 20–24.
4. Григорьева, Е.А. Сорбционные свойства глауконита Каринского месторождения: дис... канд. хим. наук / Е.А. Григорьева. – Челябинск: ЮУрГУ, 2004. – 140 с.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИИ ОБРАЗОВАНИЯ КАТИОНОВ МЕТАЛЛОВ В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

О.Н. Груба, А.Г. Рябухин

На примере щелочноземельных металлов показано, что стандартная энтальпия образования катионов в газовой фазе может быть рассчитана по уравнению модели, первоначально разработанной для определения энтальпии кристаллической решетки. Представлена возможность проводить уточнение величин потенциалов ионизации с помощью термодинамических расчетов.

Ключевые слова: энтальпия образования; газ; ион; радиус; потенциал ионизации.

Любая кристаллическая структура характеризуется определенной (при данных термодинамических условиях) энергией. Подавляющее большинство известных моделей расчета энергии решетки исходят из ионной модели строения кристалла, согласно которой позиции кристаллической структуры заняты сферически симметричными ионами (положительными и отрицательными) определенного радиуса с кулоновским притяжением между ними.

Обобщенное выражение для энергии решетки может быть записано

$$\Delta_p H = -\frac{N_A A_M z_1 z_2}{r} + \phi(r). \quad (1)$$

Здесь N_A – число Авогадро, A_M – число Маделунга, z_1 и z_2 – зарядности ионов, r – кратчайшее межатомное (межструктурное) расстояние, $\phi(r)$ – потенциал отталкивания.

В процессе развития приближенных методов расчета энергии кристаллической решетки вносимые изменения касались главным образом второго слагаемого – потенциала отталкивания $\phi(r)$.

В 40-х годах А.Ф. Капустинский предложил единое для всех типов структур и формул уравнение расчета энергии ионной кристаллической решетки

$$\Delta_p H = \frac{1201,645 z_1 z_2 \sum n}{r_1 + r_2} \left[1 - \frac{0,345}{r_1 + r_2} + 0,0087(r_1 + r_2) \right], \quad (2)$$

где $\sum n$ – число ионов в соединении; r_1 и r_2 – ионные радиусы (по Гольдшмидту). Константа 1201,645 содержит приведенное число Маделунга, мало меняющееся от структуры к структуре.

Подобные соотношения привлекательны своей простотой и малым числом переменных величин. В уравнение (2) входит член, обратно пропор-

циональный квадрату расстояния. Это свидетельствует о попытке учета отталкивательных сил между ионами. К сожалению, уравнение (2) лишь качественно согласуется с имеющимися в настоящее время экспериментальными данными (среднее отклонение $\pm 14,5$).

Энергия кристаллической решетки $\Delta_p H$ – энергия, которая выделяется при образовании кристалла из отдельных ионов газа, находящихся на бесконечном расстоянии друг от друга (без взаимодействия).

Тогда, по определению энтальпия (энергия) решетки

$$\Delta_p H = y \Delta_f H^\circ(K^{z+}, \Gamma) + z \Delta_f H^\circ(A^{y-}, \Gamma) - \Delta_f H^\circ(K_y A_z, \kappa). \quad (3)$$

В свою очередь, энтальпия образования иона в газовой фазе (собственный пар, газ) складывается из энтальпии образования элемента $\Delta_f H^\circ(\Theta^0, \Gamma)$ и потенциала ионизации $I_{1,2,\dots}$ и мольной энтальпии электронного газа

$$\Delta_f H^\circ(K^{z+}, \Gamma) = \Delta_f H^\circ(K^0, \Gamma) + \sum^{z+} I + z_K \cdot 6,1965. \quad (4)$$

В случае анионов учитывается сродство к электрону $A\bar{e}$

$$\Delta_f H^\circ(A^{z-}, \Gamma) = \Delta_f H^\circ(A^0, \Gamma) - \sum^{z-} A\bar{e} - z_A \cdot 6,1965. \quad (5)$$

Потенциал ионизации I и сродство к электрону $A\bar{e}$ характеризуют энергию связи между частицами, то есть энтальпию (в соответствии с законом Г.И. Гесса). При переходе заряда (электрона) с одного энергетического уровня на другой одновременно возникает электромагнитное взаимодействие, величина которого (ΔH) описывается уравнением Ш. Кулона с радиусом, равным расстоянию между энергетическими уровнями. В пределе r равно радиусу иона. Тогда уравнение (1) можно представить в виде

$$\Delta_f H^\circ(K^{z+}, \Gamma) = a + b r_{(K^{z+})}^{-1}. \quad (6)$$

В работе [1] изложена модель расчета энтальпии кристаллической решетки $\Delta_p H$. Адекватность модели подтверждена рентгеновскими и термодимическими характеристиками веществ. Проверим возможность применения модели, первоначально разработанной для расчета энтальпии кристаллической решетки к ионам в газовой фазе.

В соответствии с положениями математической модели $\Delta_p H$ складывается из энтальпии нулевого уровня (ΔH_0) и энтальпии кулоновского взаимодействия ($\Delta H_{вз}$)

$$\Delta_p H = \Delta H_0 + \Delta H_{вз}. \quad (7)$$

$$\Delta_p H = 83,581728 \cdot z_K^2 \cdot z_A^2 \cdot f_1 + 138,9305405 A_M \text{ кч } z_K z_A f_2 r_p^{-1}, \quad (8)$$

где 114,174 и 103,7074 – комбинации фундаментальных констант; $kч$ – координационное число; f_1 и f_2 – структурные факторы; r_p – межструктурное расстояние.

Предположим, что численные коэффициенты ур. (6) и (8) одинаковы (за исключением структурных факторов f). Ранее было показано, что эффективное межчастичное расстояние r_p равно радиусу иона.

В качестве примера рассмотрим ПА-группу (Mg–Ra).

В работе [2] предложена более информативная классификация групп периодической таблицы Д.И. Менделеева, учитывающая схожесть электронного строения не только внешнего, но и предвнешнего энергетического уровней. Согласно этой классификации для полных аналогов выбранной подгруппы коэффициенты a и b уравнения (6) одинаковы, так как $f_1 = \text{const}_{(1)}$ и $f_2 = \text{const}_{(2)}$.

Вещества, содержащие рассматриваемые ионы (Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Ra^{2+}), чаще всего кристаллизуются в кубической сингонии (пространственная группа $Fm\bar{3}m - 4$, NaCl). Электронному строению $2s^2 p^6 3s^2 p^6$ соответствует $kч = 6$, $f = f_{ГЦК} \cdot f_{ОЦК}$ и $A_M = 1,747565$.

Первый структурный фактор

$$f_1 = f_{ГЦК} \cdot f_{ОЦК} = \frac{1}{3} \cdot \left(\frac{3\sqrt{3}}{4} - 1 \right)^{-1} \cdot \frac{\sqrt{3}}{3} = 0,643564.$$

Структурный фактор для второго слагаемого уравнения (8)

$$f_2 = f_{ГЦК} \cdot f_{ОЦК} = \left(\frac{1}{2} \right)^2 \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right)^2 = 0,1875.$$

Окончательно, уравнение расчета энтальпии образования ионов металлов ПА подгруппы (Ca–Ra) в газообразном состоянии

$$\Delta_f H^\circ(\text{Me}^{2+}, \text{г}) = 860,643 + 1092,594 r_{(\text{Me}^{2+})}^{-1}. \quad (9)$$

Исходные данные для расчетов и их результаты приведены в таблице.

Несомненный интерес представляет возможность использования вышеописанного подхода для оценки термодинамических свойств связующего элемента второй группы – магния.

Структурный фактор $f_1 = f_{ГЦК} \cdot f_{\text{прим}} = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot 1 = 0,707107.$

Структурный фактор $f_2 = f_{ГЦК} \cdot f_{ОЦК} = \left(\frac{3\sqrt{3}}{4} - 1 \right) \cdot \frac{\sqrt{3}}{3} = 0,17265.$

Следовательно, энтальпия образования газообразного Mg^{2+}

$$\Delta_f H^\circ(\text{Mg}^{2+}, \text{г}) = 945,619 + 1006,0589 r_{(\text{Mg}^{2+})}^{-1}.$$

Термодинамические характеристики ионов и атомов
элементов ПА-подгруппы в газовой фазе

Me $r(\text{Me}^{2+})$, [1]	$\Delta_f H^\circ(\text{Me}^0, \text{г})$, [3]	$\Sigma I_{1,2}$, эВ [3]	$\Delta_f H^\circ(\text{Me}^{2+}, \text{г})$, ур. (4)	$\Delta_f H^\circ(\text{Me}^{2+}, \text{г})$, ур. (9)	$\Delta_f H^\circ(\text{Me}^0, \text{г})$, ур. (1)
1	2	3	4	5	6
Mg 0,71864	143,846± ±1,674	22,68137	2344,641± ±2,092	2345,567	144,772
Ca 1,01202	192,631± ±1,674	17,98448	1940,249± ±1,674	1940,260	192,642
Sr 1,15779	171,335± ±7,322	16,7243	1797,365± ±7,322	1804,332	178,302
Ba 1,36361	183,259± ±8,368	15,2154	1663,703± ±8,368	1661,894	181,450
Ra 1,38269	149,012± ±12,552	15,4262	1649,7958± ±12,552	1650,838	150,055

Сравнение расчетных и опытных величин, приведенных в столбцах 2 и 6, 4 и 5 таблицы показывает их согласие в пределах доверительных интервалов имеющихся экспериментальных данных.

На примере полных аналогов (Ca, Sr, Ba, Ra) показано, что стандартная энтальпия образования катионов в газовой фазе может быть рассчитана по уравнению модели, первоначально разработанной для определения энтальпии кристаллической решетки. На атомно-молекулярном уровне при любом движении заряда одновременно индицируется электромагнитное поле, количественно определяемое энтальпией электромагнитного взаимодействия, обратно пропорциональное расстоянию между связываемыми частицами. Потенциал ионизации зависит от обратной величины радиуса иона.

Библиографический список

1. Рябухин, А.Г. Эффективные ионные радиусы. Энтальпия кристаллической решетки. Энтальпия гидратации ионов: монография / А.Г. Рябухин. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2000. – 115 с.
2. Груба, О.Н. Энтальпия электромагнитного взаимодействия, потенциал ионизации и энтальпия образования катиона / О.Н. Груба, Н.В. Германюк, А.Г. Рябухин // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». – 2013. – Т. 5. – № 2. – С. 21–25.
3. Энергия разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону: Спр. изд. / Под ред. В.Н. Кондратьева. – М.: Наука, 1974. – 351 с.

ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДНЫХ ДОБАВОК НА ВЫХОД И КАЧЕСТВО ПЕКОВОГО КОКСА

Е.М. Малютина, Б.Ш. Дыскина

Рассмотрена возможность получения товарного пекового кокса на основе среднетемпературного каменноугольного пека (СТП) с использованием добавок твердофазных углеродсодержащих отходов электродного производства.

Ключевые слова: пековый кокс; углеграфитовые и графитированные пылевые отходы; каменноугольный пек.

Пековый электродный кокс – продукт коксохимического производства, используемый в технологии производства широкого спектра многотоннажной углеграфитовой продукции. Сырьем коксования служит высокотемпературный пекс температурой размягчения не менее 145 °С [4]. Значительная потребность в пеке обуславливает его дефицит и актуальность данной работы.

Задачи.

1. Разработка способа рационального использования твердофазных отходов электродного производства.

2. Снижение удельного расхода каменноугольного пека при получении пекового кокса.

Для исследования изготовлены композитные коксы на основе СТП производства «Мечел-Кокс» (ГОСТ 10200-83) с введением углеграфитовых (УГПО) и графитированных пылевых отходов (ГПО). Пробы пылей отобраны с электрофильтров отделений механической обработки обожженной угольной продукции и графитированных электродов бывшего ООО «Челябинский электродный завод». Пробы пылей малозольные, малосернистые. Исходные свойства сырьевых компонентов приведены в табл. 1.

Таблица 1

Показатели качества сырьевых материалов

Наименование показателей	СТП	УГПО	ГПО
Плотность, г/см ³ , не менее	1,28	1,83	2,18
Зольность, %	≤ 0,3	0,5–2,0	0,6–1,1
Выход летучих веществ, %	53–63	≤ 1,0	≤ 0,5
Содержание углерода, %	63,7	95,0	99,0
Массовая доля серы, %	≤ 0,3	0,42	0,08

Для коксования готовили твердофазные смеси пыли и пека. Их соотношение варьировали в пределах 10...90 : 90...10 (масс. %). В каждом случае смесь пека и пыли тщательно перемешивали, затем помещали в печь коксования. Коксование проводили при температуре $(500 \pm 10)^\circ\text{C}$ в течение 2,5 час с выдержкой в течение 5 часов. Полученный кокс охлаждали вместе с печью.

При введении пыли в количестве от 10 до 30 % выход пекового кокса составил 66–74 %, наименьшее значение соответствует 30 % пыли. Из табл. 2 видно, что с повышением конечной температуры коксования в указанных пределах выход кокса (y , %) увеличивался прямо пропорционально по уравнению:

$$Y = 66 + 0,35 \Delta t.$$

Таблица 2

Влияние вида и количества пыли и температуры коксования
на выход кокса

Добавка	Количество добавки, %	Температура коксования, $^\circ\text{C}$	Выход кокса, %
Графитовая пыль	10	510	73
Угольная пыль	10	510	74
Графитовая пыль	20	500	69
Угольная пыль	20	500	69
Графитовая пыль	30	490	66
Угольная пыль	30	490	66

Увеличение количества пыли более 30 % не приводит к получению кускового кокса. По-видимому, увеличение доли пылевого наполнителя приводит к уменьшению толщины пекового слоя и возрастанию скорости разложения до значений, превосходящих скорость процессов коксообразования. Вовлечение пыли меньше 10 % связано с недостаточной утилизацией пылевидных отходов электродных производств. Использование углеродных пылевых отходов позволяет снизить удельный расход дефицитного пека для получения 1 т пекового кокса (табл. 3). Причем наименьший суммарный расход сырья получен в случае 20%-ной добавки.

По качеству полученный композитный кокс малозольный, малосернистый с выходом летучих веществ на уровне нефтяных коксов замедленного коксования (табл. 4). Опытный кокс отличается более анизотропной структурой, чем пековый без наполнителя. Исходя из этого, пековые композитные коксы с введением наполнителя могут быть рекомендованы в качестве

сырья для графитированной продукции по технологической схеме: про-
калка – дробление – классификация – дозирование – прессование – обжиг –
графитация [3].

Таблица 3

Влияние состава на удельный расход сырьевых компонентов

Состав сырья коксования, %			Выход кокса, %	Удельный расход сырьевых материалов, т/т		
№ пробы	СТП	ГПО		Всего	СТП	ГПО
1	100	0	64	1,56	1,56	0
2	90	10	73	1,37	1,23	0,14
3	80	20	69	1,35	1,16	0,29
4	70	30	66	1,51	1,06	0,45

Таблица 4

Качественные показатели опытных пековых коксов

Наименование	Зольность, %	Сера, %	Выход летучих веществ, %
Кокс опытный с графитированной пылью ГПО	0,23	0,32	8,9/0,4*
Кокс опытный с обожженной угольной пылью УГПО	0,37	0,28	12,1/0,3
Марки коксов (ГОСТ 3213-91)	нормы, не более		
КПЭ-1	0,30	0,30	0,8**
КПЭ-2	0,30	0,70	0,8
КПЭ-3	0,50	0,70	0,8
марка КЗ*	0,60	1,00	9,0

Примечания.

*КЗ – кокс замедленного коксования (490–500 °С).

**Выход летучих веществ после коксования при 1000 °С: в числителе вы-
ход летучих веществ из сырого кокса (500±10 °С), в знаменателе – из прокален-
ного.

Выводы

1. Экспериментально показана возможность получения малосернистого малозольного пекового кокса на основе каменноугольного пека с введением твердофазных углеродных отходов.

2. Показана эффективность введения добавки углеродной пыли на выход пекового кокса. Установлено снижение удельного расхода каменноугольного пека на 1 т кокса пропорционально количеству добавок. Наименьший суммарный расход сырья получен при введении добавки 20 %.

3. Полученные опытные коксы по качеству соответствуют техническим требованиям к коксам, используемым в электродной промышленности для производства графитированной и обожженной продукции, а также анодной массы.

Библиографический список

1. Пат. 2378320 Российская Федерация, МПК⁵¹ С 10 В 55/00, С 10. Способ получения пекового кокса / Е.М. Малютина, Б.Ш. Дыскина, О.Ф. Корчажкина. – № 2008130805/04; заявл. 25.07.08; опубл. 10.01.2010, Бюл. № 1. – 5 с.

2. Дыскина, Б.Ш. Влияние режима коксования и углеродсодержащей пыли на коэффициент анизотропии пекового кокса / Б.Ш. Дыскина, Е.М. Малютина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2007. – № 21. – С. 52–55.

3. Чалых, Е.Ф. Технология и оборудование электродных и электроугольных предприятий / Е.Ф. Чалых. – М.: Metallurgy. – 1972. – 432 с.

4. Привалов, В.Б. Каменноугольный пек / В.Б. Привалов, М.А. Степаненко. М.: Metallurgy, 1981. – 208 с.

ОКСИДЫ ВЕНТИЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ В СТРУКТУРЕ ПЛЁНОЧНЫХ ОКСИДНОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Т.В. Варламова

На примере плёнок системы $\text{IrO}_2\text{--TiO}_2$ показана роль оксидов вентильных металлов в формировании структуры и электронных свойств функциональных плёночных материалов на основе композитов из оксидов металлов. Изучение состава и морфологии плёнок системы $\text{IrO}_2\text{--TiO}_2$ проводилось методами рентгеновской дифрактометрии и ИК-спектроскопии.

Ключевые слова: оксиднометаллические плёнки, электрокатализаторы, оксид иридия, оксид титана, рентгенографический анализ, ИК-спектры.

Металлы, которые при анодном окислении образуют на поверхности оксидные плёнки с полупроводниковой проводимостью называют вентильными. К ним относятся Ti, Zr, Sn, Sb, Bi, Ta, Nb, Fe, Cd и др.

Композиции оксидов вентильных металлов с оксидами благородных металлов (в частности электродные покрытия ОРТА [1]) выполняют важные электрокаталитические и противокоррозионные функции на поверхности промышленных электродов в электрохимических крупнотоннажных производствах хлора и его производных, повышая тем самым их эффективность. Понимание роли каждого из компонентов в электрохимических процессах и раскрытие связи между морфологией и указанными функциональными свойствами является важной задачей, решение которой позволит управлять свойствами оксиднометаллических покрытий посредством целенаправленного формирования их состава, структуры и морфологии. В данной работе на примере исследования состава, морфологии и структуры фаз плёнок в системе $\text{IrO}_2\text{--TiO}_2$ показана роль оксидов вентильных металлов.

Объектом исследования являлись плёнки состава $x\text{IrO}_2\cdot(1-x)\text{TiO}_2$ ($x=0\div 1$), приготовленные путём послойного нанесения водных растворов – однокомпонентных или смешанных, гексахлориридиевой кислоты и/или хлорида титана (IV). Каждый нанесённый слой высушивался и прокаливался при заданной температуре в интервале 400–800 °С.

Рентгенографический анализ плёнок состава $x\text{IrO}_2\cdot(1-x)\text{TiO}_2$ ($x=0\div 1$), сформированных при 450 °С, показывает наличие в них двух рутильных фаз и одной фазы анатаза. Относительное количество данных фаз различается в зависимости от состава покрытия. Так плёнка, имеющая в составе только TiO_2 , на 100 % состоит из анатаза. Количество фазы анатаза резко уменьшается, начиная с составов, характеризуемых $x>0,1$. Это определено

по соотношению интенсивностей рефлексов, отвечающих структурам рутила и анатаза. В плёнках с содержанием оксида иридия более 30 молярных % присутствуют только следы фазы анатаза.

На рис. 1 представлен фрагмент рентгенограмм для области углов 2θ от 14 до 20, для плёнок состава $0,3\text{IrO}_2 \cdot 0,7\text{TiO}_2$, приготовленных при температурах отжига $T_0 = 400 - 800^\circ\text{C}$. На представленном фрагменте для плёнки с $T_0 = 450^\circ\text{C}$ наблюдаются два хорошо разнесённых пика с межплоскостными расстояниями $d = 2,50$ и $2,56$ ангстрем. Если сравнить $d_{101} = 2,489$ ангстрем для структуры TiO_2 и $d_{101} = 2,582$ ангстрем для структуры IrO_2 [1], то оба экспериментальных пика можно идентифицировать как 101, принадлежащие разным фазам рутила – I и II, соответственно для оксида титана и оксида иридия.

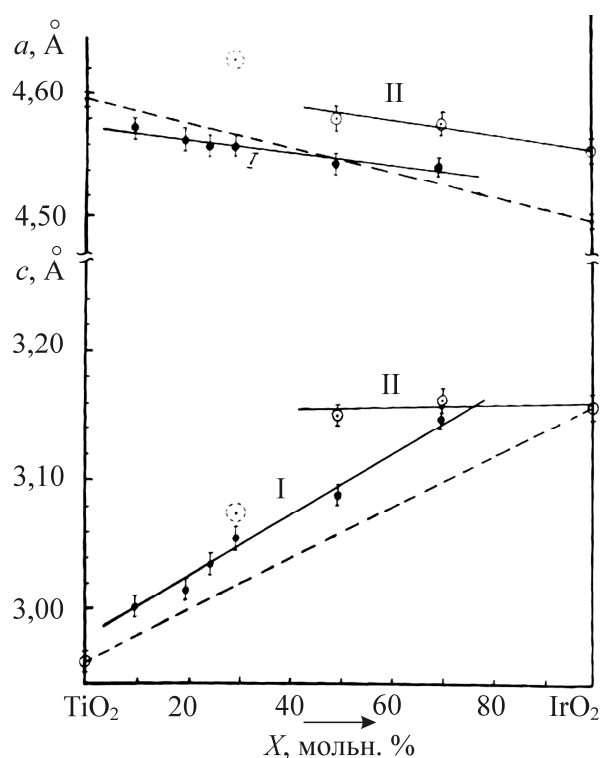


Рис. 1. Рефлекс 101 на рентгенограммах плёнок $0,3\text{IrO}_2 \cdot 0,7\text{TiO}_2$, приготовленных при различных температурах

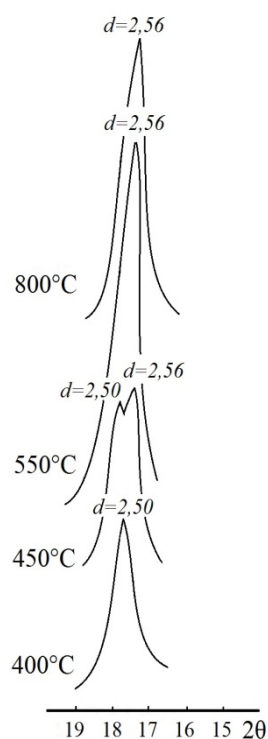


Рис. 2. Параметры a и c элементарных ячеек фаз I и II со структурой типа рутила в плёнках состава $x\text{IrO}_2 \cdot (1-x)\text{TiO}_2$

По рефлексам 112 и 301 были рассчитаны периоды a и c тетрагональных элементарных ячеек рутильных фаз I и II по формуле [2]:

Периоды a и c в рутильной фазе I изменяются линейно для всего ряда плёнок различного состава $x\text{IrO}_2 \cdot (1-x)\text{TiO}_2$ (рис. 2). Полученная зависимость величины периодов a и c от состава плёнок близка к закону Вегарда (особенно для a), если в качестве крайних значений взять параметры a и c для безводных кристаллических оксидов титана и иридия, соответственно.

Исходя из этого, следует заключить, что фаза I представляет собой твёрдый безводный раствор IrO_2 и TiO_2 .

В связи с малой интенсивностью всех рефлексов фазы II в составах, содержащих менее 30 молярных % оксида иридия рефлексы 112 и 301 в прецизионной области углов вообще отсутствуют.

Параметр c фазы II для плёнок, содержащих более 30 молярных % IrO_2 ($x > 0,3$) практически не изменяется. В свою очередь период a изменяется линейно и монотонно относительно величины a для безводного IrO_2 . Указанные данные позволяют заключить, что фаза II представляет собой твёрдый раствор на основе IrO_2 . Полученное экспериментально значение параметра $a = 4,554 \pm 0,003$ ангстрем для фазы II является увеличенным по отношению к параметру a для безводного IrO_2 (4,498 ангстрем [3]). Причины такого отклонения можно объяснить с помощью данных ИК-спектроскопического исследования плёнок состава $x\text{IrO}_2 \cdot (1-x)\text{TiO}_2$, полученных при 450 °С. Данные ИК-спектрометрии приведены в таблице.

Присутствие в ИК-спектрах полос поглощения в области валентных колебаний О–Н связи – 3400 и 3170 см^{-1} , указывает на наличие в составе плёнок кислородно-водородных групп. Оксидные иридий-титановые плёнки в отличие от плёнок на основе одного только IrO_2 не имеют полосы поглощения в области 1500–1600 см^{-1} , отвечающей деформационным коле-

Данные ИК-спектроскопии для оксидных иридий-титановых плёнок, приготовленных при 450 °С

Компонентный состав плёнок, молярные доли	Полосы поглощения, см^{-1}				
	3400	3170	1600	650	
1,0 IrO_2	о.сл.	о.сл.	сл.ш.	с.ш.	–
0,7 $\text{IrO}_2 \cdot 0,3\text{TiO}_2$	о.сл.	о.сл.	–	620 с.ш.	–
0,5 $\text{IrO}_2 \cdot 0,5\text{TiO}_2$	о.сл.	3180 о.сл.	–	620 с.ш.	–
0,3 $\text{IrO}_2 \cdot 0,7\text{TiO}_2$	о.сл.	3180 о.сл.	–	630 с.ш.	350 о.сл.
0,2 $\text{IrO}_2 \cdot 0,8\text{TiO}_2$	–	–	–	600 с.ш.	350 о.сл.
0,25 $\text{IrO}_2 \cdot 0,75\text{TiO}_2$	о.сл.	3170 о.сл.	–	600 с.ш.	340 сл.
0,1 $\text{IrO}_2 \cdot 0,9\text{TiO}_2$	о.сл.	3170 о.сл.	1600 сл.	500 с.	330 ср.
0,05 $\text{IrO}_2 \cdot 0,095\text{TiO}_2$	–	–	1630	500 с.	330 ср.

баниям О–Н, что указывает на малое содержание кислородно-водородных группировок в присутствии оксидно-титановой компоненты в плёнках. Поскольку прекурсором оксида титана в исходном растворе для нанесения плёнки является практически полностью гидролизованная соль, то можно предположить, что исходно до начала сушки и терморазложения титановая компонента уже находилась в полимеризованной форме с преимущественным образованием оксо-связей. Именно эта компонента должна входить в состав рутильной безводной фазы I, представляющей собой твёрдый оксидно-иридий-титановый раствор. Тогда, с учётом данных рентгенографии рутильную фазу II можно аттестовать как твёрдый раствор на основе частично гидратированного IrO_2 , для которого увеличение параметра элементарной ячейки a можно объяснить встраиванием кислородно-водородных групп в объём элементарной ячейки.

В области валентных колебаний М–О связи ($400\text{--}800\text{ см}^{-1}$) ИК-спектров оксидных иридий-титановых плёнок наблюдается интенсивная, широкая полоса валентных колебаний связи М–О–М в конденсированных тетраэдрах. Наблюдаемая более узкая полоса 350 см^{-1} характерна для плоских колебаний Ti_3O в структуре анатаза. Необходимо обратить внимание на то, что в плёнках, содержащих менее 70 молярных % TiO_2 полоса в области 350 см^{-1} отсутствует, что согласуется с данными рентгенографии.

Таким образом, присутствие в составе плёнок системы оксида титана, сформированного на основе сильно гидролизованной в растворе компоненты (что характерно для всех перечисленных оксидных металлов) в составе системы $\text{IrO}_2\text{--TiO}_2$ приводит к образованию микрогетерогенной системы, многофазность кристаллической части которой обусловлена присутствием титановой (оксидной) компоненты).

Библиографический список

1. On The Character Of Solid Solutions In Rutenium-Titanum Anodes / Yu.E. Roginskaya, I.D. Belova, B.Sh. Galyamov et al. // Materials Chem. And Phys. – 1989. – Vol. 22. – P. 203–229.
2. Миркин, Л.И. Справочник по рентгенографическому анализу поликристаллов / Л.И. Миркин. – М.: Гос. Изд-во физ.-мат. литературы, 1961. – 863 с.
3. ASTM. Diffraction Data Card File. – Washington, 1970. – box. 15-870.

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПЕКОВОГО КОКСА НА ТВЕРДОФАЗНОМ НОСИТЕЛЕ

Б.Ш. Дыскина, Ю.В. Колупаева

Показано, что формированию анизотропной структуры в пековом коксе способствует введение в среднетемпературный пек перед коксованием крупных высокоанизотропных частиц (более 2 мм) игольчатых коксов; наполнение высокотемпературного пека изотропными гранулами (–2+1 мм) образует изотропные структуры.

Прекращение выпуска специализированных марок нефтяных коксов с массовой долей серы до 1,0 % поставило электродную промышленность в состояние сырьевого «голода». Единственным малосернистым коксом, производимым в России, остался пековый электродный кокс (ГОСТ 3213–91) с содержанием серы 0,25–0,70 %, применяющийся в качестве сырья обожженных анодов и анодной массы для алюминиевых электролизеров. В работах [1, 2] доказана возможность его использования для изготовления реакторного и других марок конструкционного графита. Также остается нерешенной актуальная проблема федерального уровня по обеспечению производства высокоплотных графитированных электродов отечественным игольчатым коксом, рядовых электродов – малосернистым [3]. Потребность в игольчатом и малосернистом коксах для графитированных электродов полностью покрывается за счет импорта.

Цель работы – изыскать возможность регулирования структуры пекового кокса введением дисперсных углеродных наполнителей.

Для получения наполненного пекового кокса в качестве матрицы использовали каменноугольные пеки (ГОСТ 10200–83), с температурой размягчения 65, 75 и 90 °С (табл. 1).

Таблица 1

Характеристика каменноугольного пека

Наименование показателей	Нормы ГОСТ 10200-83		СТП-1	СТП-2	ВТП
	СТП	ВТП			
Температура размягчения, °С	67–73	85–90	65	75	90
Массовая доля веществ, нерастворимых в толуоле (α -фракция), %	25–31	25–31	26	30	54
Выход летучих веществ, %	58–62	53–57	62	58	55
Зольность, %	0,3	0,3	0,20	0,40	0,55
Массовая доля серы, %	0,3	0,3	0,33	0,35	0,40

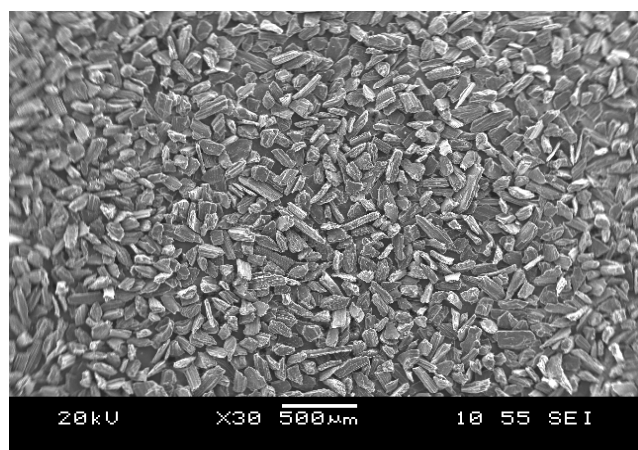
В качестве наполнителя использовали фракции ($-4+2$ мм; $-2+1$ мм) малосернистых, малозольных коксов: пекового игольчатого (ИК) и нефтяного изотропного (СК) (табл. 2). Чем больше оценка микроструктуры кокса, тем структура его более анизотропная с коэффициентом анизометрии частиц $\gg 1$.

Таблица 2

Характеристика коксов-наполнителей

Наименование показателей	Нефтяной спецкокс изотропный (СК)	Пековый игольчатый (ИК)
Действительная плотность, г/см ³	2,02	2,13
Зольность, %	0,2	0,3
Массовая доля серы, %	0,3	0,3
Оценка микроструктуры, балл	2,0	5,5

Фракции коксов неоднородны по анизометрии частиц (см. рисунок). Для исследования из каждой фракции изотропного кокса выбрали частицы



Микрофотография пекового игольчатого кокса

с коэффициентом анизометрии примерно 1,0 и 1,5, то есть изотропные и относительно анизотропные. Из игольчатого кокса выбрали частицы с коэффициентом анизометрии 1,0–2,0 и 3,0 и более. Для изготовления опытных коксов в твердофазный пек (фракцию $-1,0$ мм) вводили выбранные частицы коксов в соотношении 1:10 к пеку и тщательно перемешивали. Для сравнения готовили контрольный образец пекового кокса без добавок. Коксовали в муфельной печи с цифровым управлением МИМП-УЭ при температуре при 500 °С, с выдержкой 3 часа. Образцы коксов охлаждали вместе с печью.

Выход пекового кокса без введения добавок увеличивается пропорционально повышению температуры размягчения пека. Введением зерновых фракций в сырье коксования во всех случаях привело к повышению общего выхода наполненного кокса. Наполнение пека СТП-1 частицами игольчатого кокса с коэффициентом анизометрии ≥ 3 способствовало формированию анизотропной структуры полученного кокса с коэффициентом анизометрии 1,8–1,6. Эффективнее применение более крупной фракции $-4+2$ мм. Влияние изотропных частиц ИК не заметно. Наполнение более тяжелых пеков частицами с коэффициентом анизометрии ~ 1 обусловило

получение изотропного пекового кокса с таким же коэффициентом; с анизометричными частицами $\geq 1,5$ из этих пеков получен кокс более анизотропной структуры, чем без наполнения (табл. 3).

Таблица 3

Влияние поверхности на выход и структуру наполненного пекового кокса

Исходный состав				Наполненный кокс		
Пек	Кокс			Выход кокса, %		К _{анизометрии} частиц +2 мм
Шифр	Фракция, мм	К _{анизометрии}		общий	из пека	
СТП-1				53,9		1,4
СТП-1	ИК	–4+2	1–2	57,4	53,2	1,4
СТП-1	ИК	–2+1	1–2	62,8	59,1	1,4
СТП-1	ИК	–4+2	≥ 3	60,1	56,1	1,8
СТП-1	ИК	–2+1	≥ 3	68,4	65,2	1,6
СТП-2				60,4		1,3
СТП-2	СК	–4+2	~1	67,8	64,6	1,3
СТП-2	СК	–2+1	~1	67,3	64,1	1,1
СТП-2	СК	–4+2	$\geq 1,5$	67,4	64,3	1,5
СТП-2	СК	–2+1	$\geq 1,5$	63,0	59,4	1,4
СТП-2	СК	–1+0		64,8	69,1	1,2
ВТП				65,5		1,2
ВТП	СК	–4+2	~1,0	76,5	74,1	1,0
ВТП	СК	–2+1	~1,0	83,1	79,6	1,0
ВТП	СК	–4+2	$\geq 1,5$	72,5	69,9	1,5
ВТП	СК	–2+1	$\geq 1,5$	67,7	64,6	1,3
ВТП	СК	–1+0		71,7	61,4	1,2

Полученные результаты свидетельствуют об ориентационном эффекте поверхности на процессы коксования. Установлена закономерность: чем крупнее анизотропная частица, тем более она эффективна для формирования структуры в относительно легком сырье коксования, но при этом снижается выход кокса. Максимальный выход изотропного кокса получен наполнением мелкими изотропными частицами. Исследованные наполненные коксы малосернистые, малозольные могут быть рекомендованы для применения в технологии производства графитированных электродов (анизотропные) и конструкционного графита (изотропные).

Показано, что формированию анизотропной структуры наполненного пекового кокса способствует введение в среднетемпературный пек более крупных ($-4+2$ мм) высокоанизотропных фракций игольчатых коксов; формированию прочных изотропных коксов способствует наполнение высокотемпературного пека изотропными гранулами ($-2+1$ мм).

Таким образом, установлена принципиальная возможность регулирования структуры пекового кокса введением наполнителей – коксов разной структуры в соответствующее сырье коксования.

Библиографический список

1. Селезнев, А.Н. Углеродистое сырье для электродной промышленности / А.Н. Селезнев. – М.: Профиздат, 2000. – 256 с.
2. Виргильев, Ю.С. Реакторный графит: разработка, производство и свойства / Ю.С. Виргильев, А.Н. Селезнев и др. // Российский химический журнал. – 2006. – т. 1. – № 1. – С. 4–12.
3. Расширение области применения пекового кокса / Б.Ш. Мордухович, П.Б. Рабин, Ю.Л. Денисов и др. // Кокс и химия. – 2004. – № 8. – С. 10–11.

ПОЛУЧЕНИЕ КАРБЮРИЗАТОРОВ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ ПЫЛЕВЫХ ОТХОДОВ В ПОЛИВИНИЛОВОМ СПИРТЕ

Е.М. Малютина, Б.Ш. Дыскина

Предложена технология изготовления гранулированного карбюризатора на основе графитированных пылевидных отходов электродного производства с использованием в качестве связующего раствора поливинилового спирта. Оптимальное соотношение пыли и связующего 70:30 % масс. Получен малозольный, малосернистый карбюризатор с размерами гранул более 0,5 мм.

Ключевые слова: графитированная пыль; гранулирование; поливиниловый спирт; карбюризатор.

В технологии производства высокопрочного чугуна и стального литья в индукционных и электросталеплавильных печах для корректирования содержания углерода применяют различные углеродные материалы – науглероживатели (карбюризаторы). С помощью карбюризатора увеличивают содержание углерода в металле при получении серого чугуна, производстве высокопрочного чугуна и стального литья [1, 2]. Из стальных отходов с добавлением карбюризатора получают синтетический чугун с высокими механическими свойствами при пластинчатой форме графита [4]. Качество карбюризатора оценивают по содержанию углерода и примесей, в технологическом процессе – по усвоению углерода расплавом. Степень насыщения жидкого металла углеродом определяется химической чистотой углеродного материала без учета особенностей кристаллической структуры [3]. Согласно [4], наоборот, скорость науглероживания зависит от совершенства структуры и размеров кристаллитов.

В электросталеплавлении карбюризатор подают инъекцией порошкообразных материалов под струю металла при разливе в ковш, или в виде частиц размером до 10 мм – в электропечь [2]. При продувке металла порошками обеспечивается максимальный контакт твердых реагентов с жидким расплавом, но пылевые частицы увлекаются с дымовыми газами.

Цель настоящей работы – получение гранулированных карбюризаторов с максимальным содержанием углерода и оптимальным гранулометрическим составом из углеродсодержащих пылевых отходов.

Для изготовления гранулированного карбюризатора опробованы пылевые отходы, уловленные электрофильтрами при механической обработке графитированных электродов (графитированная пыль с действительной плотностью 2,18–2,22 г/см³) и обожженных угольных изделий на основе термоантрацита (угольная пыль – 1,70–1,95 г/см³). Исходя из значений действительной плотности пыли – это углеродные материалы, термообра-

ботанные, соответственно, при температурах 2200–2500 и 900–1000 °С. По качеству пыли малозольные, малосернистые, с содержанием углерода 98,0–99,5 % (табл. 1), могут быть применены в черной металлургии как карбюризаторы.

Таблица 1

Характеристика проб углеродсодержащей электрофильтовой пыли

Пробы пыли	Зольность, %	Д _и , г/см ³	S, масс. %
Графитированная пыль	0,2–1,2	2,18–2,22	0,03–0,35
Угольная пыль	0,5–2,0	1,70–1,95	0,30–0,55

Ситовой анализ показал, что графитированная пыль более чем на 70 % состоит из частиц размером менее 0,071 мм, угольная пыль более крупно-дисперсная – на 87 % состоит из фракций +0,071 мм (табл. 2).

Таблица 2

Гранулометрический состав пылей (% масс.)

Фракции, мм	Угольная (УП)	Графитированная (ГП)
+0,50	4,3	1,7
–0,50+0,16	9,8	7,1
–0,16+0,09	62,3	7,2
–0,09+0,071	10,9	6,0
–0,071+0	4,3	71,1

Графитированная пыль более химически чистая (содержит меньше золы и серы), тонкодисперсная. Однако с увеличением тонины возрастает слеживаемость материала при хранении. В промышленной технологии введение в жидкий расплав порошковых науглероживателей осложняется интенсивным уносом с дымовыми газами пылевых частиц (менее 0,5 мм). Их доля в угольной пыли более 75 %, в графитированной – более 90 %. Одним из способов укрупнения частиц является гранулирование. Для этого требуется связующее вещество, которое должно быть малосернистым, малозольным, обеспечивать формирование полигранулята с минимальным содержанием частиц менее 0,5 мм.

В качестве связующего вещества опробовали поливиниловый спирт (ПВС, ГОСТ 10779-78) – твердый бесцветный полимер, хорошо растворим в воде, нетоксичен, имеет низкую стоимость. Содержит мало серы, азота, летучих веществ, золы (табл. 3). Известно применение ПВС в качестве связующего в формах для литья. Исследовали водные растворы ПВС (10, 15 и 20 %). Навеску ГП заливали кипящим раствором ПВС при перемешивании. Полученную горячую массу окатывали и охлаждали. ПВС имеет хорошую

адгезию к графиту, образует прочные гранулы. Гранулы размерами более 0,5 мм получены при использовании 15–20%-ного растворов ПВС в количестве более 95 % (табл. 4).

Таблица 3

Основные технические характеристики ПВС

Наименование	Значения
Плотность, г/см ³	1,27–1,30
Зольность, %	0,2–0,5
Выход летучих веществ, %	не более 5
Содержание основного вещества, %	не менее 94
Массовая доля серы, %	0,003

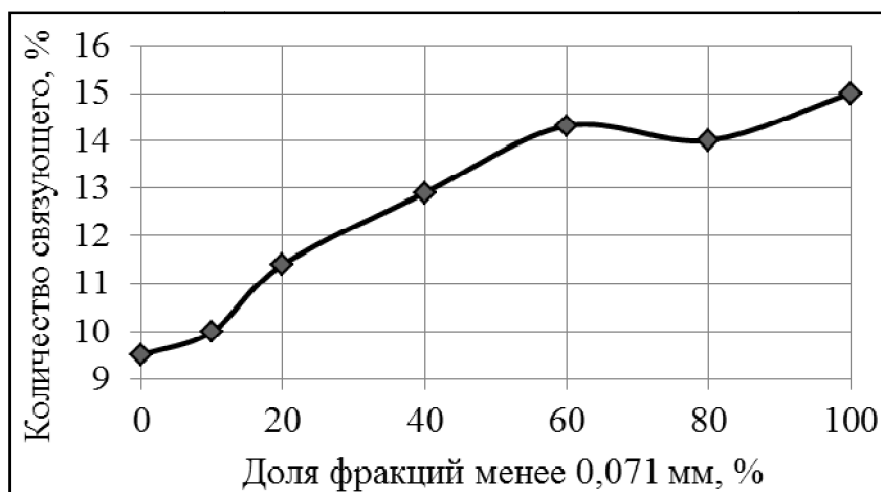
Таблица 4

Влияние концентрации раствора ПВС и количества связующего (15%-ный ПВС) на гранулометрический состав карбюризатора

Концентрация водного раствора ПВС, %	Размер частиц, мм				
	+2	–2+1	–1+0,5	Σ + 0,5 мм	–0,5+0,071
10	21,6	19,3	27,3	68,2	31,8
15	70,7	16,6	6,4	95,4	4,6
20	78,9	10,1	7,1	96,1	3,9
Количество связующего (15 %-ный раствор ПВС), %	Размер частиц, мм				
	+2	–2+1	–1+0,5	Σ + 0,5 мм	–0,5+0,071
15	36,6	23,3	10,6	70,5	11,8
20	70,7	16,6	6,4	93,7	4,6
30	98,9	1,0	0,1	100,0	–

Влияние дисперсности исследовали на образцах графитированной пыли с разным количеством тонких фракций менее 0,071 мм: 10, 20, 40, 60, 80, 100 %, остальное – фракции более 0,071 мм. Каждую пробу пыли сначала перемешивали «всухую»; затем при перемешивании медленно вводили свежеприготовленный связующего до полного вовлечения пыли. Полученный полигранулят рассеивали на сите 1 мм. Затем к подситной фракции (минус 1 мм) добавляли 0,1 г горячего связующего и снова гранулировали, охлаждали, рассеивали и так до получения 100 % гранул размерами более 1,0 мм.

С увеличением тонких фракций ($-0,071$ мм) требуемое количество связующего (15 %-ный раствор ПВС) монотонно возрастает, для 100 %-ной фракции $-0,071$ мм составляет 15 % (см. рисунок). Затем опробовали гранулирование с разным количеством связующего (15%-ного раствора ПВС – 15, 20 и 30 %). Увеличение количества связующего способствует укрупнению гранул.



Зависимость количества ПВС от дисперсности ГП

При количестве 30 % – получен полигранулят, полностью состоящий из частиц более 0,5 мм (табл. 5). Учитывая, что связующее – это 15 %-ный водный раствор ПВС, в гранулах с 30 % связующего – содержание собственно ПВС составляет всего 4,5 %. Состав гранул: 70 % – ГП; 4,5 % – ПВС; 25,5 % – воды. После сушки массовая доля влаги в гранулах – составила всего 0,43 % (табл. 5). Гранулы негигроскопичны. Состав осушенных гранул: 93,4 % – ГП, 6,0 % – ПВС и 0,6 % – влажность.

Таблица 5

Оценка качества полученных карбюризаторов

Наименование показателя	Заданные требования	ГП+30 %ПВС (15%-ный раствор)
Массовая доля влаги, %	не более 0,5	0,43
Выход летучих веществ, %	не более 0,5	0,20
Массовая доля серы, %	0,01–0,4	0,04
Зольность, %	0,05–0,3	0,18
Содержание частиц размером более 1 мм, %	не менее 95	100

ПВС экологически чистое связующее. При температурах коксования (порядка 500 °С) выход кокса составляет порядка 30 %, а летучие вещества – вода, метан и водород [5], в конечном итоге образуют H_2O и CO_2 . ПВС сохраняет адгезионные свойства при многократном нагреве – охлаждении.

Технологическая схема получения карбюризатора из углеродсодержащей пыли включает четыре операции: приготовление раствора ПВС; дозирование, смешение, гранулирование и сушка.

Таким образом, в результате выполненной работы разработана получен гранулированный науглероживатель: малозольный, малосернистый с размерами гранул более 1 мм. Гранулы после отверждения устойчивы в воде даже при кипячении, по показателям качества соответствуют заданным требованиям (табл. 5). Предложена технологическая схема получения.

Библиографический список

1. http://www.lityo.com.ua/elkem_3.html
2. Болховитинов, Н.Ф. Металловедение и термическая обработка / Н.Ф. Болховитинов. – М.: Машиностроение, 1965. – 505 с.
3. Панов, А.Г. К вопросу о выборе науглероживателя при производстве синтетических чугунов / А.Г. Панов, Т.В. Рогожина // Сборник докладов Литейного консилиума № 2. «Теория и практика металлургических процессов при производстве отливок из чёрных сплавов» – Челябинск: Челябинский Дом печати, 2007. – С. 1–5.
4. Шумихин, В.С. Синтетический чугун / В.С. Шумихин, П.П. Лузан, М.В. Желнис. – Киев: Наукова думка, 1971. – 157 с.
5. Сенкевич, С.И. Термопревращения поливинилового спирта / С.И. Сенкевич // ХТТ. – 2007. – № 1. – С. 12–16.

ОСОБЕННОСТИ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ДОМЕННЫХ БЛОКОВ

Н.П. Нонишинева

Проведена оценка влияния добавки карбида кремния и его дисперсного состава на формирование поровой структуры углеродных доменных блоков. Установлено, что введение добавки карбида кремния и уменьшение размера его частиц приводит к уменьшению объема пор более 3 мкм. Создание микропористой структуры доменных блоков способствует увеличению срока службы углеродной футеровки доменной печи.

Ключевые слова: доменные блоки, карбид кремния, пористость, доменная печь, срок службы.

Для футеровки горна и лещади доменной печи, предназначенной для выплавки чугуна из железорудных материалов, применяются углеродные доменные блоки.

При работе доменной печи углеродная футеровка подвергается высоким тепловым нагрузкам, инфильтрации расплава чугуна в поры углеродного материала, абразивному износу.

В результате вышеперечисленных факторов, происходит растрескивание и разрушение углеродных блоков и снижается срок службы доменной печи.

В мировой практике в последние 10–15 лет прослеживается тенденция кардинального изменения основных свойств углеродных огнеупоров, применяемых в конструкции доменных печей. Широкое распространение получило использование в качестве футеровки горна блоков микропористой и супер микропористой структуры.

Эти изменения обусловлены совершенствованием конструкции доменных печей в связи с интенсификацией технологии доменного процесса и увеличением срока службы доменных печных агрегатов.

Из анализа научно-технической литературы [1, 2] известно, что эффективными способами формирования плотной микропористой структуры углеродных блоков являются:

1. Введение специальных керамических добавок стойких к расплаву чугуна и создание плотной упаковки частиц твердого наполнителя.
2. Пропитка блоков каменноугольным пеком.
3. Введение специальных материалов для получения в порах блока кристаллов в виде усов в процессе термической обработки заготовок блоков, в температурном интервале 1150–1500 °С в атмосфере N₂ и СО.

В данной работе рассмотрено влияние добавки карбида кремния разного дисперсного состава на изменение поровой структуры углеродных доменных блоков.

Исследование поровой структуры проводилось на ртутном порозиметре «MIKROMERITICS Avto Pore 9500». Преимущество метода ртутной порозиметрии по сравнению с другими методами (оптической и электронной микроскопии, рентгенографии, адсорбции газов и паров, адсорбции из растворов и т. д.) заключается в том, что он позволяет быстро и более точно получать характеристики пористой структуры вещества [3].

Как показали результаты исследования, добавление в углеродную шихту при производстве доменных блоков карбида кремния позволяет получить поровую структуру, характеризующуюся меньшим объемом крупных пор радиусом 5–30 мкм (рис. 1).

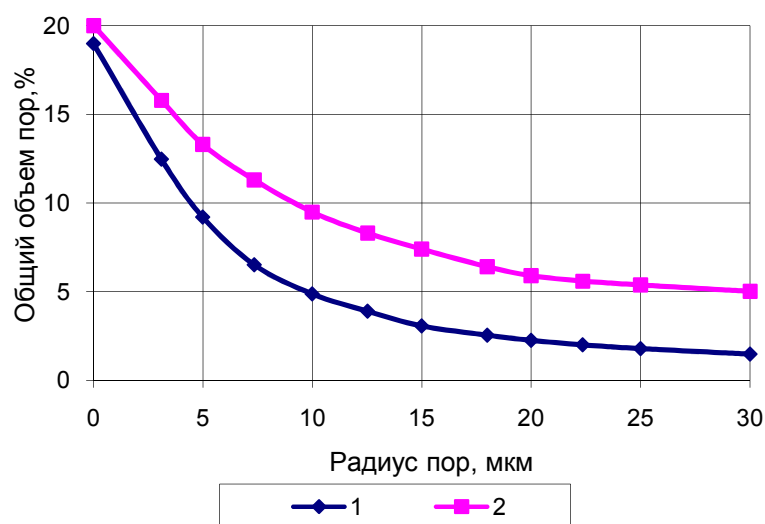


Рис. 1. Интегральные кривые распределения пор по размерам в блоках с добавлением карбида кремния марки ДБУ-2 (1) серийных доменных блоках марки ДБУ-0 без добавления карбида кремния (2)

Уменьшение объема крупных пор в материале предотвращает инфильтрацию чугуна внутрь блоков и разрушение углеродной футеровки.

Кроме того добавка карбида кремния увеличивает химическую стойкость материала, так как при его взаимодействии с расплавом чугуна образуются достаточно прочные силициды, а также повышается стойкость к абразивному износу углеродной футеровки.

Необходимо отметить, что размер частиц твердого наполнителя, в том числе и карбида кремния существенным образом влияют на формирование поровой структуры блоков (рис. 2)

Введение тонкодисперсного карбида кремния (фракция $-0,5+0$ мм) по сравнению с грубодисперсным также приводит к снижению объема крупных пор радиусом более 5–30 мкм. В дальнейшем, введение в исходную шихту еще более тонкодисперсного карбида кремния не даёт положительного результата. Мы считаем, что причиной этого является коагуляция тонкодисперсных частиц вследствие повышения их поверхностной энергии.

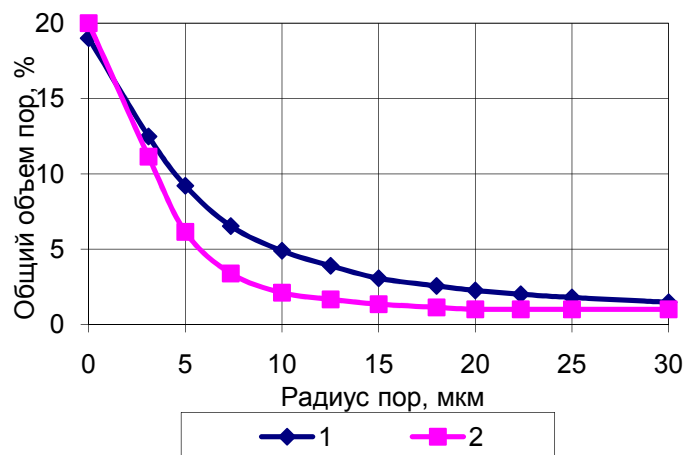


Рис. 2. Интегральные кривые распределения пор по размерам при введении в шихту грубодисперсного (1) и тонкодисперсного (2-ДБУ-2) помола карбида кремния

Использование технологических приемов по введению керамической добавки и изменению гранулометрического состава её частиц позволило разработать и освоить технологии производства новых марок доменных блоков, не уступающих по своим свойствам зарубежным аналогам.

На рис. 3 представлены интегральные кривые распределения пор по размерам в доменных блоках производства японской фирмы NDK (1) и в доменных блоках производства ОАО «ЧЭЗ» ДБУ-2 (2).

При сравнении графиков представленных на рис. 3 видно, что доменные блоки с добавлением тонкодисперсного карбида кремния марки ДБУ-2 по содержанию крупных пор 5–15 мм близки к зарубежному аналогу производства японской фирмы NDK.

В условиях термической нагрузки при эксплуатации доменных блоков, термостойкость материала определяется комплексом его физико механических и теплофизических свойств, важнейшими из которых являются механическая прочность на изгиб, теплопроводность, термический коэффициент линейного расширения.

Результаты исследований показали, что физико-механические характеристики доменных блоков с добавкой тонкодисперсного карбида кремния марки ДБУ-2 также не уступают зарубежному аналогу (см. таблицу).

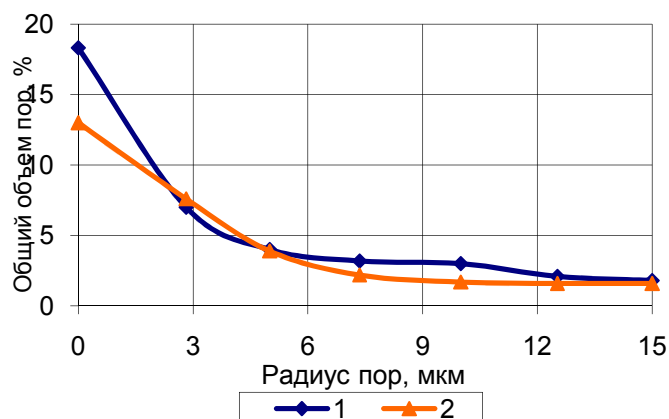


Рис. 3. Интегральные кривые распределения пор по размерам в доменных блоках фирмы NDK (1) и отечественных доменных блоках ДБУ-2 (2)

Физико механические свойства доменных блоков

№ п/п	Наименование показателей	Един. изм.	ДБУ-0	ДБУ-2	NDK
1	Плотность кажущаяся	г/см ³	1,50	1,55	1,55
2	Плотность истинная	г/см ³	1,80	1,85	1,92
3	Пористость общая	%	18	16	18
4	Пористость открытая	%	17	14	15
5	Прочность на сжатие	МПа	37	50	41,2
6	Прочность на изгиб	МПа	8	15	11,8
7	Теплопроводность при 200 °С	Вт/м·К	7	11	11,5
8	ТКЛР (20–520°С)×10 ⁻⁶	К ⁻¹	3,6	3,6	3,3

Использование при футеровке углеродных микропористых блоков позволяет увеличить на несколько лет продолжительность службы доменной печи без капитального ремонта.

Библиографический список

1. Пат. Япония №1207373. Carbon bloks for the furnace hearth / Shigeri Fujihara, Shinichi Tamura, Takahiro Fukuda, Tsunemi Ochiai. – Заявл. 10.08.1978, опубл. 18.05. 1980.
2. Подкопаев, С.А. Углеродные огнеупоры для футеровки горна и лещади доменной печи / С.А. Подкопаев // Новые огнеупоры. – 2003. – № 2. – С. 14.
3. Деев, А.Н. О формировании пористой структуры углеграфитовых материалов / Г.Н. Багров, Т.В. Лукина // Конструкционные углеродные материалы: сб. науч. тр. – М.: Металлургия, 1967. – С. 14–19.

МОДИФИЦИРОВАНИЕ ПОЛИМЕРАМИ НЕФТЯНЫХ ДОРОЖНЫХ БИТУМОВ

К.Р. Смолякова, А.И. Бердимухамедова

Научно-исследовательская работа проведена с целью улучшения товарных качеств нефтяных дорожных битумов за счет их модификации бутадиен-стирольными термоэластопластами и полимеробразующим отходом коксохимических производств (кислой смолкой). Определена рецептура битумных смесей, позволяющая расширить температурный диапазон эксплуатации покрытий и обеспечить их стойкость к старению за счет повышения пластичности, эластичности, морозостойкости, теплостойкости и улучшения сцепления смеси с кислыми минеральными материалами.

Ключевые слова: битум нефтяной дорожный (БНД), полимерно-битумные вяжущие материалы (ПБВ), гудрон, полимер, кислая смолка.

Актуальность работы обоснована необходимостью решения одной из основных задач по предотвращению причин преждевременного разрушения дорожных, мостовых и аэродромных асфальтобетонных покрытий в условиях изменчивого климата России. Недостаточная трещиностойкость и эластичность покрытий приводит к неоправданно высоким затратам на ремонты, а, следовательно, сдерживает развитие сети автомобильных дорог в России с твердым покрытием. Решение поставленной задачи требует разработки и внедрения в практику дорожного строительства битумов улучшенного качества за счет применения полимерных модификаторов, способных обеспечивать более высокую прочность, эластичность и долговечность дорожных покрытий [1–3].

Научно-исследовательская работа посвящена возможности получения высококачественных дорожных битумов за счет их модификации полимерами «Calprene 501» и «Calprene 411» фирмы Dynasol (Испания), а так же полимеробразующими отходами в виде кислой смолки ООО «Мечел-Кокс» Цеха улавливания № 1 (г. Челябинск), и является продолжением исследований, описанных ранее [3]. Исследования проводили на базе лаборатории филиала «Битумный завод» ОГУП «ЧЕЛЯБИНСКАВТОДОР» (п. Вахрушево, Челябинская область) и на базе лаборатории кафедры химической технологии ФГБОУ ВПО «ЮУрГУ» (НИУ) (г. Челябинск).

Синтезированные битумные смеси включали следующие компоненты: битум марки БНД 90/130 – в качестве вяжущего вещества; гудрон марки СДБ 20/40 – в качестве пластификатора; полимер «Calprene-501» «Calprene-411» и на основе бутадиен-стирола 69/31 – в качестве полимер-

ной составляющей; кислую смолку – в качестве наполнителя и адгезионной добавки.

Образцы полимерно-модифицированных битумов готовили по разработанной методике: компоненты (битум и гудрон), разогретые до температуры 100...120 °С, смешивали в заданном соотношении до получения однородной массы в течение 15 минут, затем в нефтяную основу при постоянном перемешивании небольшими порциями вносили заданное количество полимера. После полного растворения полимера в пластификаторе дополнительно вводили наполнитель – кислую смолку. Определение однородности и дальнейшие испытания ПБВ проводили в соответствии с требованиями ГОСТ Р 52056-03.

Для исследования физико-механических свойств образцов использовали методы, описанные в работе [3], а также метод определения сцепления битума с мрамором и песком (ГОСТ 11508-74) и метод определения температуры вспышки (ГОСТ 4333-87).

По результатам физико-механических показателей определили марку ПБВ согласно ГОСТ Р 52056-2003 (табл. 1).

Оптимальными свойствами, сочетающими наименьшую стоимость и требуемое товарное качество, обладает образец, изготовленный по рецепту № 5. Вероятно, именно сбалансированное содержание пластификатора и полимера в растворе (15 % гудрона и 3 % полимера) определило высокие показатели теплостойкости (+68 °С), эластичности (89 % при 25 °С и 77 % при 0 °С), устойчивости к старению (5 °С), и морозостойкости (–24 °С). Интервал работоспособности у синтезированных нами ПБВ колеблется в пределах 92 °С (у немодифицированного БНД 90/130 интервал соответствует 70 °С), соответственно синтезированные ПБВ можно применять при более жестких погодных условиях и больших нагрузках. Высокая растяжимость синтезированных ПБВ вероятно позволит тщательнее заполнять трещины на поверхности дороги.

Проведено сравнение свойств ПБВ на основе «Calprene-501» со смесями, содержащими его аналоги: «Calprene-411» – испанский полимер, отличающийся от предыдущего типом структуры; «Кратон D1101» – полимер немецкого производства и «БНД 90/130» – образец, получаемый на битумном заводе ОГУП «Челябинскавтодор». Все полимеры являются высококачественными термопластичными эластомерами типа стирол-бутадиен-стирол. Результаты сравнения представлены в табл. 2.

ПБВ, полученные на основе модификаторов марок «Kraton» и «Calprene», действуют особенно эффективно при концентрации на уровне 3% по массе, значительно повышая термостойкость, дуктильность и эластичность продукта, а так как данные полимеры выпускают в промышленности в виде крошки с малой фракцией частиц, то это позволяет растворить полимер в битуме за короткий промежуток времени.

Таблица 1

Физико-механические показатели синтезированных ПБВ

Наименование показателей, единицы измерения		Номер образца				
		1	2	3	4	5
		Рецепт образца				
		С 501-2,0%, БНД 90/130-98,0%	С 501-3,0%, БНД 90/130-97,0%	С 501-3,0%, Гудрон 20/40-5%, БНД 90/130-92,0%	С 501-3,0%, Гудрон 20/40-10%, БНД 90/130-87,0%	С 501-3,0%, Гудрон 20/40-15%, БНД 90/130-82,0%
Глубина проникания иглы, 0,1 мм	при 25 °С	63	62	67	72	78
	при 0 °С	28	28	35	33	32
Температура размягчения, °С		56	58	71	69	68
Растяжимость, см	при 25 °С	55	84	92	58	69
	при 0 °С	17	19	18	28	32
Эластичность, %	при 25 °С	83	68	87	88	89
	при 0 °С	58	65	71	75	77
Изменение температуры размягчения после прогрева, °С		8	8	5	5	5
Температура хрупкости, °С		-26	-28	-21	-22	-24
Температура вспышки, °С		>270	268	>270	>270	276
Марка ПБВ (соответствие ГОСТ Р 52056-03)		Не соотв.	Не соотв.	ПБВ 60	ПБВ 60	ПБВ 60

Проведены исследования на сцепление образцов при добавлении кислой смолки: выявлено улучшение адгезионных свойств битума при сцеплении с гранитом – кислой породой, сцепление с которой битумных смесей изначально затруднено. Добавляя кислую смолку в количестве 10 % к БНД, получены отличные результаты – полное покрытие минерального материала, как с мрамором, так и с гранитом. Также хороший результат по сцеплению показал образец, имеющий в своем составе помимо кислой смолки и полимер в количестве 3 %.

Таблица 2

Характеристики ПБВ, полученных на основе
компаундированного битума БНД 90/130

Наименование полимера	Концентрация полимера, мас. %	Физико-механические показатели								Соответствующая марка битума
		Температура размягчения, °С	Глубина проникания иглы, 0,1мм		Растяжимость, см		Эластичность, %		Температура хрупкости, °С	
			при 25 °С	при 0 °С	при 25 °С	при 0 °С	при 25 °С	при 0 °С		
Без поли- мера	0	45	114	33	90	5,3	–	–	-20	БНД 90/130
Kraton D1101	3	66,0	105	62	63	86	93	75	-42	ПБВ 90
Calprene- 501	3	68,0	78	32	69	32	89	77	-24	ПБВ 60
Calprene- 441	3	71,5	70	35	81	31	86	70	-21	ПБВ 60

Таким образом, добавка представленных термоэластопластов и наполнителя в виде кислой смолки в битумные композиции позволяет повысить качество полимерно-битумных вяжущих веществ и обеспечить требования нормативно технической документации Федеральной дорожной службы России.

Библиографический список

1. Аминов, Ш.Х. Современные битумные вяжущие и асфальтобетоны на их основе / Ш.Х. Аминов. – СПб.: ООО «Недра», 2007. – 336 с.
2. Влияние пластификаторов на адгезию битумполимерных систем / С.В. Дезорцев, М.Ю. Доломатов, Н.Г. Будрина и др. // Пластические массы. Научно-технический журнал. – 2008. – Вып. 2. – № 8. – С. 40–42.
3. Зиганшина, К.Р. Изучение влияния полимерных добавок на товарные свойства дорожных битумов / К.Р. Зиганшина, Д.В. Белоусов, Е.В. Сидорова // Наука ЮУрГУ: материалы 62-й научной конференции. Секции естественных наук. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2010. – С. 173–176.

К ВОПРОСУ О НОРМАТИВНО-ПРАВОВЫХ И ИНСТИТУЦИОНАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ ИНТЕРНАЛИЗАЦИИ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ЭКСТЕРНАЛИЙ

В.Р. Гофман

Несоответствие законов рынка объективным законам природы приводит к сбоям в рыночных механизмах. Регулирование внешних экологических воздействий, обуславливающих возникновение экстернальных издержек, затруднено по причине рассогласования интересов бизнеса и интенсивно растущих экономических потребностей общества, с одной стороны, с другой – возможностей природы, ограниченных ассимиляционным потенциалом. Наблюдаемая прогрессивная тенденция перехода мирового сообщества к развитию, базирующемуся на научных парадигмах «зеленой экономики» и «низкоуглеродной экономики», свидетельствует об актуальности адекватного решения проблемы интернализации экологических экстерналий.

Ключевые слова: экономика, экологические экстерналии, интернализация, институциональные условия.

На современном этапе мирового экономического развития существенно обострились противоречия между неограниченным ростом потребностей субъектов экономики и ограниченной способностью природно-ресурсного потенциала. Экологические экстерналии принято рассматривать как эколого-экономические последствия, преимущественно негативные, производственной деятельности хозяйствующего субъекта, которые этим субъектом во внимание не принимаются. Поскольку в рассматриваемом случае затраты на устранение производимых загрязнений в себестоимости продукции отсутствуют, средства на ликвидацию возникающего эколого-экономического ущерба, на компенсацию изменения величины ассимиляционного потенциала окружающей среды, экологической емкости территории вынуждены изыскивать население, другие хозяйствующие субъекты [1].

Оценка экстернальных издержек в стоимостной форме – сложнейшая экономическая задача, тесно связанная с методологическими трудностями стоимостной оценки природных ресурсов и расчета на этой основе экономической величины экологического ущерба [2]. Отсутствие механизма адекватного учета реальной величины экстернальных издержек в рыночной цене продукта делает ее существенно заниженной в сравнении с фактическими общественными издержками. Перевод внешних экстернальных издержек во внутренние издержки хозяйствующего субъекта (интернализация) предполагает включение их в себестоимость и, следовательно, в це-

ну готовой продукции, что в рыночных условиях делает последнюю при прочих равных условиях менее конкурентоспособной и дает возможность более полно реализовать фундаментальный принцип экономики природопользования «загрязнитель платит». Наличие внешних экологических эффектов свидетельствует об экономической неэффективности.

Наиболее известными методологическими подходами к решению проблемы интернализации экологических экстерналий эффектов являются решения, предложенные Р. Коузом (R.H. Coase) и А. Пигу (A.C Pigou) [3]. Основная идея Р. Коуза заключается в интернализации экологических экстерналий посредством прямых рыночных переговоров по компенсации ущерба, вызываемого загрязнением окружающей природной среды, в то время как предложение А. Пигу состоит в том, чтобы государство воздействовало на причинителя отрицательных внешних экологических эффектов посредством налогов, а на причинителя положительных внешних эффектов – посредством дотаций (субвенций), отрицательных налогов, которые должны быть определены в таком размере, чтобы причинитель осуществлял свою деятельность в собственных интересах на Парето-оптимальном уровне, то есть ставка налога должна соответствовать внешним предельным затратам, возникающим при социально-оптимальной ситуации.

В настоящее время основными средствами регулирования внешних эффектов являются фискальные инструменты. Вместе с тем, как показывает практика, современное общество нуждается не только в способах устранения негативных экологических экстерналий, но и в механизмах их предотвращения, которые не могут быть достигнуты только фискальными методами, направленными, как правило, на борьбу со следствием. Возможности совершенствования инструментов интернализации внешних эффектов в значительной степени определяются эффективностью институциональной системы, а успешность процесса управления внешними эффектами, возникающими в сфере природопользования – «качеством» институциональной среды [4]. В связи с этим интернализация экологических внешних эффектов должна осуществляться с использованием институциональных методов, ориентированных на предупреждение негативного техногенного воздействия. Создание эффективной системы экологического управления является важнейшим институциональным условием, способствующим деятельности по интернализации внешних эффектов.

Наличие неторгуемых и неоцениваемых благ, а также антиблаг приводит к расхождению оценок реального распределения ресурсов с эффективным гипотетическим распределением, которое сложилось бы на идеальном конкурентном рынке. В этой связи эколого-экономическое регулирование следует рассматривать как комплекс правовых, административных и экономических мер, определяющих систему правил ведения различных видов антропогенной деятельности, устанавливаемых по экологическим и соци-

альным соображениям, и санкций за их несоблюдение, направленных на искусственное создание недостающих в результате провалов рынка обратных связей. В процессе интернализации издержки воздействия на окружающую среду включаются в оценку экономического результата конкретного вида деятельности. Таким образом, любая деятельность, воздействующая на природную среду, подлежит государственному экологическому регулированию, а эффективность регулирования можно оценить на основе полноты интернализации внешних экологических эффектов [5].

Административные меры регулирования являются в настоящее время доминирующими во многих странах мира [6]. Наделение государства правом собственности на важнейшие объекты природной среды сводит к минимуму транзакционные издержки. Государство – наиболее информированный и влиятельный субъект в системе взаимодействия экономики с природой, способное в своей политике отражать не только текущие, но и перспективные национальные интересы, в том числе интересы будущих поколений. Как собственник государство имеет возможность наложить запрет на выброс опасных загрязняющих веществ и предотвратить экологический ущерб в силу того, что методы прямого государственного вмешательства ориентированы на определение общественно-необходимых и экономически оправданных затрат для общества в целом.

В значительной мере за возникновение экологических проблем ответственна экологическая культура, так как развитие культуры как способа внегенетической передачи информации тесно связано с процессом становления человеческого общества [7]. В этой связи государственная политика в сфере деятельности по формированию экологической культуры должна быть направлена на совершенствование системы экологического образования и воспитания, экологизацию культуры быта населения и информационного пространства, на повышение уровня экологической культуры в экономической, социальной, политической и духовной сферах жизни общества, на активное экологическое просвещение населения средствами массовой коммуникации.

Экологизацию потребления, направленную на создание устойчивого стиля жизни (*sustainable lifestyle*), провозглашенного на Конференции ООН по окружающей среде и развитию в Рио-де-Жанейро (1992.) и способствующую интернализации экологических внешних эффектов, правомерно рассматривать в качестве институционального инструмента интернализации, которая может быть реализована путем предпочтения долговечных товаров, совместного использования товаров, предпочтения товаров, не требующих перевозок на большие расстояния, отказа от излишних услуг, минимизации твердых бытовых отходов, предпочтения «экологически чистых» товаров; рационализации потребления энергии и др. [4].

Следует ожидать, что, будучи экологически осведомленным, потребитель откажется приобретать не только продукцию, не соответствующую действующим экологическим стандартам, но и продукцию тех предприятий, где превышает установленный допустимый уровень загрязнения окружающей среды в процессе производства. Следовательно, через «желание платить» могут быть в известной мере реализованы гражданами их конституционные права на благоприятную окружающую среду, а предприятие будет вынуждено интернализировать отрицательные внешние эффекты своей производственной деятельности за счет внедрения в производство ресурсосберегающих технологий, других прогрессивных экологоориентированных технических решений.

Как видно, в реально существующих рыночных условиях успешное практическое решение проблемы адекватной интернализации отрицательных экологических экстерналий не может быть эффективно реализовано без определяющего государственного вмешательства при безусловном активном участии экологически грамотного населения, создания нормативно-правовых и институциональных условий, обеспечивающих экономическую заинтересованность хозяйствующих субъектов в повсеместном внедрении интегрированных систем менеджмента качества ISO 9000, экологического менеджмента ISO 14000, менеджмента профессиональной безопасности и здоровья ISO 18000. При этом должны применяться институциональные методы, ориентированные, преимущественно, и прежде всего, на предупреждение негативного техногенного воздействия.

Библиографический список

1. Гофман, В.Р. Экологические и социальные аспекты экономики природопользования: учебное пособие / В.Р. Гофман. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2001. – 631 с.
2. Гофман, В.Р. Экономика природопользования / В.Р. Гофман. – Челябинск: Издательский Центр ЮУрГУ, 2009. – 101 с.
3. Пахомова, Н.В. Экологический менеджмент / Н.В. Пахомова, А. Эндрес, К. Рихтер. – СПб.: Питер, 2003. – 544 с.
4. Овчинникова, Н.В. Экономические основы интернализации внешних эффектов в природопользовании: автореф. дис. ... д-ра экон. наук / Н.В. Овчинникова. – СПб.: Изд-во гос университета экономики и финансов, 2007. – 39 с.
5. Ховавко, И.Ю. Интернализация внешних эффектов от загрязнения окружающей среды в РФ: автореф. дис. ... д-ра экон. наук. – М.: Изд-во МГУ, 2012. – 45 с.
6. http://www.lib.csu.ru/texts/diss/ChernyavskayaNV_ar.pdf.
7. О Концепции по формированию экологической культуры населения Челябинской области до 2025 года. Постановление Правительства Челябинской области от 20 февраля 2013 г. N 23-П.

АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ЗДОРОВЬЕСБЕРЕЖЕНИЯ СТУДЕНТОВ ЧЕЛЯБИНСКИХ ВУЗОВ

И.В. Машкова, М.А. Попкова

В статье представлены результаты исследования сердечно-сосудистой системы студентов высших учебных заведений.

Ключевые слова: здоровье, сердечно-сосудистая система, СОК, МОК, АДс, АДд

Здоровье является не только достоянием отдельно взятого человека, но и всего общества в целом. Согласно формулировке ВОЗ "Здоровье-это состояние полного физического, душевного и социального благополучия, а не только отсутствие болезней и физических недостатков». В настоящее время существует множество определений понятия-здоровья.

С медицинской точки зрения, здоровье определяется как состояние организма человека, когда функции всех его органов и систем уравновешены с внешней средой и отсутствуют какие-то болезненные изменения [3].

С социальной точки зрения, здоровье отражает уровень развития общества. Капица П.Л. (1981) тесно связывает здоровье с «качеством» людей данного общества, о котором можно судить по продолжительности жизни, сокращению заболеваний, преступности и наркомании.

С экологической точки зрения, здоровье рассматривается как отношения с окружающей средой. Аршавский И.А. (1980) подчеркивает, что организм на протяжении своего развития не находится в состоянии равновесия или уравновешенности с окружающей средой.

Термин «психологическое здоровье» встречается не часто. Но в тех случаях, когда человека нельзя однозначно назвать ни здоровым, ни больным, целесообразнее использовать термин «психологическое здоровье» для оценивания состояния здоровья. Под психическим здоровьем следует понимать физиологически обусловленное течение психически обусловленных процессов, определяющие в конечном итоге высокий уровень его соматического здоровья и социально оправданное поведение [4].

По академику В.П.Казначееву, общественное здоровье – это процесс, который гарантирует сейчас не инволюцию, а прогрессивное изменение и эволюцию в новых экологических условиях.

Здоровье студентов, также как и здоровье населения в целом отражает особенности адаптации к условиям окружающей среды. Поэтому проблема здоровьесбережения напрямую связана с образом жизни учащейся молодежи.

Особенно в сложном положении оказываются студенты начальных курсов. В юношеском возрасте по сравнению со взрослыми людьми обнаруживаются существенные отличия в функционировании высшей нервной деятельности. У учащейся молодежи сохраняется преобладание процессов возбуждения над процессами торможения, поэтому студенты по сравнению со взрослыми являются более эмоциональными. Для успешного обучения они вынуждены мобилизовать резервы организма за счет дополнительного волевого напряжения.

В образовательном процессе отсутствует учет индивидуально-типологических особенностей учащейся молодежи. В процессе учебы предлагаются одинаковые задания и способы их выполнения без учета типов темперамента. Несовершенство образовательного процесса проявляется в построении расписания учебных занятий без учета физиологически обоснованной динамики умственной работоспособности в течении учебной недели и учебного дня. Студенты сталкиваются с непривычными методами и формами обучения, новыми эмоциональными переживаниями, у них меняется режим труда и отдыха, сна [4, 7, 8].

К отрицательным на наш взгляд факторам, оказывающим влияние на состояние сердечно-сосудистой системы, относятся многочисленные тестирования и проверочные работы, подавляющая часть которых приходится на период аттестации и в предсессионный период.

В период адаптации к учебной деятельности в вузе на срыв адаптационных механизмов указывает значительное увеличение распространенности нервно-психических расстройств, являющихся основной из причин отчисления учащихся из высшего учебного заведения, предоставления им академических отпусков.

Согласно теории адаптации сердечно-сосудистая система является индикатором адаптивных возможностей всего организма, поэтому показатели сердечно-сосудистой системы рассматриваются как основные при оценке уровня здоровья. Чаще всего измеряют частоту сердечных сокращений (ЧСС) и артериальное давление крови (АД) в покое и после выполнения стандартной физической нагрузки [1; 5].

Нами были проведены исследования студентов ЮУрГУ, УралГУФК (не спортивные специальности). Респондентами были девушки в возрасте от 17 до 19 лет. Все исследования проводились в начале учебного года и в сессионный период.

Оценка состояния сердечно-сосудистой системы была проведена с использованием общепринятых методик.

Стресс является необходимым компонентом эффективного приспособления организма молодежи к условиям обучения, однако эта полезная реакция вследствие чрезмерного по величине психосоциального воздействия

может перейти при определенных условиях в патологическую и привести к ухудшению функционального состояния организма.

Во время экзаменационной сессии было установлено увеличение показателя минутного объема крови (МОК) на 25 % и систолического объема крови (СОК) на 24 % у студенток ЮУрГУ, у студенток УралГУФК увеличение МОК на 20 % и снижение СОК на 22 %. Увеличение МОК происходит за счет учащения ЧСС и СО. Если величина эмоционального напряжения будет значительной и постоянной, то сердце будет работать в усиленном режиме, за счет увеличения частоты ЧСС и уменьшения продолжительности общей паузы сердца, что в свою очередь может привести к хроническим заболеваниям. Мы считаем, что снижение СОК было связано с повышением нагрузки на сердечно-сосудистую систему.

Минутный объем крови (МОК) является интегральным показателем приспособительных реакций организма. В наших исследованиях показатель МОК увеличен по сравнению с нормой у всех студенток. Особенно значительное увеличение у студенток ЮУрГУ, что на наш взгляд связано с возрастанием роли симпатического отдела вегетативной нервной системы при психоэмоциональном напряжении и процессе адаптации.

Несмотря на то, что артериальное давление (АД) величина довольно стабильная, она может колебаться вследствие изменения функционального состояния организма. В нашем исследовании у студенток ЮУрГУ прослеживалось незначительное, но стабильное увеличение систолического давления (АДс) на 4% в сессию – от $115,4 \pm 5,2$ мм рт.ст. в начале учебного года до $119,0 \pm 4,2$ мм рт.ст. во время экзаменационной сессии. Диастолическое давление (АДд) в экзаменационную сессию увеличивалось на 13% и составила в начале учебного года $65,3 \pm 3,3$ мм рт. ст. и в сессию $80,2 \pm 3,3$ мм рт. ст. Мы считаем, что это связано с психоэмоциональным напряжением.

У студенток УралГУФК прослеживалось значительное увеличение систолического давления (АДс) на 14 % в экзаменационную сессию – от $110,4 \pm 3,5$ мм рт. ст. в начале учебного года до $124,4 \pm 4,2$ мм рт. ст. во время экзаменационной сессии. Диастолическое давление (АДд) в сессию увеличилась на 18% – от $61,2 \pm 2,1$ мм рт. ст. в начале учебного года до $79,3 \pm 2,4$ мм рт. ст. в сессию. Мы считаем, что увеличение артериального давления связано с постоянно возрастающей учебной нагрузкой у студентов. В данном случае учебная нагрузка является фактором тревожности, который приводит к увеличению артериального давления.

Сердце является чувствительным индикатором всех происходящих в организме событий. Сила сокращений, ритм, регулируемые через симпатический и парасимпатический отделы вегетативной нервной системы, очень чутко реагируют на любые стрессорные воздействия.

ЧСС (частота сердечных сокращений) – важнейшая физиологическая характеристика резервов здоровья человека. На основании проведенных исследований мы пришли к выводу, что показатели ЧСС изменяются во время экзаменационного периода по сравнению с учебным периодом. Нами было отмечено увеличение частоты сердечных сокращений в зимнюю сессию у студенток ЮУрГУ на 20 %, у студенток УралГУФК на 45 %, что может быть связано с увеличением психоэмоционального напряжения на сердечно-сосудистую систему.

Адаптация студентов к обучению в вузе является актуальной современной проблемой, требующей внимания широкого круга специалистов. Таким образом, полученные результаты указывают на определенную степень адаптации организма студенток ЮУрГУ и УралГУФК к учебной нагрузке. Мы предполагаем что, на данном этапе обучения адаптация осуществлялась ценой значительного напряжения сердечно-сосудистой системы.

Библиографический список

1. Агаджанян, Н.А. Физиология человека: учеб. пособие / Н.А. Агаджанян. – Н. Новгород: НГМА, 2001. – 320 с.
2. Аршавский, И.А. Особенности стресса и адаптации в разные возрастные периоды / И.А. Аршавский // Нервные и эндокринные механизмы стресса. – Кishинев: ШГИИИ, 1980. – С. 3–24.
3. Брехман, И.И. Валеология наука о здоровье / И.И. Брехман. – 2-е изд. – М.: Физкультура и спорт, 1993. – 206 с.
4. Вайнер, Э.Н. Валеология: учеб.практикум / Э.Н. Вайнер, Е.В. Волынская. – М.: Флинта: Наука, 2002. – 312 с.
5. Гора, Е.П. Экология человека: учеб. пособие / Е.П. Гора. – М.: Дрофа, 2007. – 245 с.
6. Капица, П.Л. Эксперимент, теория, практика / П.Л. Капица // Статьи, выступления. – 3-е изд., доп. – М.: Наука, 1981. – 495 с.
7. Лисицын, Ю.П. Слово о здоровье / Ю.П. Лисицын. – М.: Академия, 1986. – 192 с.
8. Прогнозирование развития психических заболеваний в регионе / Е.С. Березина, Е.Н. Коровин, О.В. Родионов, О.Ю. Ширяев // Интеллектуальные информационные системы: тр. Всерос. конф. – Воронеж, 2003. – С. 159–160.

ЗАВИСИМОСТЬ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ОКСИГИДРАТА НИОБИЯ ОТ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

О.В. Ракова, Т.Г. Крупнова

Изучено влияние электромагнитных полей на сорбционные свойства оксигидратных гелей ниобия. Найдено, что под действием электромагнитного излучения происходит увеличение сорбционной емкости образцов в первые сутки после снятия данного воздействия.

Ключевые слова: оксигидратные гели ниобия, электромагнитное излучение, изотермы сорбции.

Гели оксигидратов тяжелых металлов не являются традиционными сорбционными материалами, но могут представлять интерес в качестве сорбционных материалов для очистки технологических растворов на соответствующих производствах от примесей редкоземельных элементов. Исследования оксигидратных гелей иттрия, циркония, лантана показали наличие влияния магнитных и электрических полей на реологические, оптические и сорбционные свойства данных гелей [1–3]. В настоящей работе представлены результаты исследований влияния электромагнитного излучения на сорбционные свойства оксигидратов ниобия.

Гели синтезировали методом осаждения в реакторе объемом 5 л из растворов солянокислых солей ниобия раствором гидроксида натрия (1М), контролируя рН раствора с помощью рН-метра (рН синтеза варьировался от 2,0 до 4,0 с интервалом 0,5 ед.). В работе применяли реактивы квалификации «х. ч.» и «ч. д. а.». Для созревания осадка гели выдерживали при комнатной температуре в течение 24 часов. Отделяли осадок, декантируя маточный раствор. Оставшееся количество осадка фильтровали через фильтр «синяя» лента. Сушили осадки при влажности 80 %, обеспечивая медленное высыхание, в течение трех-шести месяцев. Полученные ксерогели механически гранулировали, пропуская через сита $d = 1,0$ мм и 0,3 мм. Время воздействия электромагнитного поля на воздушно-сухие образцы составляло 4 часа. В качестве сорбата использовались растворы нитрата гадолиния.

Проведенные исследования показали периодичный колебательный характер кривых изменения сорбционных свойств на образцах гелей оксигидратов ниобия, что хорошо согласуется с литературными данными. Все параметры синтеза гелей, определяющие его структуру: температура синтеза, концентрация соли, рН синтеза – влияют на величину адсорбции

ионов гадолиния. В таблице представлены данные для построения изотерм сорбции в статических условиях на образцах оксигидратных гелей ниобия.

Влияние параметров синтеза оксигидратных гелей ниобия
на сорбционную емкость

$C_{\text{рав}} \cdot 10^{-2}$, ММоль/л	1,02	2,01	3,03	4,2	5,01	6,33	7,47	8,5	9,35	10,01
pH=2,0; n=0,07										
Г, ммоль/г	0,07	0,12	0,15	0,16	0,23	0,26	0,20	0,19	0,22	0,23
pH=2,5; n=0,07										
Г, ммоль/г	0,05	0,09	0,06	0,15	0,06	0,12	0,13	0,18	0,26	0,12
pH=3,0; n=0,07										
Г, ммоль/г	0,11	0,08	0,019	0,22	0,14	0,26	0,20	0,13	0,16	0,14
pH=3,5; n=0,07										
Г, ммоль/г	0,25	0,02	0,15	0,11	0,18	0,07	0,14	0,18	0,58	0,62
pH=4,0; n=0,07										
Г, ммоль/г	0,07	0,12	0,13	0,12	0,14	0,15	0,14	0,09	0,09	0,12
pH=2,0; n=0,09										
Г, ммоль/г	0,04	0,15	0,22	0,14	0,08	0,11	0,34	0,41	0,13	0,48
pH=2,5; n=0,09										
Г, ммоль/г	0,01	0,02	0,05	0,05	0,01	0,02	0,03	0,049	0,048	0,085
pH=3,0; n=0,09										
Г, ммоль/г	0,18	0,17	0,10	0,19	0,17	0,26	0,17	0,14	0,24	0,19
pH=3,5; n=0,09										
Г, ммоль/г	0,02	0,07	0,11	0,12	0,01	0,03	0,06	0,49	0,68	0,67
pH=4,0; n=0,09										
Г, ммоль/г	0,09	0,11	0,24	0,34	0,21	0,24	0,12	0,14	0,17	0,75

Из таблицы видно, что максимальная величина адсорбции в зависимости от параметров синтеза (pH, n) может изменяться в пределах от 0,15 ммоль/г до 0,75 ммоль/г. В работе установлено, что воздействуя на сорбционно инактивные образцы электромагнитным излучением, можно модифицировать оксигидратные гели таким образом, что их сорбционная емкость по отношению к ионам редкоземельных элементов резко увеличивается. После воздействия на образец геля в течение 4 часов электромаг-

нитным излучением наблюдалось общее увеличение максимального значения сорбируемости практически для всех образцов, синтезированных при различных условиях. Уменьшение и увеличение времени воздействия (до 1 часа и 8 часов, соответственно) приводит к незначительным изменениям сорбционной емкости образцов.

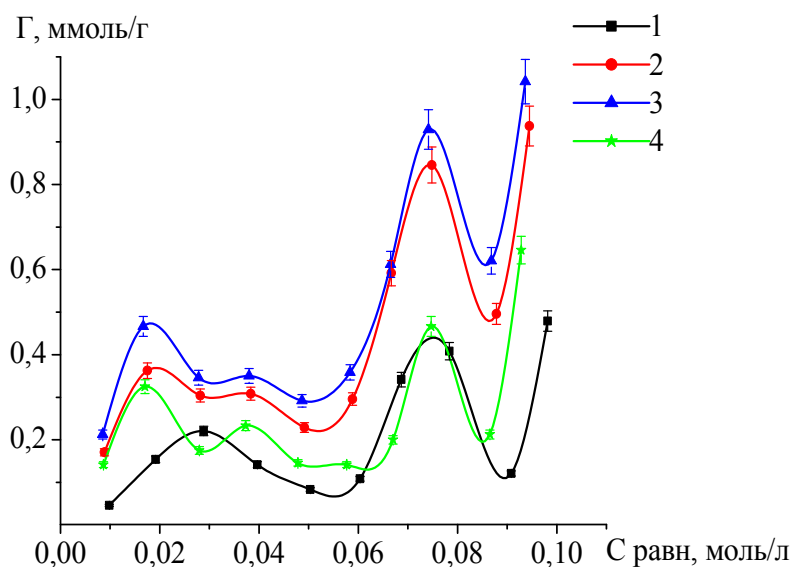


Рис. 1. Изотерма сорбции в статистическом режиме для оксигидратных гелей ниобия ($\text{pH} = 2$; $n = 0,09$): 1 – до э/м излучения; 2 – сразу после излучения; 3 – через сутки после излучения; 4 – через 10 дней после излучения

Для того, чтобы проследить, как изменяется сорбционная емкость образцов со временем, были изучены изотермы сорбции сразу после снятия электромагнитного поля, через сутки и через 10 дней после воздействия. Результаты исследований показали, что наибольшую сорбционную емкость образцы имеют через сутки после воздействия на них электромагнитного излучения, затем она начинает снижаться (рис. 1, 2).

Влияние электромагнитного поля на сорбционную активность образцов можно объяснить перестройками полимерной матрицы геля. Количество сорбционных центров при этом существенно меняется, что приводит к изменению величины сорбции. В оксигидратных системах в качестве сорбционных центров выступают молекулы координированной воды, ол- и концевые гидроксо-группы [2, 4]. При наложении внешнего электромагнитного поля, по-видимому, происходит формирование упорядоченных областей, доступность сорбционных центров возрастает, мы наблюдаем увеличение сорбционной емкости образцов. Такое поведение гелевой фазы является обратимым и при снятии внешнего поля через некоторое время (в нашем случае – через 10 дней) гель возвращается в первоначальное состояние.

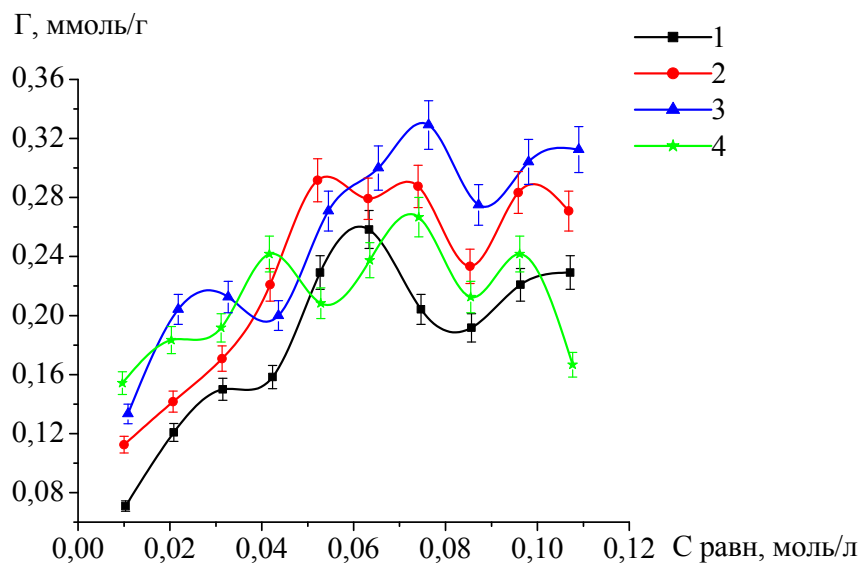


Рис. 2. Изотерма сорбции в статистическом режиме для оксигидратных гелей ниобия (рН = 2; $n = 0,07$): 1 – до э/м излучения; 2 – сразу после излучения; 3 – через сутки после излучения; 4 – через 10 дней после излучения

Таким образом, можно отметить положительное влияние электромагнитного излучения на сорбционные свойства оксигидратных гелей ниобия. Необходимы дальнейшие исследования по увеличению времени, в течение которого образцы обладают максимальной сорбционной емкостью.

Библиографический список

1. Авдин, В.В. Влияние электромагнитного излучения на сорбционные свойства оксигидратов иттрия / В.В. Авдин, Ю.И. Сухарев // Известия Челябинского научного центра УрО РАН, 2002. – № 4. – С. 109–113.
2. Сухарев, Ю.И. Влияние магнитного и электрического полей на структурирование гелей оксигидрата иттрия / Ю.И. Сухарев, Е.П. Юдина, Т.Г. Крупнова // Известия Челябинского научного центра УрО РАН, 2003. – № 3. – С. 76–84.
3. Авдин, В.В. Влияние излучения видимого и ультрафиолетового диапазона на сорбционные и термолитические характеристики оксигидратов циркония, иттрия и лантана / В.В. Авдин, А.В. Батист, А.А. Лымарь // Сорбционные и хроматографические процессы, 2006. – Т.6. – С. 1104.
4. Сухарев, Ю.И. Природа формообразования гелей оксигидрата ниобия / Ю.И. Сухарев, О.В. Лужнова // Известия Челябинского научного центра УрО РАН, 2003. – №3. – С. 60–65.

ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ РИСК ОТ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА В Г. ЧЕЛЯБИНСКЕ

Е.П. Юдина

По данным объемов выбросов предприятий в атмосферный воздух г. Челябинска, а также на основании замеров концентраций загрязняющих веществ в приземном слое воздуха были рассчитаны уровни канцерогенного риска, характеризующие вероятность онкозаболеваний у населения и индексы опасности загрязняющих веществ, характеризующие степень приемлемости риска заболеваний различных систем и органов.

Ключевые слова: загрязнение атмосферного воздуха, экологический риск, риск для здоровья, канцерогенный риск, управление риском.

Оценка экологического риска является основой для управления риском – определения наиболее значимых экологических последствий, связанных с тем или иным инвестиционным проектом, а также разработки, обоснования и реализации мер по снижению риска для здоровья населения и состояния природных ландшафтов. Оценка риска угрозы здоровью населения от воздействия загрязнителей компонентов окружающей среды является неотъемлемой частью оценки экологического риска. По оценкам экспертов, в качестве одного из наиболее серьёзных рисков угрозы здоровью людей выступают различные загрязнения атмосферного воздуха (газы, аэрозоли) [1].

Анализ проводился на основе детального исследования ограниченного числа приоритетных (индикаторных) веществ, которые наилучшим образом характеризуют реальный риск для здоровья населения, проживающего на исследуемой территории. Ведущими критериями для выбора приоритетных (индикаторных) загрязняющих веществ являлись их токсические свойства, распространённость в окружающей среде и вероятность их воздействия на человека, количество вещества, поступающее в окружающую среду; численность населения, потенциально подверженного воздействию; высокая стойкость (персистентность) вещества в объекте окружающей среды; опасность для здоровья человека, т. е. способность вызывать вредные эффекты (необратимые, отдалённые, обладающие высокой медико-социальной значимостью) [2].

Для оценки риска здоровью населения г. Челябинска прежде всего были выделены основные стационарные источники загрязнения атмосферного воздуха. Затем выявлены наиболее токсичные вещества, которые могут представлять наибольшую опасность для здоровья населения. Выделенные

вещества можно разделить на две большие группы по направлению их воздействия: канцерогены и неканцерогены. Вещества, которые попадают в атмосферный воздух различных районов г. Челябинска были идентифицированы на основании объемов выбросов крупнейших предприятий города за 2011 г. с использованием баз данных химических канцерогенов Международного агентства по изучению рака (IARC), интегрированной информационной системы о рисках (IRIS) Агентства по охране окружающей среды США (U.S. EPA).

Предварительное ранжирования потенциальных канцерогенов осуществляется по величине суммарной годовой эмиссии и весовому коэффициенту канцерогенного эффекта (W_c), устанавливаемого в зависимости от значений фактора канцерогенного потенциала (SF) и группы канцерогенности по классификации МАИР или соответствующим им группам по классификации U.S. EPA.

Для предварительного ранжирования веществ, не обладающих канцерогенным риском (системные токсиканты) применяют индекс сравнительной неканцерогенной опасности (HRI), зависящий от весовых коэффициентов, основанных на безопасных дозах или концентрациях (TW):

Расчет среднегодовых доз поступления канцерогенов в организм жителей города проводился с учётом средней продолжительности жизни человека (70 лет) (I) по стандартному уравнению, имеющему следующий вид:

$$I = [C \cdot ED \cdot EF] / [BW \cdot AT \cdot 365], \quad (2)$$

где I – среднее годовое поступление, т/(кг·год); CR – величина контакта; количество загрязнённой среды, контактирующее с телом человека в единицу времени, т/год [1]; ED – продолжительность воздействия, 70 лет; EF – частота воздействия, 365 дней/год; BW – масса тела человека, 70 кг; AT – период усреднения экспозиции (для канцерогенов AT=70 лет); 365 – число дней в году [2].

Анализ среднегодовых доз (I) при хроническом ингаляционного воздействии показал, что большие среднегодовые дозы в целом для города характерны для соединений трёхвалентного хрома, углерода чёрного, бензола и бензина нефтяного.

Для оценки канцерогенного риска использовались два количественных параметра: фактор канцерогенного потенциала и единичный риск [2].

Расчет индивидуального канцерогенного риска осуществлялся с использованием данных о величине экспозиции и значениях факторов канцерогенного потенциала. Для канцерогенных химических веществ дополнительная вероятность развития рака у индивидуума на протяжении жизни (CR) оценивалась с учетом среднегодовой дозы в течение жизни (I):

$$CR = I \cdot SF, \quad (3)$$

где I – среднее годовое поступление, т/(кг·год); SF – фактор наклона [2].

Из результатов полученного индивидуального канцерогенного риска для населения различных районов г. Челябинска следует, что наибольшие среднегодовые дозы канцерогенов поступающих в организм жителей соответствуют соединениям трёхвалентного хрома, бензола, бензина и углерода чёрного. Поскольку данные вещества при превышении нормативных значений концентраций в атмосферном воздухе оказывают негативное воздействие на органы дыхания, провели анализ канцерогенных рисков при одновременном воздействии нескольких химических веществ на органы дыхания при ингаляционном поступлении загрязняющих веществ.

Суммация коэффициентов опасности для веществ однонаправленного действия (хром(VI), хром(III), сажа, бензин, мышьяк, оксид кадмия, никель металлический, ацетальдегид, формальдегид, эпихлоргидрин) [3] на органы дыхания показала, что наиболее высокому индивидуальному уровню риска соответствующему градации «не приемлем ни для населения, ни для профессиональных групп» [3] подвержено население Metallургического ($\sum CR = 0,014$) и Калининского районов ($\sum CR = 0,035$). В остальных районах уровень риска по данному показателю находится к градации «предельно допустимый риск» [3] и «пренебрежительно малый риск» [3].

Характеристика риска развития неканцерогенных эффектов осуществлялась путем сравнения фактических уровней экспозиции с безопасными уровнями воздействия (индекс/коэффициент опасности), на основе расчета коэффициента опасности по формуле

$$HQ = AD/RfD \text{ или } HQ = AC/RfC, \quad (4)$$

где HQ – коэффициент опасности; AD – средняя доза, мг/кг; AC – средняя концентрация, мг/м³; RfD – референтная (безопасная) доза, мг/кг; RfC – референтная (безопасная) концентрация, мг/м³.

Если рассчитанный коэффициент опасности (HQ) вещества не превышает единицу, то вероятность развития у человека вредных эффектов при ежедневном поступлении вещества в течение жизни незначительна и такое воздействие характеризуется как допустимое. Если коэффициент опасности превышает единицу, то вероятность возникновения вредных эффектов у человека возрастает пропорционально увеличению HQ.

В условиях комбинированного воздействия определялся суммарный индекс опасности (ТНІ), который характеризует риск развития неблагоприятных эффектов на критический орган (систему):

$$ТНІ = \sum HQ_i, \quad (5)$$

где HQ_i – коэффициенты опасности для отдельных веществ.

Суммарный индекс опасности также не должен превышать единицу. По этому индексу могут быть выделены приоритетные органы и системы, в наибольшей степени, поражаемые при воздействии химических факторов окружающей среды.

По результатам анализа полученных данных, представленных в таблице можно сделать вывод, что наибольшему риску подвержено население Калининского, Курчатовского, Ленинского, Metallургического, Тракторозаводского районов.

Значения индекса опасности вещества (НQ) выше допустимого уровня.

Район	Наименование вещества	НQ
Калининский	Взвешенные вещества	1,368
	Диоксид азота	1,115
Курчатовский	Взвешенные вещества	1,296
	Диоксид азота	0,951
Ленинский	Взвешенные вещества	1,581
Metallургический	Взвешенные вещества	1,638
Тракторозаводский	Диоксид азота	1,52
	Оксид азота	1,253
Центральный	Взвешенные вещества	1,397
	Диоксид азота	1,106

При этом было выделено две группы суммации веществ одностороннего действия – это вещества, в первую очередь воздействующие на органы дыхания и повышающие общую смертность (взвешенные вещества, диоксид серы, аммиак, диоксид азота, фторид водорода, оксид азота) и вещества, воздействующие на кровь (оксид углерода, диоксид азота, оксид азота). По всем районам города наиболее высок риск заболеваний органов дыхания, повышения общей смертности при условии ежедневного поступления данных веществ в течение всего времени жизни индивида.

Таким образом, для снижения уровня воздействия промышленных объектов по фактору химического загрязнения атмосферы необходимо углубленное изучение санитарно-эпидемиологической ситуации с использованием моделирования рассеивания выбросов от основных источников воздействия на атмосферный воздух для определения приоритетных веществ для мониторинга и контроля уровня их экспозиции.

Библиографический список

1. Ваганов, П.А. Экологические риски / П.А. Ваганов, Ман-Сунг Им. – СПб.: Изд-во СПбГУ, 2001. – 152 с.
2. Руководство Р 2.1.10.1920-04. Руководство по оценке риска для здоровья населения при воздействии химических веществ, загрязняющих окружающую среду. – М.: Федеральный центр госсанэпиднадзора Минздрава России, 2004. – 143 с.
3. Башкин, В.Н. Экологические риски: расчёт, управление, страхование: учебное пособие / В.Н. Башкин. – М.: Высш. шк., 2007. – 360 с.

УДК 519.62

**К ВОПРОСУ ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕТОДА АДАПТИВНЫХ
СЕТОК ПРИ РАСЧЕТЕ ПОТЕНЦИАЛА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ**

Н.А. Игизьянова

Проводится исследование задачи о нахождении потенциала электрического поля. Постановка задачи усложняется тем, что граничные условия предполагают наличие точек, в которых решение изменяется очень быстро. Реализация двух методов – конечных разностей и адаптивных сеток – в ходе численных экспериментов дает основание утверждать о преимуществе второго метода. Намечаются возможные пути дальнейшего исследования и использования полученных результатов в прикладных целях.

Ключевые слова: равномерная сетка, адаптивная сетка, потенциал электрического поля, пограничный слой решения, порядок аппроксимации, погрешность аппроксимации, численный эксперимент.

При численном решении дифференциальных уравнений и задач схемы повышенного порядка аппроксимации могут дать большую точность, если задано количество узлов равномерной сетки. В случае сходящейся разностной схемы точность численного решения можно увеличить, изменяя шаг сетки. Впрочем, для уравнений с переменными коэффициентами построение таких схем довольно затруднительно [1].

Более точное представление решения обеспечивается тем, что в области быстрого изменения решения сетку загущают, а там, где решение изменяется медленно, сетка остается разреженной и равномерной. Такие неравномерные сетки называются еще адаптивными.

Рассмотрим применение этой сетки на примере стационарного уравнения для расчета значений потенциала электрического поля. В общем случае задача рассматривается в трехмерной цилиндрической системе координат – с переменными r – по радиусу, z – по высоте, φ – по углу:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0.$$

Частный одномерный случай этого уравнения характеризует распределение потенциала вдоль радиуса круга, являющегося основанием цилиндра:

$$U''(r) + \frac{1}{r} U'(r) = 0 \quad (1)$$

с граничными условиями вдоль радиуса $[R_1, R_2]$:

$$U(R_1) = a, \quad U(R_2) = 0, \quad (2)$$

где a – некоторое число.

Будем считать, что задача имеет достаточно гладкое решение, имеющее частный вид:

$$U_{\text{частн.}}(r) = a \frac{\ln r - \ln R_2}{\ln R_1 - \ln R_2}. \quad (3)$$

Представляется интересным рассмотреть решение задачи численными методами именно в окрестности левой границы рассматриваемого интервала $[R_1, R_2]$ при $R_1 \rightarrow 0$, где оно меняется очень быстро. Эта окрестность получила название пограничного слоя решения.

Алгоритм решения данной разностной схемы сводится к вычислению по формуле в явном виде:

$$U_j = \frac{U_{j+1}(r_j + \Delta r) + U_{j-1}r_j}{2r_j + \Delta r} \quad (4)$$

для некоторого узла r_j , в котором известны решения U_j и U_{j+1} . Поскольку начальные значения U_{N-1} и U_N заданы, то можно определить следующие значения U_{N-2} ; U_{N-3} ; ...; U_2 .

Рассмотрим теперь задачу (1) – (2) на неравномерной сетке [2, 3]. Пусть

$$r = r(\xi), \quad \xi \in [0, 1] \quad (5)$$

произвольное достаточно гладкое взаимно-однозначное отображение единичного отрезка $[0, 1]$ на отрезок $[R_1, R_2]$, такое, что $r(0) = R_1$, $r(1) = R_2$. Будем считать, что это отображение – допустимое, т. е. удовлетворяет условию ограниченности его производной сверху и снизу:

$$0 < J_m \leq J(\xi) \equiv \frac{dr}{d\xi}(\xi) \leq J_M < \infty. \quad (6)$$

Зададим на отрезке $[0, 1]$ равномерную сетку $\xi_j = jh$ ($j = 0, \dots, N$) с шагом $h = \frac{1}{N}$. Тогда неравномерной

сеткой на отрезке $[R_1, R_2]$ будет являться образ равномерной сетки при отображении (9) $r_j = r(\xi_j)$ ($j = 0, \dots, N-1$) с шагом $h_{j+1/2} = r_{j+1} - r_j > 0$.

Графическая иллюстрация полученного отображения представлена на рис. 1.

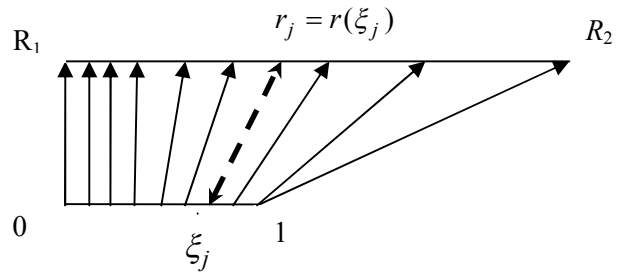


Рис. 1. Схема неравномерной сетки

Перейдем в исходной задаче к новой независимой переменной ξ и получим новую задачу относительно неизвестной функции $\tilde{U}(\xi) = \tilde{U}(r(\xi))$:

$$\frac{1}{J} \frac{d}{d\xi} \left(\frac{d\tilde{U}}{J d\xi} \right) + \frac{1}{\tilde{r}} \frac{d\tilde{U}}{J d\xi} = 0, \quad \xi \in (0, 1), \quad (7)$$

$$\tilde{U}(R_1) = a, \quad \tilde{U}(R_2) = 0.$$

Таким образом, каждое отображение (9) индуцирует взаимно-однозначное соответствие между двумя множествами функций: функций, определенных на интервале $[0, l]$ и функций, определенных на интервале $[0, 1]$. При этом функция $\tilde{U}(\xi)$ определяется как функция, принимающая в точке ξ такое же значение, что и функция $U(r)$ в точке $r = r(\xi)$.

Используя один из примеров аппроксимации задачи, получим разностную схему на неравномерной сетке:

$$\frac{1}{h_j} \left(\frac{U_{j+1} - U_j}{h_{j+1/2}} - \frac{U_j - U_{j-1}}{h_{j-1/2}} \right) + \frac{1}{r_j} \left(\frac{U_{j+1} - U_j}{h_{j+1/2}} \right) = 0, \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (8)$$

$$U_0 = a, \quad U_N = 0, \quad \text{где } h_j = \frac{h_{j-1/2} + h_{j+1/2}}{2}, \quad h_{j-1/2} = r_j - r_{j-1}.$$

Краевые условия в схеме (8) аппроксимируются точно, поэтому порядок аппроксимации схемы будет определяться только невязкой уравнений $\delta_j = U_j - U(r_j)$, $j = 1, \dots, N-1$, где $U(r_j)$ – точное решение задачи (1).

Исходя из определения аппроксимации дифференциальной задачи разностной, и предполагая, что неравномерная сетка построена на основе некоторого допустимого отображения (5), имеем порядок погрешности аппроксимации схемы (8):

$$\delta_j = h \frac{r_\xi}{2r_j} U'' + o(h^2).$$

Сравнительные данные потенциала на адаптивной сетке

Радиус, м	Точн.знач.	Знач. на адаптив. сетке
0,150	0,0022	0,0022
0,150	0,0022	0,0022
0,151	0,0022	0,0021
0,152	0,0021	0,0021
0,155	0,0021	0,0020
0,160	0,0019	0,0019
0,168	0,0017	0,0018
0,178	0,0015	0,0015
0,192	0,0012	0,0012
0,210	0,0009	0,0008
0,233	0,0004	0,0004
0,260	0,0000	0,0000

Таким образом, $\|\delta_j\| \leq Ch$, где константа C не зависит от шага h , но зависит от отображения $r = r(\xi)$ и решения $U(r)$. Схема на неравномерной сетке имеет 1-й порядок аппроксимации.

Результаты проведенных численных экспериментов приведены в таблице. В качестве граничных условий задачи (1) были взяты интервал $[0,15; 0,26]$ и начальные значения функции на его границах: $U(0,15) = 0,0022$, $U(0,26) = 0$. Вы-

числены точные значения потенциала на заданном отрезке по формуле (3) и значения его на равномерной сетке – по формуле (5).

Данные таблицы получили графическую интерпретацию на рис. 2. Этот график демонстрирует достаточно хорошее приближение соответствующего метода численной реализации к точному решению задачи. Более того, в данном случае порядок аппроксимации меньше, чем на равномерной сетке, а приближение к точному решению достигает 100 %. Это позволяет сделать вывод о существенном преимуществе метода адаптивных сеток по сравнению с методом равномерных сеток.

Численный эксперимент показал практическую пользу сгущения сетки в области быстрого изменения решения при численном решении обыкновенного дифференциального уравнения (1) с граничными условиями (2). В перспективе предполагается распространить задачу о нахождении электрического потенциала на двухмерный и трехмерный случаи. Кроме того, при особой расстановке узлов можно построить сетку, на которой порядок аппроксимации схемы (8) будет выше, чем у схемы на равномерной сетке (4).

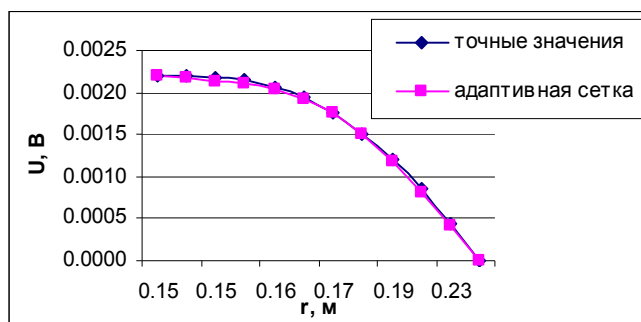


Рис. 2. Распределение потенциала по адаптивной сетке

Библиографический список

1. Лекции по разностным схемам на подвижных сетках. В 3 ч.: учеб. пособие Ч. 1: Задачи для уравнений в частных производных с одной пространственной переменной / Ю.И. Шокин, Н.Т. Данаев, Г.С. Хакимзянов, Н.Ю. Шокина. – Алматы: КазНУ, 2006. – 132 с.
2. Лисейкин, В.Д. Разностные сетки и координатные преобразования для численного решения сингулярно возмущенных задач / В.Д. Лисейкин, Ю.В. Лиханова, Ю.И. Шокин. – Новосибирск: Наука, 2007. – 312 с.
3. Шокин, Ю.И. Методы римановой геометрии в задачах построения разностных сеток / Ю.И. Шокин, В.Д. Лисейкин, А.С. Лебедев и др. – Новосибирск: Наука, 2005. – 256 с.

УДК 528.931.1 + 528.946

**О ПОСТРОЕНИИ ИПД ОМСУ НА ОСНОВЕ ОБЪЕКТНОЙ МОДЕЛИ
И ОТКРЫТЫХ ГЕОИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**

В.В. Комоско

Для создания инфраструктуры пространственных данных (ИПД) органов местного самоуправления (ОМСУ) необходимо решить сложнейшие организационные, нормативно-правовые и технологические вопросы. Предлагаемая технология является эффективным средством для создания ИПД ОМСУ путем построения интегрированной объектной модели предметной области в виде соответствующего классификатора и разработки на его основе хранилища пространственных данных и геопортала ОМСУ.

Ключевые слова: инфраструктура пространственных данных, объектная модель пространственных данных, геопортал, ИС «Редактор каталогов ПД», стандарт ISO 19110, WMS и WFS.

Процесс информатизации органов местного самоуправления (ОМСУ) в России длится уже не одно десятилетие. Существует много объективных и субъективных причин, по которым до настоящего времени так и не существует типовой муниципальной информационной системы (МИС) (речь идет о малых и средних городах численностью в десятки тысяч населения). Есть ряд систем, автоматизирующих бизнес-процессы в отдельных службах ОМСУ (градостроительство, бюджетный процесс, ЖКХ и др.), но все они, как правило, автономны и изолированы.

В настоящее время существует ряд универсальных коммерческих ГИС, наиболее распространенные из которых ArcGIS (www.arcgis.com), MapInfo (www.mapinfo.ru), ГИС Панорама, ИНГЕО и др. Эти ГИС способны хранить, обрабатывать и публиковать карты и картографические слои произвольных масштабов и сложности. Они обладают мощной функциональностью, и с их помощью могут быть решены практически любые прикладные задачи. Однако эти ГИС имеют достаточно высокую стоимость и уровень требуемой квалификации пользователя для реализации своих проектов, поэтому многие пользователи вынуждены рассматривать другие варианты.

Таким образом, создание веб-ГИС технологии как можно более эффективной по функционалу, максимально простой в освоении и минимальной по стоимости является очень актуальной задачей.

В настоящее время согласно Концепции создания и развития инфраструктуры пространственных данных Российской Федерации (ИПД РФ),

утвержденной Правительством РФ в 2006 г. [1], генеральным направлением решения этой проблемы считается интеграция информационных ресурсов ОМСУ на основе ИПД.

Информационная модель МИС. Для создания информационной модели МИС необходимо использовать более сложные модели представления данных [2], включающие не два, а три элемента представления данных: объект, свойство, признак.

Еще один очень важный фактор для создания информационной модели МИС – обеспечение лингвистического (понятийного) единства за счет применения единой для территории системы классификации и кодирования технико-экономической и социальной информации. В самом деле, если в составе территориальной информационной системы будут действовать подсистемы, построенные на различных системах классификации и кодирования, они априори будут несовместимыми. Частично эта проблема решается на федеральном уровне, но для полного ее решения возможен только один путь – введение муниципального стандарта на систему справочников, словарей и классификаторов, используемых при создании МИС.

Анализ показывает, что введенная в [2] информационная модель МИС может быть полностью описана с помощью международного стандарта ISO 19110 [3].

Web-ГИС технология создания ИПД ОМСУ. ИПД ОМСУ является составным элементом интегрированной информационной среды ОМСУ, объединяющей все службы ОМСУ, подразделения региональных и федеральных органов власти и население.

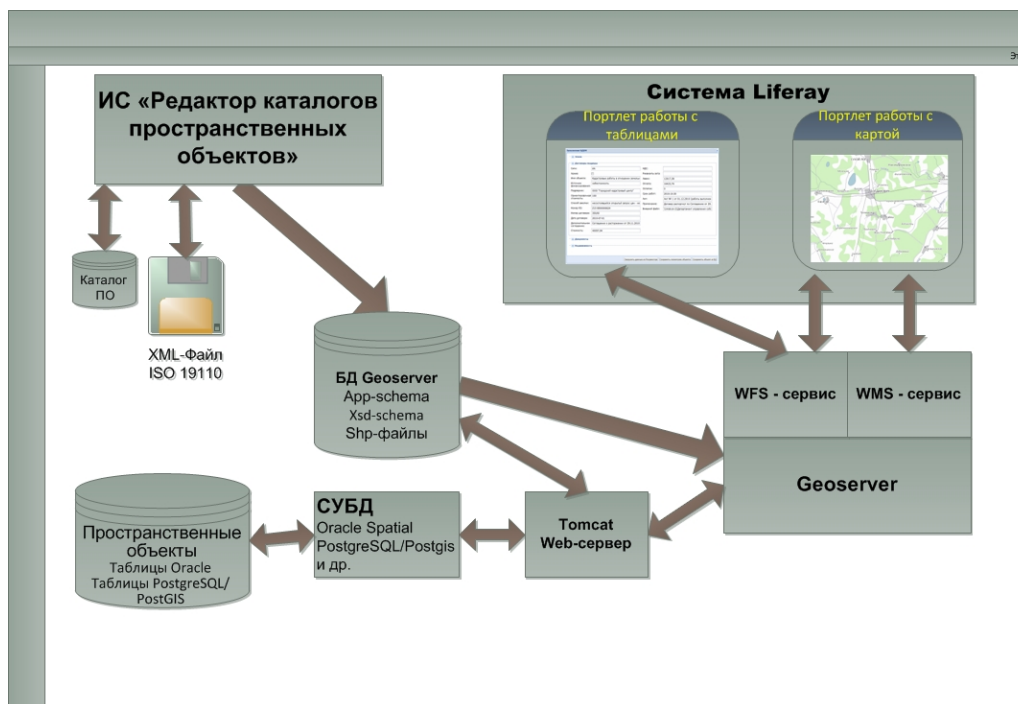
Единая информационная среда ОМСУ состоит из трех основных компонентов:

- интегрированной базы данных (реестры: физических лиц, земельных участков; недвижимого имущества (жилого и нежилого фонда), адресный, юридических лиц и др.
- хранилища [4] пространственных данных, содержащего сведения о пространственных объектах, общих для различных категорий пользователей.
- БД «Документы ОМСУ», являющейся центральным звеном электронного документооборота (в том числе и для «одного окна»).

Интеграция этих трех компонент единой информационной среды ОМСУ может быть осуществлена с помощью Web-ГИС технологии на базе единой объектной модели пространственных данных для всех служб ОМСУ и едином принципе идентификации пространственных объектов.

Архитектура Web-ГИС технологии представлена на рисунке. Основными компонентами этой архитектуры являются:

- ИС «Редактор каталогов пространственных объектов» (оригинальная разработка) для создания объектно-ориентированных моделей конкретных предметных областей служб ОМСУ и интеграции их на основе международного стандарта ISO 19110 в единую модель;



Web-ГИС технология создания ИПД ОМСУ

- Хранилище пространственных объектов для сбора, хранения и обработки пространственных данных, реализуемое на основе какой-либо штатной СУБД (Oracle 11g Spatial, PostgreSQL/PostGIS и др.), имеющей в своем составе компонент работы с пространственными данными;
- объединенный геопортал ОМСУ, реализуемый с помощью системы построения геопорталов Liferay;
- Geoserver, реализующий сервисы WFS и WMS согласно стандартам OGC[5];
- Web-сервер, например Tomcat, для связи Web-сервисов с СУБД.

Создание ИПД для конкретной службы с помощью данной технологии состоит из следующих этапов:

1. С помощью ИС «Редактор каталогов пространственных объектов» создается объектный каталог предметной области.
2. ИС «Редактор каталогов пространственных объектов» генерирует APP-схему.
3. APP-схема подключается к Geoserver.
4. ИС «Редактор каталогов пространственных объектов» генерирует описание структуры пространственных данных службы. Структура загружается в Хранилище пространственных данных.
5. Geoserver подключается к Хранилищу пространственных данных, содержащему различные источники пространственных объектов (shp-файлы, СУБД Oracle, PostgreSQL/PostGIS и т. п.). Источник может быть как с пустой, так и с предварительно загруженной информацией.

6. В Liferay регистрируется проект и пользователи. Устанавливаются права доступа, т. е. осуществляется необходимое администрирование.

7. В Liferay подключаются портлеты: работы с объектами в табличном виде (взаимодействие с Geoserver через APP-схему на основе WFS сервиса) и в виде карты (визуализация карты с помощью Geoserver на основе WMS сервиса).

8. Пользователь приступает к наполнению своего раздела Хранилища пространственных данных с помощью общих для всех служб портлетов.

Высокая скорость и качество создания ИПД достигается за счет простоты интерфейса (контекстно-настраиваемый графический редактор пространственных объектов) и предоставлением полной необходимой функциональности для осуществления операций над пространственными данными.

Библиографический список

1. Концепция создания и развития инфраструктуры пространственных данных Российской Федерации // Пространственные данные. – 2006. – № 3. – С. 6–9, 11.

2. Михеев, Ю.А. Размышления об электронных муниципалитетах / Ю.А. Михеев, А.А. Лощинин, А.В. Воротников // Управленческое консультирование. – 2003. – №1.

3. Михеев, Ю.А. Размышления об электронных муниципалитетах / Ю.А. Михеев, А.А. Лощинин, А.В. Воротников // Управленческое консультирование. – 2003. – № 2.

4. ISO 19110:2005 «Geographic information. Methodology for feature cataloguing». – http://www.iso.org/iso/catalogue_detail.htm?csnumber=44459.

5. Хранилище пространственных объектов в составе регионального узла ИПД УрФО / О.Л. Анисимова, Ю.Д. Зраенко, В.В. Комоско и др. // Пространственные данные. – 2010. – № 1. – С. 14–22.

6. Хранилище пространственных объектов в составе регионального узла ИПД УрФО / О.Л. Анисимова, Ю.Д. Зраенко, В.В. Комоско и др. // Пространственные данные. – 2010. – № 2. – С. 32–40.

7. Overview: WFS, WMS, WCS (eds.). – <http://www.geowebguru.com/articles/95-overview-wms-wfs-wcs>.

СОДЕРЖАНИЕ

ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

<i>Марков Б.А.</i> Об одной задаче на отрезке с оператором Лизеганга	3
<i>Ленская О.Ю.</i> Особенности моделирования городского погранслоя атмосферы с использованием различных баз геоданных Modis	7

ФАКУЛЬТЕТ МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ

<i>Кочеткова Г.С., Овчинникова Н.Н.</i> Включение студентов в активную проектировочную деятельность как условие формирования профессиональной компетентности будущих инженеров	11
<i>Табаринцева Е.В.</i> Об одном классе корректности задачи с обратным временем для нелинейного дифференциального уравнения	15
<i>Алеев Р.Ж., Тюрина И.А.</i> Конечные простые группы, в которых централизаторы элементов с малым числом простых делителей	19
<i>Алеев Р.Ж., Колясников С.А.</i> Круговые единицы групповых колец циклических групп простого порядка	23
<i>Брагина А.А.</i> К задаче приведения нелинейной модели многосвязного объекта к системе линейных дифференциальных уравнений	27
<i>Березанский И.В., Суров В.С.</i> Об истечении многокомпонентной смеси в вакуум	31
<i>Катков М.Л.</i> Замечание к теории вогнутых операторов	35
<i>Евдокимова Н.А., Лукьяненко Д.В., Ягола А.Г.</i> Использование методов решения некорректных задач для восстановления ориентационной функции распределения частиц	39
<i>Пигасов Е.Е., Рябинин В.К., Ковалев Ю.М.</i> Математическое моделирование адиабатического теплового взрыва для реакций окисления водорода и метана	43
<i>Ковалев Ю.М., Шестаковская Е.С.</i> Численное исследование взаимодействия цилиндрических ударных волн с плоским гетерогенным слоем	47
<i>Рябинин В.К.</i> Оценка эффективности программ решения жестких систем дифференциальных уравнений применительно к задачам физики горения	51

ФАКУЛЬТЕТ ФИЗИЧЕСКИЙ

<i>Кузнецов Г.Ф., Гуревич С.Ю., Клещев Д.Г., Лаврентьев С.И.</i> Новые конструктивы источников энергии, основанные на электрическом разряде в потоке электролита	56
<i>Толипов Х.Б.</i> Новые акустические эффекты при распространении волны в среде клиновидной формы	60
<i>Голубев Е.В., Гуревич С.Ю., Петров Ю.В.</i> Анализ спектров акустических импульсов волн Лэмба, возбужденных импульсным лазерным излучением в ферромагнитном металле	64

<i>Шульгинов А.А.</i> Тонкая структура распределения результатов измерений гамма-фона	68
<i>Кузнецов Г.Ф., Гуревич С.Ю., Клещев Д.Г.</i> К теории энерговыделения при электрическом разряде в потоке электролита	72

ФАКУЛЬТЕТ ХИМИЧЕСКИЙ

<i>Григорьева Е.А.</i> Изучение способов модификации глауконита	76
<i>Груба О.Н., Рябухин А.Г.</i> Методика расчета энтальпии образования катионов металлов в газовой фазе	80
<i>Малютина Е.М., Дыскина Б.Ш.</i> Влияние углеродных добавок на выход и качество пекового кокса	84
<i>Варламова Т.В.</i> Оксиды вентильных металлов в структуре плёночных оксиднометаллических катализаторов	88
<i>Дыскина Б.Ш., Колупаева Ю.В.</i> Формирование структуры пекового кокса на твердофазном носителе	92
<i>Малютина Е.М., Дыскина Б.Ш.</i> Получение карбюризаторов из углеродных пылевых отходов в поливиниловом спирте	96
<i>Нонишнев Н.П.</i> Особенности технологии получения доменных блоков	101
<i>Смолякова К.Р., Бердимухамедова А.И.</i> Модифицирование полимерами нефтяных дорожных битумов	105
<i>Гофман В.Р.</i> К вопросу о нормативно-правовых и институциональных условиях интернализации экологических экстерналий	109
<i>Машкова И.В., Попкова М.А.</i> Актуальные вопросы здоровьесбережения студентов челябинских вузов	113
<i>Ракова О.В., Крупнова Т.Г.</i> Зависимость сорбционных свойств оксигидрата ниобия от электромагнитного излучения	117
<i>Юдина Е.П.</i> Экологический риск от загрязнения атмосферного воздуха в г. Челябинске	121

ФИЛИАЛ В Г. ЗЛАТОУСТЕ

<i>Игизьянова Н.А.</i> К вопросу об использовании метода адаптивных сеток при расчете потенциала электрического поля	125
--	-----

ФИЛИАЛ В Г. СНЕЖИНСКЕ

<i>Комоско В.В.</i> О построении ИПД ОМСУ на основе объектной модели и открытых геоинформационных технологий	129
--	-----

НАУКА ЮУрГУ

Материалы 65-й научной конференции

СЕКЦИИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Техн. редактор А.В. Миних

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 18.07.2013. Формат 60×84 1/16. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 7,90. Тираж 80 экз. Заказ 283/509

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ.
454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.