НАУКА ЮУрГУ

МАТЕРИАЛЫ
66-Й
НАУЧНОЙ
КОНФЕРЕНЦИИ

СЕКЦИИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Министерство образования и науки Российской Федерации
Южно-Уральский государственный университет

Ч48
Н34

НАУКА ЮУрГУ

Материалы 66-й научной конференции

СЕКЦИИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Челябинск
Издательский цент ЮУрГУ
2014

ББК Ч481.46.я43 + Ч215.1.я43
Н34

Оргкомитет 66-й научной конференции
Ваулин С.Д. (председатель), Рождественский Ю.В., Спасибожко В.В., Шабиев С.Г., Сафонов Е.В., Карпов А.Н., Радченко Г.И., Шестеркина Л.П., Парфентьева Н.Д., Хомутова Т.Н., Келлер А.В., Горшенин В.П., Гузеев В.И., Майсак В.Н., Казаринов Л.С., Солдатова Е.Л., Кундикова Н.Д., Михайлов Г.Г., Авдин В.В., Шиндина Т.А., Баев И.А., Белоножко А.Т., Классен А.Н., Волошина И.А., Шестакова Л.И., Демин А.А., Эрлих В.В., Окольнишникова И.Ю., Чванова Е.Е., Чуманов В.И., Плаксин О.А., Балахонова И.М., Серко И.А., Борщенюк В.Н., Давыдова О.И., Романов Е.В., Кравцов А.И., Орлова Е.Ю., Шкерина Г.А.

Ответственный за выпуск Ваулин С.Д.

Н 34 **Наука ЮУрГУ** [Электронный ресурс]: материалы 66-й научной конференции. Секции естественных наук. – Электрон. текст. дан. (19,2 Мб). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2014. – 1 электрон. опт. диск (DVD); 12 см – Системные требования: PC не ниже класса Pentium I; ОЗУ 512 Mb; ОС Windows 2000/XP/Vista/7; Adobe Acrobat Reader; DVD-ROM дисковод. – Загл. с экрана.

Представлены материалы 66-й научной конференции профессорско-преподавательского состава, аспирантов и сотрудников, которая состоялась в апреле 2014 года.

Отпечатано с авторских оригиналов.

ББК Ч481.46.я43 + Ч215.1.я43

ISBN 978-5-696-04587-0

© Издательский центр ЮУрГУ, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

Алеев Р.Ж., Митина О.В. Распределение рангов групп центральных единиц целочисленных групповых колец знакопеременных групп…. 7

Иванова Е.В. Обработка запросов к сверхбольшим базам данных с использованием распределенных колоночных хеш-индексов……... 12

Шамакина А.В. Методы управления ресурсами в распределенных проблемно-ориентированных средах*……. 16

Коржова М.Е., Коржов А.В. Оценка значимости факторов, влияющих на пробой изоляции кабелей 6(10) кв по ретроспективной информации 23

Соколинская И.М. Методы оптимизации и дискриминантного анализа в математических моделях экономики с использованием многопроцессорных систем……. 31

Табаринцева Е.В. Об оценке точности метода приближенного решения граничной обратной задачи для нелинейного параболического уравнения…… 36

Абдуллаев С.М. Универсальный алгоритм прогноза опасных явлений погоды: реконструкция жизненного цикла конвективных систем…… 41

Абдуллаев С.М., Ленская О.Ю. Функции принадлежности универсального алгоритма прогноза опасных явлений погоды: грозовая активность конвективных систем……. 50

ФАКУЛЬТЕТ МАТЕМАТИКИ, МЕХАНИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК

Деркунова Е.А. Об асимптотике сингулярно возмущенного уравнения в случае смены устойчивости…….. 59

Логинова Л.А. О комплексном дифференцированном подходе к изучению математики в техническом вузе……. 62

Осмоловский В.И. Организация ценностно-ориентированного обучения математике……... 68

Эбель А.А. Об одной задаче смешанного жесткого управления системы уравнений леонтьевского типа…… 73

Заляпин В.И., Попенко Ю.С., Харитонова Е.В. Краевые задачи с распределенными данными…….. 77

Катков М.Л. Замечание к теории вогнутых и псевдовогнутых операторов…… 82

Кудрявцев К.Н., Стабулит И.С., Шунайлова С.А. О сильно гарантированном решении одной линейно-квадратичной игры……. 84

Матвеева Л.В. Оценка скорости сходимости полиномов гронуолла в области сходимости и вне этой области…… 89
Медведев С.В.Однородные λ-множества…….. 93
Кочеткова Г.С., Овчинникова Н.Н. Об условиях формирования профессиональной компетентности будущих менеджеров…… 98
Рузакова О.А., Золотарёва Е.А. Об управляемости одной модели соболевского типа…… 103
Клиначева Н.Л. Модифицированная математическая модель «замороженной» газовзвеси…… 108
Ковалев Ю.М. Определение вида силы межфазного взаимодействия для математической модели газовзвеси, инвариантной относительно преобразования Галилея……... 116
Ковалев Ю.М., Пигасов Е.Е. Математическая модель газовзвеси с химическими превращениями, инвариантная относительно преобразования галилея……... 124
Куропатенко В.Ф., Шестаковская Е.С., Якимова М.Н. Определение коэффициента автомодельности в задаче о динамическом сжатии холодного газового шара……... 132
Рябинин В.К. Анализ и уточнение методик решения обратной кинетической задачи для зажигания конденсированных веществ лучистой энергией…… 140
Суров В.С. Гиперболические модели в механике гетерогенных сред 148
Демидов А.К. Разработка языка разметки…… 153
Брагина А.А. Управление манипуляционными механизмами при существенном влиянии возмущающих моментов…… 161
Гереншгейн А.В., Гереншгейн Е.А. Дифференциально-разностная схема для нелинейного уравнения теплопроводности…….. 166
Дильман В.Л., Дияб А.Н. Анализ расположения линий разрыва напряжений в дискретно неоднородной растягиваемой полосе при плоской деформации…… 170
Дильман В.Л., Носачева А.И. Анализ зависимости напряженного состояния неоднородной полосы с дефектом в менее прочной части 178
Елсаков С.М. Эффективный алгоритм решения вспомогательной задачи в однородных алгоритмах глобальной оптимизации……... 186
Кувшинов Б.М. Сигнальные переменные в задаче планирования пополнения склада……... 193
Прокудина Л.А. Волновые характеристики стекающей пленки жидкости при неустойчивости марангони…… 198
Тырсин А.Н., Сурин В.А. Шумоподавление при нелинейной фильтрации изображений на основе обобщенного метода наименьших модулей…… 204
Тырсин А.Н., Сурина А.А. Энтропийный подход к риск-анализу систем критичных инфраструктур…….. 210

Шелудько А.С. Задание множества поиска параметра при идентификации модели хаотического процесса…… 218
Эвнин А.Ю. Оценка числа доминирования в графах диаметра 2…… 225
Москвичёва П.О. Исследование устойчивости одного уравнения соболевского типа…… 228
Шафранов Д.Е. О моделях соболевского типа в пространстве дифференциальных k-форм на сфере…… 234

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Воронцов А.Г. Формирование структуры коденсированной фазы расплавов…….... 239
Поляков А.А. Инфляционный и дефляционный подходы к описанию фрактала из пятиконечных звезд……. 247
Ридный Я.М., Мирзоев А.А. Исследование влияния типа магнитного состояния на энергию растворения углерода в ГЦК-железе……... 254
Созыкин С.А., Бескачко В.П. Структура экзоэдральных комплексов углеродной нанотрубки с атомами серы……. 260
Речкалов В.Г. Особенности моделирования процессов свободного испарения капли жидкости методом конечных разностей…….. 267
Ушаков В.Л., Пызин Г.П. Немонотонный характер испарения лежащей капли……. 275
Мирзоев А.А. Атомистическое компьютерное моделирование материалов……. 283
Мирзоев А.А., Чирков П.В. Взаимодействие атомов углерода в мартенсите системы железо-углерод……... 290
Гусев А.В. Оценка степени заполнения поверхности сплава $Fe_{82,6}C_{17,3}S_{0,1}$ методом ТПД…… 295
Березин В.М. Проявление квантового размерного эффекта в электросопротивлении тонких пленок углерода…… 301
Кузнецов Г.Ф., Гуревич С.Ю., Клещев Д.Г. Повышение эффективности нового источника энергии на базе электрического разряда в потоке электролита…….. 308
Гуревич С.Ю., Голубев Е.В., Петров Ю.В. Излучатель и приемник ультразвука для бесконтактного контроля качества тонколистовых металлоизделий……. 316
Шульгинов А.А. Обратный бета-распад радионуклидов под действием потоков нейтрино ультранизких энергий……... 326

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Рябухин А.Г., Груба О.Н. Моделирование и расчет стандартной энтальпии гидратации анионов элементов ia и iia групп……. 331
Смолко В.А., Антошкина Е.Г. Синергетика процесса формирования структуры и прочности синтетических песчано-глинистых смесей... 339
Юшина И.Д., Рудаков Б.В., Барташевич Е.В. Спектральная неоднородность полийодидов алкиламмониевого и уротропиниевого ряда по данным раман-спектроскопии……... 343
Варламова Т.В., Лясова А.Е., Галимов Д.М. Использование углеродных нанотрубок в технологии керамики…….. 350
Дыскина Б.Ш., Колупаева Ю.В., Королев А.С. Анализ процессов десульфуризации нефтяных коксов…… 357
Нонишнева Н.П. Преимущества использования печей открытого типа для обжига углеграфитовой продукции…… 363
Смолякова К.Р., Шарова А.И., Агапкина Н.А., Баскакова А.Г., Сафина Г.Ф. Синтез полимерно-битумных вяжущих материалов для дорожного строительства и изучение их товарных характеристик 369
Смолякова К.Р., Шарова А.И., Сафина Г.Ф., Попова М.А., Гаязова А.О. Влияние адгезионных добавок на товарные свойства нефтяных дорожных битумов…… 374
Зыбалов В.С. Экологическое нормирование пространственной структуры агроэкосистем на Южном Урале……. 379
Зыбалов В.С., Кунгурова Е.С. Возможности управления углеродным балансом в аспекте земле- и лесопользования Южного Урала……... 384
Машкова И.В., Кострюкова А.М., Крупнова Т.Г. Оценка гидрохимических и гидробиологических показателей качества воды озера Ильменское (Челябинская область)…… 389

ФИЛИАЛ В г. ОЗЕРСК

Смагин А.И., Сидоркина О.М., Тихонова М.А Особенности поведения радионуклидов в пресноводных водоемах зоны воздействия ПО «Маяк» и их накопление рыбой……. 394

ФИЛИАЛ В г. УСТЬ-КАТАВ

Козлова Н.Г. Управление резервом……... 399

ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

УДК 512.552.7+512.542.74

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РАНГОВ ГРУПП ЦЕНТРАЛЬНЫХ ЕДИНИЦ ЦЕЛОЧИСЛЕННЫХ ГРУППОВЫХ КОЛЕЦ ЗНАКОПЕРЕМЕННЫХ ГРУПП

Р.Ж. Алеев, О.В. Митина

Изучается распределение рангов групп центральных единиц знакопеременной группы через анализ разбиений. Как результат доказана теорема о малых рангах таких групп. Также проведён анализ близкого расположения квадратов в разбиениях, что позволило указать условия на разбиения, которые дают нетривиальный вклад в ранг.

Ключевые слова: знакопеременная группа, разбиения, групповое кольцо, центральная единица, ранг абелевой группы.

Термин «*центральная единица*» всегда означает «*центральную единицу (обратимый элемент центра) целочисленного группового кольца конечной группы*».

Фробениус указал построение неприводимых комплексных характеров знакопеременных групп через разбиения степеней этих групп. Так как значения характеров – это элементы квадратичных полей (или целые числа), мы можем найти ранги групп центральных единиц знакопеременных групп.

Лемма. [1] Свободный ранг группы центральных единиц знакопеременной группы степени n равен количеству разбиений $[a_1, \ldots, a_k]$ числа n, которые удовлетворяют следующим условиям:

1) a_i нечётно, $1 \leq \mathrm{i} \leq \mathrm{k}$;
2) $a_i \neq a_j$ для всех $i \neq j$;
3) $n \equiv k \ (mod\ 4)$;
4) $\Pi_{i=1}^{k} a_i$ не является квадратом.

Легко понять, что условие 4 – наиболее трудное.

А.В. Каргаполов [2, 3] вычислил ранги групп центральных единиц знакопеременных групп до степени 800.

Далее приведены результаты вычислений для $1 \leq n \leq 200$, где n – степень знакопеременной группы, r_n – ранг группы центральных единиц знакопеременной группы степени n, q_n – количество разбиений числа n, удовлетворяющих условиям 1–3 леммы 1, но не удовлетворяющих 4.

$n \equiv 1\ (mod\ 8)$

n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n
1	0	1	9	0	1	17	1	0	25	1	1
33	5	1	41	18	1	49	45	3	57	96	6
65	187	6	73	324	10	81	525	17	89	823	14
97	1225	24	105	1787	34	113	2586	34	121	3706	49
129	5335	61	137	7739	64	145	11288	85	153	16572	113
161	24443	125	169	36026	167	177	52947	220	185	77420	243
193	112259	331									

$n \equiv 5\ (mod\ 8)$

n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n
5	1	0	13	1	0	21	1	0	29	3	0
37	11	0	45	31	0	53	71	0	61	141	1
69	255	1	77	427	1	85	673	4	63	1022	4
101	1507	4	109	2176	10	117	3129	8	125	4489	9
133	6464	18	141	9390	22	149	13744	21	157	20208	32
165	29782	43	173	43849	40	181	64236	75	189	93514	95
197	135007	110									

$n \equiv 2\ (mod\ 8)$

n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n
2	0	0	10	1	1	18	4	0	26	5	1
34	7	1	42	13	0	50	24	2	58	55	3
66	125	1	74	249	4	82	465	9	90	824	9
98	1373	11	106	2176	25	114	3350	24	122	4984	36
130	7242	58	138	10377	55	146	14648	74	154	20510	107
162	28644	111	170	39906	149	178	55644	197	186	77765	216
194	108818	271									

$n \equiv 6\ (mod\ 8)$

n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n
6	1	0	14	3	0	22	5	0	30	6	1
38	10	0	46	18	0	54	39	0	62	86	0
70	178	2	78	347	3	86	631	2	94	1074	6
102	1745	10	110	2724	12	118	4111	18	126	6046	24
134	8709	33	142	12364	44	150	17381	55	158	24291	64
166	33852	86	174	47186	101	182	65852	120	1900	92043	172
198	128899	196									

$n \equiv 3\ (mod\ 8)$

n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n
3	0	0	11	1	0	19	5	0	27	12	0
35	20	1	43	33	0	51	48	1	59	70	2
67	113	0	75	188	2	83	331	3	91	595	2
99	1049	3	107	1796	8	115	2990	9	123	4815	12
131	7505	33	139	11426	33	147	16968	38	155	24653	67
163	35237	73	171	49602	99	179	68986	146	187	95106	166
195	130175	201									

$n \equiv 7\ (mod\ 8)$

n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n
7	0	0	15	3	0	23	7	1	31	14	2
39	26	1	47	37	3	55	56	3	63	89	1
71	140	5	79	245	6	87	441	6	95	785	9
103	1367	16	111	2320	16	119	3793	26	127	6018	36
135	9283	41	143	13929	69	151	20462	91	159	29496	108
167	41810	150	175	58516	179	183	81025	214	191	111240	292
199	151855	359									

$n \equiv 4\ (mod\ 8)$

n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n
4	0	0	12	0	0	20	2	0	28	9	0
36	23	0	44	47	0	52	84	0	60	134	2
68	208	0	76	307	1	84	446	5	92	666	1
100	1006	2	108	1553	5	116	2447	4	124	3884	3
132	6139	13	140	9631	20	148	14922	14	156	22710	34
164	34011	41	172	50089	44	180	72543	90	188	103570	105
196	145864	128									

$n \equiv 8\ (mod\ 8)$

n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n	n	r_n	q_n
8	0	0	16	1	0	24	4	1	32	13	2
40	32	2	48	59	5	56	101	7	64	164	6
72	243	11	80	360	13	88	536	12	96	797	21
104	1225	25	112	1925	27	120	3049	37	128	4846	48
136	7667	51	144	11951	79	152	18366	104	160	27765	25
168	41226	178	176	60243	218	184	86672	261	192	122869	358
200	171988	453									

Теорема 1. *Пусть r_n – ранг группы центральных единиц знакопеременной группы степени n. Тогда:*

1) для $n \leq 38$

n	r_n	n	r_n	n	r_n	n	r_n
1	0	2	0	3	0	4	0
5	1	6	1	7	0	8	0
9	0	10	1	11	1	12	0
13	1	14	3	15	3	16	1
17	1	18	4	19	5	20	2
21	1	22	5	23	7	24	4
25	1	26	5	27	12	28	9
29	3	30	6	31	14	32	13
33	6	34	7	35	20	36	23
37	11	38	10				

2) для $n \geq 39$ имеем $r_n \geq 11$.

Определение. Пусть a – свободное от квадратов нечётное натуральное число, b – натуральное число такое, что $a + 2b \equiv 3 \ (mod\ 4)$. Тогда *(a; b)-серией* назовём множество:

$$\{x \mid x \text{ нечётное натуральное число и } x > b\}.$$

Теорема 2. *Пусть a – свободное от квадратов нечётное натуральное число, b – натуральное число такое, что $a + 2b \equiv 3 \ (mod\ 4)$. Пусть также $x,\ x - 2k,\ x - 2k_1,\ x - 2k_2$ – элементы (a; b)-серии. Тогда справедливы следующие два уравнения:*

1) если для некоторого натурального y и некоторого целого s выполняются условия:

$$x(2b - x) = ay^2 \quad \text{и} \quad (x - 2k)(2b - x + 2k) = a(y + 2s)^2,$$

то

$$b^2 = \left(1 + \frac{as^2}{k^2}\right)(k^2 + a(y + s)^2) = (k^2 + as^2)\left(1 + \frac{a(y + s)^2}{k^2}\right)$$

(уравнение произведения).

В частности, для $k = 1$

$$b^2 = (1 + as^2)(1 + a(y + s)^2);$$

2) если для некоторых натуральных y, y_1 и y_2 выполняются условия:

$$x(2b - x) = ay^2, \quad (x - 2k_1)(2b - x + 2k_1) = a{y_1}^2 \ и$$
$$(x - 2k_2)(2b - x + 2k_2) = a{y_2}^2,$$

то

$$a(k_1{y_2}^2x - k_2{y_1}^2 + (k_2 - k_1)y^2) = 4k_1k_2(k_2 - k_1)$$

(уравнение суммы).

В частности, a делит $k_1k_2(k_2-k_1)$ для $k_2>k_1>0$.

Итак, если в *(a; b)*-серии есть два квадрата, то из условия 4 леммы получаются существенные ограничения на значения a и b.

Далее будем использовать обозначения из теоремы 2.

Следствие. Если $k=1$, то $a\equiv 3\ (mod\ 4)$.

Построим бесконечное число разбиений $[x, 2b-x, 3]$, для которых можно найти такие y, что:

$$x(2b-x) = 3y^2 \quad \text{и} \quad (x-2)(2b-x+2) = 3(y+2)^2.$$

Эти условия означают, что в произведениях элементов *(3; b)*- серии существуют два последовательных квадрата.

Пусть последовательности $\{v_n\}_{n=1}^{\infty}$ и $\{w_n\}_{n=1}^{\infty}$ определены так, что:

$$v_n+\sqrt{3}w_n=\left(7+4\sqrt{3}\right)^2.$$

Тогда:

$$\{v_n\}_{n=1}^{\infty}=\{7,97,1351,18817,262087,\dots\}$$
$$\{w_n\}_{n=1}^{\infty}=\{4,56,780,10864,151316,\dots\}.$$

Далее:

$$b=2v_n\epsilon\{14{,}194,2702,37634,524174,\dots\}$$
$$y=w_n\epsilon\{3{,}55,779{,}10863{,}151315,\dots\}$$
$$x=2v_n+3w_n+1\epsilon\{27,363,5043,70227,978123,\dots\}$$
$$2b-x=2v_n-(3w_n+1)\epsilon\{1,25,361,\ \ 5041,\ \ 70225,\dots\}$$
$$3x(2b-x)\epsilon\{81=9^2,27225=165^2,\quad 5461569=2337^2,$$
$$1062042921=32589^2,\quad 206066063025=453945^2,\dots\}$$
$$3(x-2)(2b-x+2)\epsilon\{225=15^2,\quad 29241=171^2,5489649=2343^2,$$
$$1062434025=32595^2,\quad 206071510401=453951^2,\dots\}$$
$$x(2b-x)\epsilon\{27=3\cdot 3^2,\quad 9075=3\cdot 55^2,\quad 1820523=3\cdot 779^2,$$
$$354014307=3\cdot 10863^2,\quad 68688687675=3\cdot 151317^2,\dots\}$$
$$(x-2)(2b-x+2)\epsilon\{75=3\cdot 5^2,9747=3\cdot 57^2,1829883=3\cdot 781^2,$$
$$354144675=3\cdot 10865^2,\ 68690503467=3\cdot 151317^2,\dots\}.$$

Таким образом, имеем следующие разбиения вида

$([3,x,2b-x],[3,x-2,2b-x+2])$:

$$([3{,}27{,}1],[3{,}25{,}3]),([3{,}363{,}25],[3{,}361{,}27]),([3{,}5043{,}361],[3{,}5041{,}363]),$$
$$([3{,}70227{,}5041],[3{,}70225{,}5043]),\dots$$

Библиографический список

1. Ferraz, R.A. Simple components and central units in group rings // J. Algebra. – 2004. – Vol. 279, no. 1. – Pp. 191–203.

2. Каргаполов, А.В. Параллельный алгоритм для нахождения рангов групп центральных единиц целочисленных групповых колец знакопеременных групп / А.В. Каргаполов // Алгоритмы и программные средства параллельных вычислений. Сб. научных трудов. – Екатеринбург: УрО РАН, 2009. – № 10. – С. 8–12.

3. Каргаполов, А.В. Центральные единицы целочисленных групповых колец знакопеременных групп: дис. ... канд. физ.-мат. Наук / А.В. Каргаполов. – Челябинск, 2012. – 87 с.

К содержанию

УДК 004.657

ОБРАБОТКА ЗАПРОСОВ К СВЕРХБОЛЬШИМ БАЗАМ ДАННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ КОЛОНОЧНЫХ ХЕШ-ИНДЕКСОВ[1]

Е.В. Иванова

В связи с появлением задач, требующих обработки сверхбольших баз данных, необходимы новые эффективные методы параллельной обработки и анализа таких объемов данных на многопроцессорных вычислительных системах. В работе рассматриваются индексные структуры специального вида, названные распределенными колоночными хеш-индексами. Данные структуры основываются на использовании колоночного представления и предназначены для обработки запросов на основе фрагментного параллелизма. Описывается декомпозиция реляционных операций пересечения и естественного соединения, выполняемая с использованием распределенных колоночных хеш-индексов.

Ключевые слова: сверхбольшие базы данных; параллельная обработка данных; колоночный хеш-индекс; доменно-интервальная фрагментация.

Введение

В настоящее время научная и практическая деятельность человека выдвигает все новые масштабные задачи, требующие обработки сверхбольших баз данных. Согласно прогнозам аналитической компании IDC к 2020 г. количество данных в мире достигнет 40 Зеттабайт [1]. Современные технологии баз данных не могут обеспечить обработку столь крупных объемов данных. По оценке IDC из всего объема потенциально полезных данных в 2012 г. всего лишь 3 % данных были проиндексированы и только 0,5 % были подвергнуты анализу.

[1] Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 12-07-00443 а.

Фактически единственным эффективным решением проблемы хранения и обработки сверхбольших баз данных является использование параллельных систем баз данных, обеспечивающих параллельную обработку запросов на многопроцессорных вычислительных системах [2–5].

Для решения проблемы обработки сверхбольших баз данных в статье предлагаются индексные структуры специального вида, которые называются распределенными колоночными хеш-индексами. Хеш-индексы строятся и применяются на основе подхода, описанного в работе [6].

1. Хеш-индекс

Хеш-индекс позволяет использовать один колоночный индекс для индексирования нескольких атрибутов одного отношения.

Пусть задано отношение $R(A^*, B_1, \dots, B_u, C, \dots)$. Пусть задана хеш-функция $h : \mathfrak{D}_{B_1} \times \dots \times \mathfrak{D}_{B_u} \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$. Хеш-индексом $I_h(A^*, H)$ атрибутов $B_1, \dots, B_u$ отношения R будем называть упорядоченное отношение, удовлетворяющее тождеству:

$$I_h = \tau_H\left(\pi_{A,h(B_1,\dots,B_u)\to H}\left(R\right)\right).$$

Хеш-индекс обладает следующим основным свойством:

$$\forall r', r'' \in R\left(r'.B_1 = r''.B_1 \wedge \dots \wedge r'.B_u = r''.B_u \Rightarrow h\left(r'.B_1, \dots, r'.B_u\right) = h\left(r''.B_1, \dots, r''.B_u\right)\right). \quad (1)$$

Заметим, что обратная импликация не обязательно имеет место. Из (1) непосредственно вытекает следующее свойство хеш-индекса:

$$\forall r', r'' \in R\left(h\left(r'.B_1, \dots, r'.B_u\right) \neq h\left(r''.B_1, \dots, r''.B_u\right) \Rightarrow r'.B_1 \neq r''.B_1 \vee \dots \vee r'.B_u \neq r''.B_u\right).$$

Фрагментация хеш-индекса осуществляется на основе доменно-интервального принципа с помощью функции фрагментации $\varphi_{I_h}: I_h \to \{0, \dots, k-1\}$ определенной следующим образом:

$$\forall x \in I_h\left(\varphi_{I_h}(x) = \varphi_{\mathbb{Z}_{\geq 0}}(x.H)\right),$$

где $\varphi_{\mathbb{Z}_{\geq 0}}: \mathbb{Z}_{\geq 0} \to \{0, \dots, k-1\}$ – доменная функция фрагментации для домена $\mathfrak{D}_H = \mathbb{Z}_{\geq 0}$.

2. Декомпозиция операции пересечения

Пусть заданы два отношения $R(A^*, B_1, \dots, B_u)$ и $S(A^*, B_1, \dots, B_u)$, имеющие одинаковый набор атрибутов. Пусть имеется два хеш-индекса $I_{R,h}$ и $I_{S,h}$ для атрибутов $B_1, \dots, B_u$ отношений R и S, построенные с помощью одной и той же хеш-функции $h : \mathfrak{D}_{B_1} \times \dots \times \mathfrak{D}_{B_u} \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$. Пусть для этих индексов задана доменно-интервальная фрагментация степени k:

$$I_{R,h} = \bigcup_{i=0}^{k-1} I_{R,h}^{i};$$

$$I_{S,h} = \bigcup_{i=0}^{k-1} I_{S,h}^{i}.$$

Положим:

$$P^{i} = \pi_{I_{R,h}^{i}.A \to A_R,\, I_{S,h}^{i}.A \to A_S}\left(I_{R,h}^{i} \underset{(I_{R,h}^{i}.H = I_{S,h}^{i}.H)}{\bowtie} I_{S,h}^{i} \right)$$

для всех $i = 0,\ldots,k-1$. Определим:

$$P = \bigcup_{i=0}^{k-1} P^{i}.$$

Положим:

$$Q = \left\{ \&_R(p.A_R) \mid p \in P, \left(\&_R(p.A_R).B_1,\ldots,\&_R(p.A_R).B_u\right) = \left(\&_S(p.A_S).B_1,\ldots,\&_S(p.A_S).B_u\right) \right\}.$$

Тогда:

$$\delta\left(\pi_{B_1,\ldots,B_u}(Q)\right) = \delta\left(\pi_{B_1,\ldots,B_u}(R)\right) \cap \delta\left(\pi_{B_1,\ldots,B_u}(S)\right).$$

3. Декомпозиция операции естественного соединения

Пусть заданы два отношения:

$$R\left(A^{*}, B_1,\ldots,B_u, C_1,\ldots,C_v\right)$$

и

$$S\left(A^{*}, B_1,\ldots,B_u, D_1,\ldots,D_w\right).$$

Пусть имеется два хеш-индекса $I_{R,h}$ и $I_{S,h}$ для атрибутов $B_1, \ldots, B_u$ отношений R и S, построенные с помощью одной и той же хеш-функции $h : \mathfrak{D}_{B_1} \times \ldots \times \mathfrak{D}_{B_u} \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$. Пусть для этих индексов задана доменно-интервальная фрагментация степени k:

$$I_{R,h} = \bigcup_{i=0}^{k-1} I_{R,h}^{i};$$

$$I_{S,h} = \bigcup_{i=0}^{k-1} I_{S,h}^{i}.$$

Положим:

$$P^{i} = \pi_{I_{R,h}^{i}.A \to A_R,\, I_{S,h}^{i}.A \to A_S}\left(I_{R,h}^{i} \underset{(I_{R,h}^{i}.H = I_{S,h}^{i}.H)}{\bowtie} I_{S,h}^{i} \right)$$

для всех $i = 0,\ldots,k-1$. Определим:

$$P = \bigcup_{i=0}^{k-1} P^i .$$

Положим:

$$Q = \{(\&_R(p.A_R).B_1,\ldots,\&_R(p.A_R).B_u,\&_S(p.A_S).D_1,\ldots,\&_S(p.A_S).D_w) \mid \\ p \in P,(\&_R(p.A_R).B_1,\ldots,\&_R(p.A_R).B_u) = (\&_S(p.A_S).B_1,\ldots,\&_S(p.A_S).B_u)\}.$$

Тогда:

$$Q = \pi_{*\setminus A}(R) \bowtie \pi_{*\setminus A}(S).$$

Заключение

В статье приведено формальное описание распределенных колоночных хеш-индексов, предназначенных для параллельной обработки запросов к сверхбольшим базам данных на основе фрагментного параллелизма. Работа содержит описание определения и свойств колоночного хеш-индекса, и его доменно-интервальной фрагментации. Рассмотрены декомпозиции реляционных операций, выполняемые с использованием распределенных колоночных хеш-индексов: пересечение и естественное соединение.

Библиографический список

1. Gantz J., Reinsel D. IDC. The Digital Universe in 2020: Big Data, Bigger Digital Shadows, and Biggest Growth in the Far East. Report, 2012. – URL: http://www.emc.com/collateral/analyst-reports/idc-the-digital-universe-in-2020.pdf.

2. Соколинский, Л.Б. Параллельные системы баз данных / Л.Б. Соколинский. – М.: Издательство Московского университета, 2013. – 179 с.

3. Костенецкий, П.С. Моделирование иерархических многопроцессорных систем баз данных / П.С. Костенецкий, Л.Б. Соколинский // Программирование. – 2013. – Т. 39, № 1. – С. 2–33.

4. Костенецкий, П.С. Обработка запросов на кластерных вычислительных системах с многоядерными ускорителями / П.С. Костенецкий // Вестник ЮУрГУ. Серия «Вычислительная математика и информатика». – 2012. – № 47 (306). – Вып. 2. – С. 59–67.

5. Пан, К.С. Разработка параллельной СУБД на основе последовательной СУБД PostgreSQL с открытым исходным кодом / К.С. Пан, М.Л. Цымблер // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 18(277). – Вып. 12. – С. 112–120.

6. Иванова, Е.В. Использование распределенных колоночных индексов для выполнения запросов к сверхбольшим базам данных / Е.В. Иванова, Л.Б. Соколинский // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2014): труды международной научной конференции (1–3 апреля 2014 г., г. Ростов-на-Дону). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2014. – С. 270–275.

К содержанию

УДК 004.4.021

МЕТОДЫ УПРАВЛЕНИЯ РЕСУРСАМИ В РАСПРЕДЕЛЕННЫХ ПРОБЛЕМНО-ОРИЕНТИРОВАННЫХ СРЕДАХ*

А.В. Шамакина

Статья посвящена созданию алгоритма планирования ресурсов в распределенных проблемно-ориентированных средах. Разработанный алгоритм позволяет планировать запуск одной задачи на нескольких процессорных ядрах с учетом ограничений по масштабируемости данной задачи. Вычислительное задание, представляющее собой поток работ, моделируется в виде нагруженного, помеченного ориентированного графа задания.

Ключевые слова: алгоритмы планирования; модель задания; ярусно-параллельная форма графа; кластеризация.

На сегодняшний день предложено большое количество алгоритмов планирования [1–7], ориентированных на использование в распределенных вычислительных средах. Только очень небольшая часть этих алгоритмов учитывает проблемно-ориентированную специфику потоков работ в сложных приложениях, которая выражается в указании времени выполнения задачи и объеме передаваемых данных. Одним из наиболее существенных достижений в этой области является алгоритм DSC [5]. Алгоритм планирования DSC представляет задание в виде ориентированного графа, узлами которого являются задачи, а дуги соответствуют потокам данных. При планировании алгоритм DSC учитывает время выполнения задач и объем передаваемых данных. Существенным ограничением данного алгоритма применительно к современным кластерным вычислительным системам является то, что каждая задача может выполняться только на одном процессорном ядре.

Нами разработан новый алгоритм планирования POS (Problem-Oriented Scheduling) для распределенных кластерных вычислительных сред, который в отличие от алгоритма DSC позволяет планировать запуск одной задачи на нескольких процессорных ядрах с учетом ограничений по масштабируемости данной задачи.

Перед описанием алгоритма планирования POS приведем формальную модель задания, для которой нам понадобятся следующие базовые определения.

Ориентированным графом называется четверка $G = \langle V, E, init, fin \rangle$, где V – множество вершин; E – множество дуг; $init: E \to V$ – функция, определяющая *начальную вершину* дуги; $fin: E \to V$ – функция, определяющая *конечную вершину* дуги.

* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 14-07-31159.

Вершина $v_1, v_2 \in V$ называются *смежными*, если:

$$\exists e \in E \left(\left(v_1 = init(e) \ \& \ v_2 = fin(e) \right) \vee \left(v_1 = fin(e) \ \& \ v_2 = init(e) \right) \right), \quad (2)$$

другими словами, существует дуга e, соединяющая эти вершины. Если $v_1 = init(e) \ \& \ v_2 = fin(e)$, мы будем обозначать это следующим образом: $(v_1, v_2) = e \in E$ и говорить, что вершины v_1, v_2 *инцидентны* дуге e.

Пусть $v_1, v_2 \in V$ и $n \geq 1$. Упорядоченная последовательность дуг:

$$(e_1, e_2, \dots, e_n) \in E^n$$

называется *путем длины* n, от вершины v_1 к вершине v_2, если $v_1 = init(e_1)$, $v_2 = fin(e_n)$ и $fin(e_i) = init(e_{i+1})$ для всех $i \in \{1, \dots, n-1\}$. Если $(e_1, e_2, \dots, e_n) \in E^n$ – путь от вершины v_1 к вершине v_2, то *обратным путем* от вершины v_2 к вершине v_1 называется упорядоченная последовательность дуг $(e_n, e_{n-1}, \dots, e_1) \in E^n$. Путь $(e_1, e_2, \dots, e_n)$ называется *простым*, если $init(e_1), init(e_2), \dots, init(e_n)$ все различны между собой и если $fin(e_1), fin(e_2), \dots, fin(e_n)$ тоже все различны. *Циклом* называется простой путь от некоторой вершины к ней самой. Ориентированный граф называется *ациклическим*, если он не содержит циклов [1].

Вершины $v_1, v_2 \in V$ называются *независимыми*, если не существует прямого или обратного пути от вершины v_1 к вершине v_2. В противном случае, вершины v_1, v_2 *зависимы*.

Пусть задан ориентированный граф $G = \langle V, E, init, fin \rangle$. *Взвешиванием графа* G будем называть функцию $\delta: E \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$. *Разметкой графа* G будем называть функцию:

$$\gamma : V \to \mathbb{N}^2. \quad (3)$$

Теперь мы готовы дать формальное определение задания в распределенной вычислительной среде.

Графом задания называется размеченный взвешенный ориентированный ациклический граф $G = \langle V, E, init, fin, \delta, \gamma \rangle$, где V – множество вершин, соответствующих задачам, E – множество дуг, соответствующих потокам данных.

Вес $\delta(e)$ дуги e определяет объем данных, который необходимо передать по дуге e от задачи, ассоциированной с вершиной $init(e)$ к задаче, ассоциированной с вершиной $fin(e)$. Метка:

$$\gamma(v) = (m_v, t_v) \quad (4)$$

определяет максимальное количество процессорных ядер m_v, на которых задача v имеет ускорение, близкое к *линейному*, и время t_v выполнения задачи v на одном ядре. Данная модель предполагает, что *вычислительная стоимость* $\chi(v, j_v)$ задачи v на j_v процессорных ядрах определяется следующей формулой:

$$\chi(v, j_v) = \begin{cases} t_v/j_v\,, & \text{если } 1 \le j \le m_v; \\ t_v/m_v\,, & \text{если } m_v < j_v. \end{cases} \tag{5}$$

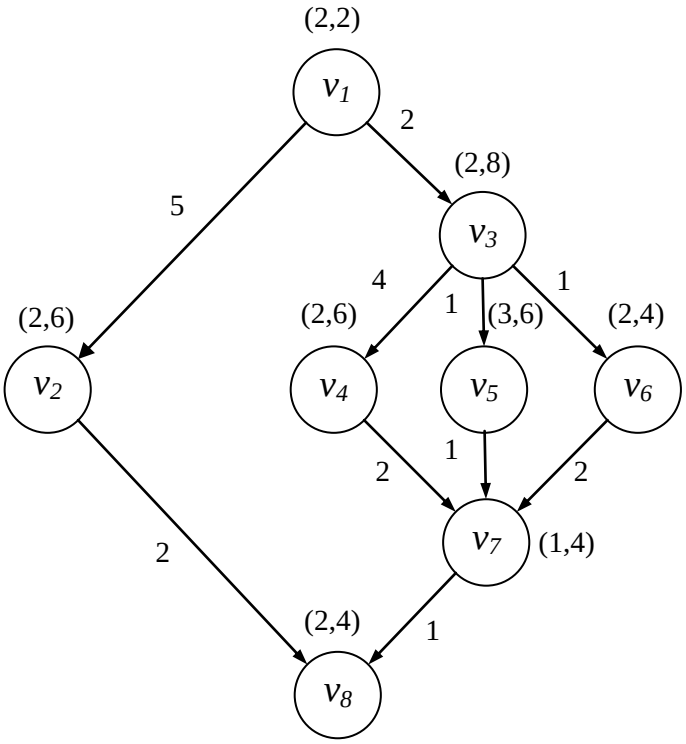


Рис. 1. Граф задания

Другими словами, при наращивании количества процессорных ядер в диапазоне от 1 до m_v, мы будем получать прямо пропорциональное уменьшение времени счета; при увеличении количества ядер в интервале от m_v до $+\infty$ ускорение будет отсутствовать.

На рис. 1 приведен пример графа задания, содержащего 8 вершин. Для каждой из вершин указана метка в виде пары (m_v, t_v). Каждой дуге графа сопоставляется вес – объем данных $\delta(e)$, передаваемых по данной дуге.

Вычислительным узлом P называется упорядоченное множество процессорных ядер $\{c_0, \dots, c_{q-1}\}$.

Вычислительной системой называется упорядоченное множество вычислительных узлов $\mathfrak{P} = \{P_0, \dots, P_{k-1}\}$. В реальности вычислительная система может являться распределенной вычислительной системой, объединяющей несколько вычислительных кластеров, каждый из которых является отдельным узлом этой системы.

Кластеризацией называется однозначное отображение $\omega: V \to \mathfrak{P}$ множества вершин V графа задания G на множество вычислительных узлов $\mathfrak{P}$.

Пусть задана вычислительная система $\mathfrak{P} = \{P_0, \dots, P_{k-1}\}$, состоящая из k узлов. *Кластер* W_i – это подмножество всех вершин, отображаемых на вычислительный узел $P_i \in \mathfrak{P}$:

$$W_i = \{v \in V \mid \omega(v) = P_i \in \mathfrak{P}\}\,. \tag{6}$$

Имеем:

$$W_i \cap W_j = \emptyset \text{ для } i \neq j; \quad (7)$$

$$V = \bigcup_{i=0}^{k-1} W_i. \quad (8)$$

Кластеризация называется *нелинейной*, если существуют две независимые вершины, которые отображаются на один вычислительный узел. В противном случае – кластеризация называется *линейной* [4]. На рис. 2 приведены примеры линейной и нелинейной кластеризации для графа задания, изображенного на рис. 2: (а) линейная кластеризация с четырьмя кластерами $\{v_1, v_2, v_8\}$, $\{v_3, v_4, v_7\}$, $\{v_5\}$ и $\{v_6\}$; (б) нелинейная кластеризация с кластерами $\{v_1, v_2\}$, $\{v_3, v_4, v_5, v_6, v_7\}$ и $\{v_8\}$.

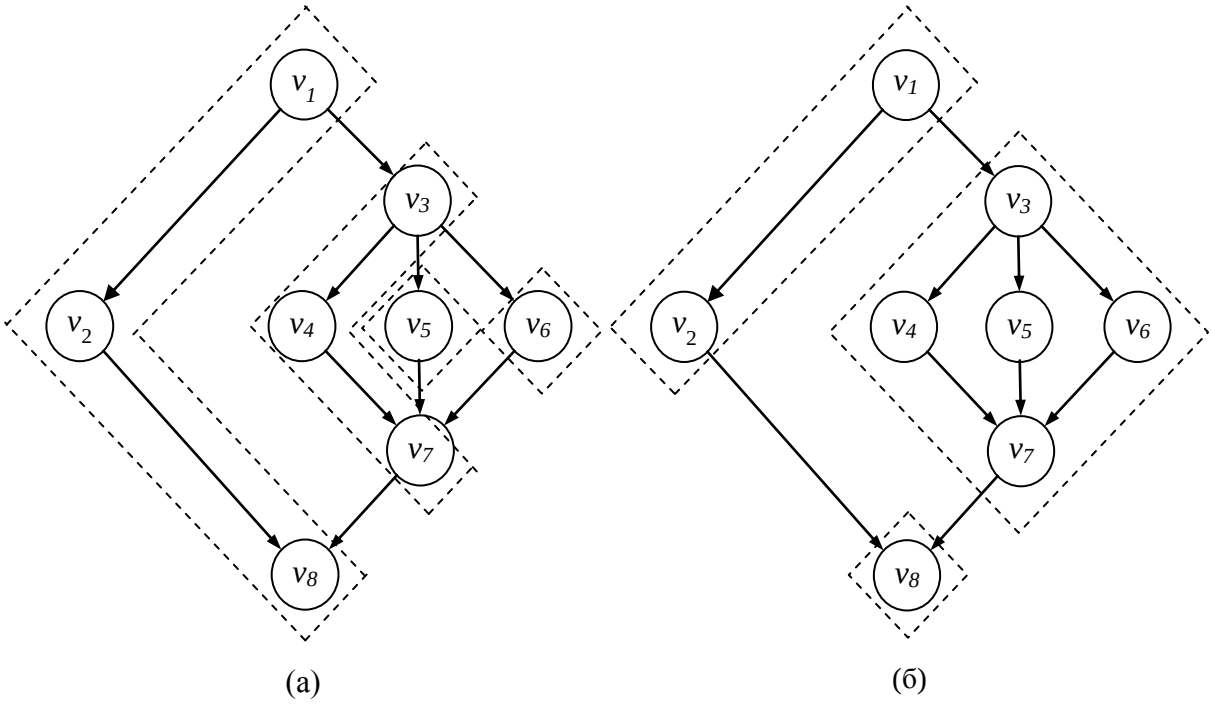


Рис. 2. (а) Линейная кластеризация; (б) нелинейная кластеризация

Пусть задан граф задания $G = \langle V, E, init, fin, \delta, \gamma \rangle$, для которого определена функция кластеризации $\omega(v)$. Будем называть такой граф *кластеризованным* и обозначать как $G = \langle V, E, init, fin, \delta, \gamma, \omega \rangle$.

В рамках модели мы предполагаем, что время передачи любого объема данных между узлами, принадлежащими одному кластеру, близко к нулю, а время передачи данных между узлами, принадлежащими разным кластерам, пропорционально объему передаваемых данных с коэффициентом 1. В соответствии с эти мы можем определить функцию $\sigma: E \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$, вычисляющую *коммуникационную стоимость* (время) передачи данных по дуге $e \in E$, следующим образом:

$$\sigma(e) = \begin{cases} 0, & \text{если } \omega\big(init(e)\big) = \omega\big(fin(e)\big); \\ \delta(e), & \text{если } \omega\big(init(e)\big) \neq \omega\big(fin(e)\big). \end{cases} \quad (9)$$

Пусть задан кластеризованный граф $G = \langle V, E, init, fin, \delta, \gamma, \omega \rangle$. *Расписанием* называется отображение $\xi: V \to \mathbb{Z}_{\geq 0} \times \mathbb{N}$, которое произвольной вершине $v \in V$ сопоставляет двойку чисел:

$$\xi(v) = (\tau_v, j_v), \tag{10}$$

где τ_v определяет время запуска задачи v, j_v – количество процессорных ядер, выделяемых задаче v. Обозначим через s_v – время останова задачи v. Имеем:

$$s_v = \tau_v + \chi(v, j_v)\,, \tag{11}$$

где χ – функция временной сложности, определенная с помощью формулы (5). Расписание называется *корректным*, если оно удовлетворяет следующим условиям:

$$\forall\, e \in E\ \left(\tau_{fin(e)} \geq \tau_{init(e)} + \chi\big(init(e), j_{init(e)}\big) + \sigma(e)\right); \tag{12}$$

$$\forall\, v \in V\ (\, j_v \leq m_v)\,; \tag{13}$$

$$\forall t \in \mathbb{N}\left(\forall i \in [0,\ldots,k-1]\left(\sum_{\substack{v \in W_i \wedge \\ \tau_v < t \leq s_v}} j_v \leq |P_i|\right)\right). \tag{14}$$

Условие (12) означает, что для любых двух смежных вершин $v_1 = init(e)$ и $v_2 = fin(e)$ время запуска v_2 не может быть меньше суммы следующих величин: время запуска v_1, время выполнения v_1, коммуникационная стоимость дуги e. Условие (13) означает, что количество ядер, выделяемое задаче v_1, не превышает границы линейной масштабируемости, заданной разметкой γ в контексте формулы (4). Условие (14) означает, что в любой момент времени t общее количество процессорных ядер, выделяемых задачам на узле с номером i, не может превосходить количества ядер на этом узле. В дальнейшем мы будем рассматривать только корректные расписания, если явно не оговорено противное.

Планом выполнения расписания ξ называется множество многозначных отображений:

$$\alpha = \{\alpha_i: W_i \to P_i | i = 0, \ldots, k-1\},$$

удовлетворяющих следующим условиям $\forall i = 0, \ldots, k-1$ и $(\tau_v, j_v) := \xi(v)$:

$$\forall\, v \in W_i\ (\, j_v = |\alpha_i(v)|); \tag{15}$$

$$\forall\, v_1, v_2 \in W_i\ \big(v_1 \neq v_2 \wedge [\tau_{v_1}, s_{v_1}] \cap [\tau_{v_2}, s_{v_2}] \neq \emptyset\ \Rightarrow\ \alpha_i(v_1) \cap \alpha_i(v_2) = \emptyset\big). \tag{16}$$

Условие (15) означает, что количество процессорных ядер, выделяемых задаче v в соответствии с планом α, равно количеству процессорных ядер, указанных для этой задачи в расписании ξ. Условие (16) означает, что, если в соответствии с расписанием ξ задачи v_1, и v_2 пересекаются по времени своего выполнения, то им должны выделяться различные процессорные ядра (мы предполагаем, что на одном процессорном ядре в каждый момент времени не может выполняться более одной задачи).

Кластеризованный граф $G = \langle V, E, init, fin, \delta, \gamma, \omega \rangle$ с заданными расписанием ξ и соответствующим планом α будем называть *распланированным* и обозначать как $G = \langle V, E, init, fin, \delta, \gamma, \omega, \xi, \alpha \rangle$.

Ярусно-параллельной формой (ЯПФ) [9] называется разбиение множества вершин V ориентированного ациклического графа $G = \langle V, E, init, fin \rangle$ на перенумерованные подмножества (ярусы) L_i $(i = 1, \dots, r)$, удовлетворяющие следующим свойствам:

$$\left.\begin{aligned} & V = \bigcup_{i=1}^{r} L_i; \\ & \forall i \neq j \in \{1, \dots r\} \left(L_i \cap L_j = \varnothing \right); \\ & \forall (v_1, v_2) \in E \left(\forall i \neq j \in \{1, \dots r\} \left(v_1 \in L_i \wedge v_2 \in L_j \Rightarrow i < j \right) \right). \end{aligned}\right\} \quad (17)$$

Последнее условие означает, что если из вершины v_1 идет дуга в вершину v_2, то вершина v_2 должна располагаться на ярусе с большим номером по отношению к ярусу, на котором располагается вершина v_1. Количество вершин в ярусе L_i называется его *шириной*. Количество ярусов в ЯПФ называется ее *высотой*, а максимальная ширина ее ярусов – *шириной ЯПФ*. ЯПФ называется *канонической* [10], если все *входные* (не имеющие входных дуг) вершины принадлежат ярусу с номером 1, и максимальная длина пути, оканчивающегося в вершине, принадлежащей ярусу *k*, равна *k-1*.

Пусть в распланированном графе $G = \langle V, E, init, fin, \delta, \gamma, \omega, \xi, \alpha \rangle$ задан простой путь $y = (e_1, e_2, \dots, e_n)$. *Стоимостью* пути $u(y)$ называется величина:

$$u(y) = \chi\left(fin(e_n), j_{fin(e_n)} \right) + \sum_{i=1}^{n} \left(\chi\left(init(e_i), j_{init(e_i)} \right) + \max\left(\sigma(e_i), \tau_{fin(e_i)} - s_{init(e_i)} \right) \right), \quad (18)$$

где χ – функция, определяемая формулой (5), значением которой является вычислительная стоимость вершины; σ – функция, определяемая формулой (9), значением которой является коммуникационная стоимость дуги; j_v и τ_v определяется по формуле (10); s_v определяется по формуле (11).

Пусть Y – множество всех простых путей в распланированном графе $G = \langle V, E, init, fin, \delta, \gamma, \omega, \xi, \alpha \rangle$. Простой путь $\bar{y} \in$ Y называется *критическим*, если

$$u(\bar{y}) = \max_{y \in Y} u(y)\,, \quad (19)$$

то есть, критический путь обладает максимальной стоимостью.

Утверждение. Любой критический путь в распланированном графе $G = \langle V, E, init, fin, \delta, \gamma, \omega, \xi, \alpha \rangle$ начинается с входной вершины и заканчивается в *выходной* (не имеющей выходных дуг) вершине.

Доказательство проведем методом от противного. Предположим, что существует критический путь $\bar{y} = (e_1, \dots, e_n) \in Y$, начинающийся не с

входной вершины. Тогда существует дуга e_h такая, что $fin(e_h) = init(e_1)$. Так как G ациклический, то отсюда следует, что $\tilde{y} = (e_h, e_1, \dots, e_n) \in Y$. В силу (3) – (5) и (18) получаем $u(\bar{y}) < u(\tilde{y})$. Это противоречит (19). Аналогичным образом приходим к противоречию при предположении, что существует критический путь, заканчивающийся не в выходной вершине. Утверждение доказано.

На основе приведенной формальной модели задания опишем алгоритм планирования POS для распределенных вычислительных сред.

Алгоритм планирования POS позволяет планировать запуск одной задачи на нескольких процессорных ядрах с учетом ограничений по масштабируемости данной задачи. Вычислительное задание, представляющее собой поток работ, моделируется в виде нагруженного, помеченного ориентированного графа задания. Каждая задача-вершина помечается парой натуральных чисел, первое из которых задает время выполнения задачи на одном процессорном ядре, а второе – максимальное количество ядер, до которого задача демонстрирует ускорение близкое к линейному (near-linear speedup). Веса дуг задают объем данных, передаваемый между задачами. Предложенный алгоритм планирования ресурсов предусматривает построение последовательности конфигураций графа задания с целью минимизации критического пути в данном графе. В начальной конфигурации граф задания разбивается в каноническую ярусно-параллельную форму (ЯПФ). Задаются начальные кластеризация задач по вычислительным кластерам и расписание их выполнения. На следующем шаге происходит переход от начальной конфигурации графа к новой конфигурации с помощью перемещения одной из задач по ярусам ЯПФ и ее присоединения к определенному кластеру. Таким образом, изменяются кластеризация и расписание. Переход к новой конфигурации происходит только в том случае, когда сложность критического пути не увеличивается. Процесс построения последовательности конфигураций завершается, когда все вершины зафиксированы.

Данный алгоритм реализован в виде грид-сервиса системы CAEBeans [11] на платформе UNICORE на языке программирования Java.

Библиографический список

1. Kim S.J. A general approach to multiprocessor scheduling. Report TR-88-04. Department of Computer Science, University of Texas at Austin, 1988.
2. Kim S.J., Browne J.C. A general approach to mapping of parallel computation upon multiprocessor architectures // Proceedings of the International Conference on Parallel Processing, 1988. – Vol. 3. – Pp. 1–8.
3. Sarkar V. Partitioning and Scheduling Parallel Programs for Execution on Multiprocessors. The MIT Press, Cambridge, MA, 1989. – Pp. 215.
4. Gerasoulis A., Yang T. A comparison of clustering heuristics for scheduling directed acyclic graphs on multiprocessors // Journal of Parallel and Distributed Computing, 1992. – Vol. 16, No. 4. Pp. 276–291.

5. Yang T., Gerasoulis A. DSC: Scheduling Parallel Tasks on an Unbounded Number of Processors // IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems. 1994. – Vol. 5, No. 9. – Pp. 951–967.

6. Shamakina A. Brokering Service for Supporting Problem-Oriented Grid Environments // UNICORE Summit 2012 Proceedings, Forschungszentrum Julich, 2012. – Pp. 67–75.

7. Шамакина, А.В. Брокер ресурсов для поддержки проблемно-ориентированных сред / А.В. Шамакина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Вычислительная математика и информатика». – 2012. – № 46(305). Вып. 1. – С. 88–98.

8. Кнут, Д.Э. Искусство программирования. Т. 1. Основные алгоритмы / Д.Э. Кнут. – 3-е изд. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2000. – 720 с.

9. Воеводин, В.В. Математические модели и методы в параллельных процессах / В.В. Воеводин. – Наука, 1986. – 296 с.

10. Воеводин, В.В. Параллельные вычисления / В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. – СПб: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.

11. Радченко, Г.И. Распределенные виртуальные испытательные стенды: использование систем инженерного проектирования и анализа в распределенных вычислительных средах / Г.И. Радченко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2011. – № 37(254). – Вып. 10. – С. 108–121.

К содержанию

УДК 621.315.3:511

ОЦЕНКА ЗНАЧИМОСТИ ФАКТОРОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА ПРОБОЙ ИЗОЛЯЦИИ КАБЕЛЕЙ 6(10) кВ ПО РЕТРОСПЕКТИВНОЙ ИНФОРМАЦИИ

М.Е. Коржова, А.В. Коржов

В статье рассматривается решение задачи построения функции принадлежности нечётких чисел по результатам экспертного опроса, а также алгоритм нахождения собственных чисел матрицы, характеризующей критерии оценок различной важности претендентов путём их попарного сравнения.

Ключевые слова: функция принадлежности нечётких чисел; собственные числа и векторы матрицы.

Одной из острых проблем при диагностических и ремонтно-восстановительных работах в городских кабельных распределительных сетях является качество выполненных работ. Для выбора наилучшей альтернативы электромонтёра-кабельщика при ремонте кабеля (монтаже муфт) ранее нами был использован, в том числе, метод экспертных оценок [1], где была выбрана следующая шкала оценок важности критериев: «Равноценны» – 1; «Чуть важнее» – 2; «Важный» – 3; «Заметно важнее» – 4; «Намного важнее» – 5.

Ставим задачу построения функций принадлежности нечётких чисел, приблизительно равных некоторому чёткому числу, при решении которой используются результаты экспертного опроса.

При построении функции принадлежности чисел, приблизительно равных некоторому числу К, можно использовать функцию:

$$\mu_K(u) = e^{-\alpha(K-u)^2}, \tag{1}$$

где α зависит от требуемой степени нечёткости $\mu_K(u)$ и определяется из выражения:

$$\alpha = \frac{4\ln 0,5}{\beta^2}.$$

Здесь $\beta -$расстояние между точками перехода для $\mu_K(u)$ т.е. точками, в которых функция вида (1) принимает значение 0,5.

Таким образом, задача построение $\mu_K(u)$ для некоторого числа сводится к отысканию параметров *a* и *b*, чтобы затем можно было определить $\beta(x)$, с помощью $\beta(x) - \alpha$ и, используя α, построить $\mu_K(u)$.

Будем пользоваться следующей таблицей (табл.1) расстояний между точками перехода [3]:

Таблица 1

Расстояние между точками перехода

x	*β(x)*
1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 9	0,46·x
5	2,8

Итак, для случая *K*=1 («Равноценны») имеем:

$$\mu_1(x) = e^{-\alpha(1-x)^2},$$

$$\alpha = -\frac{4\ln 0,5}{\beta^2(1)} = -\frac{-4\ln 0,5}{0,46^2} = 12,895;$$

$$a = K - \frac{\beta(K)}{2} = 1 - \frac{0,46}{2} = 0,77; \quad b = K + \frac{\beta(K)}{2} = 1 + \frac{0,46}{2} = 1,23.$$

Точки a и $b -$ точки перехода. Следовательно, функция принадлежности имеет вид:

$$\mu_1(x) = e^{-12,895(1-x)^2}.$$

Графическое представление полученной функции принадлежности представлено на рис. 1.

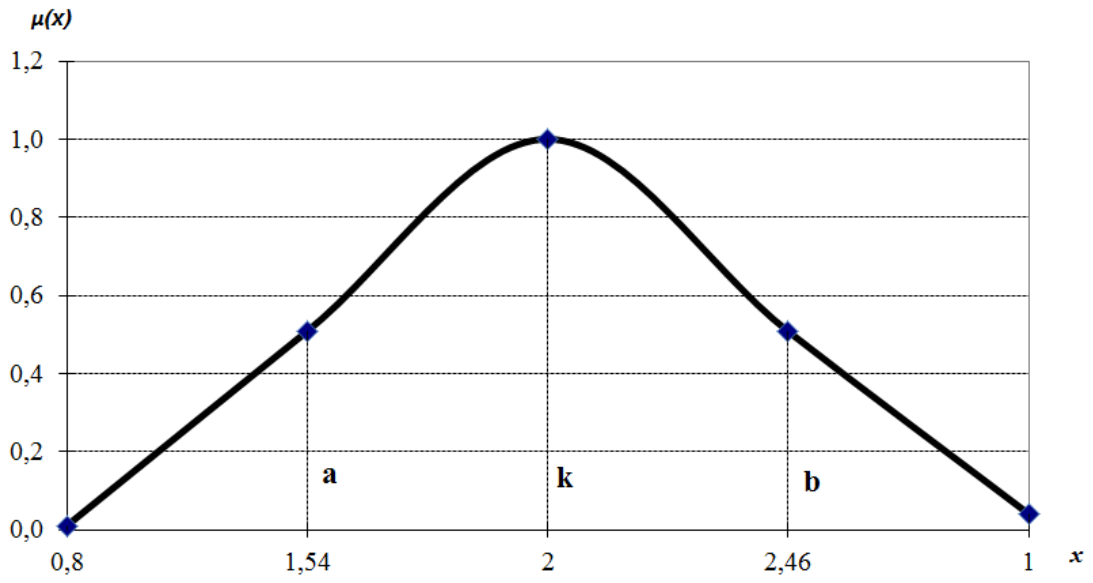


Рис. 1. Функция принадлежности нечёткого множества, соответствующего точечной оценке «РАВНОЦЕННЫ»

Рассматривая и проводя аналогичные вычисления для других экспертных оценок важности попарного сравнения критериев, т.е. для случаев $K = \overline{2,5}$ получим следующие функции принадлежности (табл. 2):

Таблица 2

Функции принадлежности шкалы важности критериев

K	Экспертная оценка	Функция принадлежности
2	«Чуть важнее»	$\mu_2(x) = e^{-3,224(2-x)^2}$.
3	«Важный»	$\mu_3(x) = e^{-1,433(3-x)^2}$.
4	«Заметно важнее»	$\mu_4(x) = e^{-0,806(4-x)^2}$.
5	«Намного важнее»	$\mu_5(x) = e^{-0,348(5-x)^2}$.

Графическое представление функций принадлежности в соответствии с табл. 2 представлены на рис. 2.

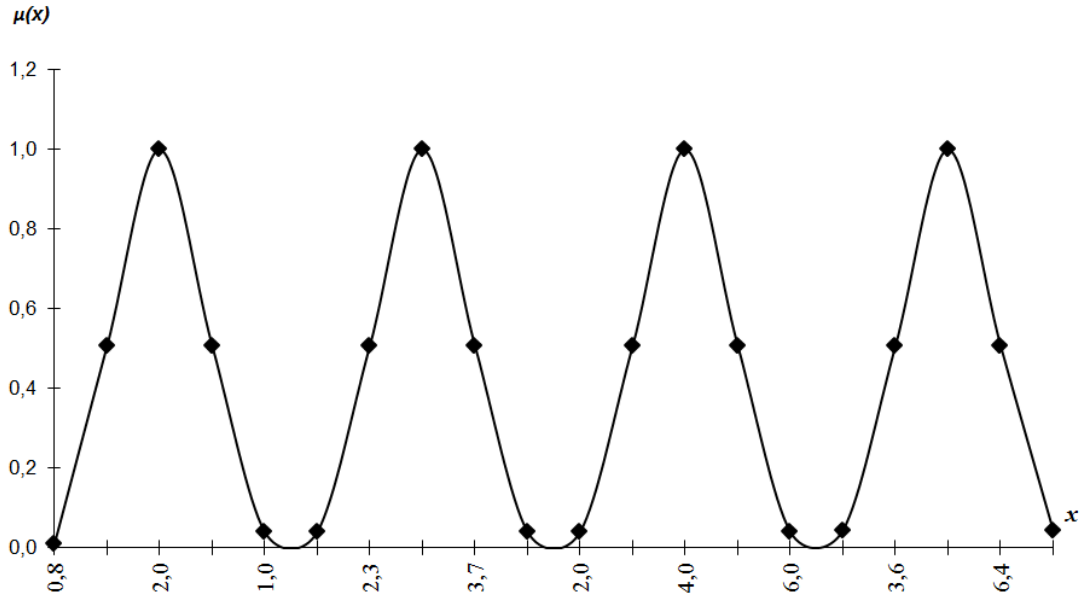


Рис. 2. Графическое представление функции принадлежности шкалы важности критериев

Поскольку реализация любой альтернативы предполагает наступление некоторых последствий, анализ и оценка которых по векторному критерию эффективности полностью характеризует альтернативу, задача выбора наилучшей альтернативы (электромонтера) очень актуальна. Тем более, перспективным направлением разработки методов принятия решений при нечёткой исходной информации является лингвистический подход.

При сопоставлении принятых критериев оценки работы монтёров, которые имеют различную важность, результаты их попарного сравнения представляют матрицей [1], например для одного из рассматриваемых ранее нами случаев.

$$C_1 = \{0,9/a_1; 0,9/a_2; 0,6/a_3\}.$$
$$C_2 = \{0,8/a_1; 0,9/a_2; 0,5/a_3\}.$$
$$C_3 = \{0,7/a_1; 0,9/a_2; 0,3/a_3\}.$$
$$C_4 = \{0,9/a_1; 0,8/a_2; 0,5/a_3\}.$$

Здесь C_1 – профессиональные навыки; C_2 – опыт работы; C_3 – авторитет; C_4 – умение работать с людьми.

$$B = \begin{array}{c} \\ C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} C_1 & C_2 & C_3 & C_4 \end{array} \\ \begin{array}{cccc} 1 & 3 & 2 & 1/5 \\ 1/3 & 1 & 2 & 1/5 \\ 1/2 & 1/2 & 1 & 1/4 \\ 5 & 5 & 4 & 1 \end{array} \end{array}.$$

Далее необходимо найти собственные числа матрицы *B*.

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 3 & 2 & 1/5 \\ 1/3 & 1-\lambda & 2 & 1/5 \\ 1/2 & 1/2 & 1-\lambda & 1/4 \\ 5 & 5 & 4 & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^4 - 4\lambda^3 - \frac{67}{15}\lambda - \frac{6}{5} = 0.$$

Для нахождения $\lambda_{\max}$ можно воспользоваться *Microsoft Excel→Сервис→Поиск решения*. Под значение λ выделили ячейку *B1*, под элементы матрицы *B* диапазон ячеек *B3:E6*. Элементы главной диагонали этой квадратной матрицы содержат формулы:

$$b_{11} - \lambda, b_{22} - \lambda, b_{33} - \lambda, b_{44} - \lambda.$$

соответственно. Под значение определителя отведена ячейка C8 с формулой: *МОПРЕД(B3:E6)*.

Таким образом, получили задачу линейного программирования:

$$\lambda \to \max$$
$$C8 = 0,$$
$$B2 \geq 0.$$

Результаты вычислений в Excel представлены на рис. 3, 4.

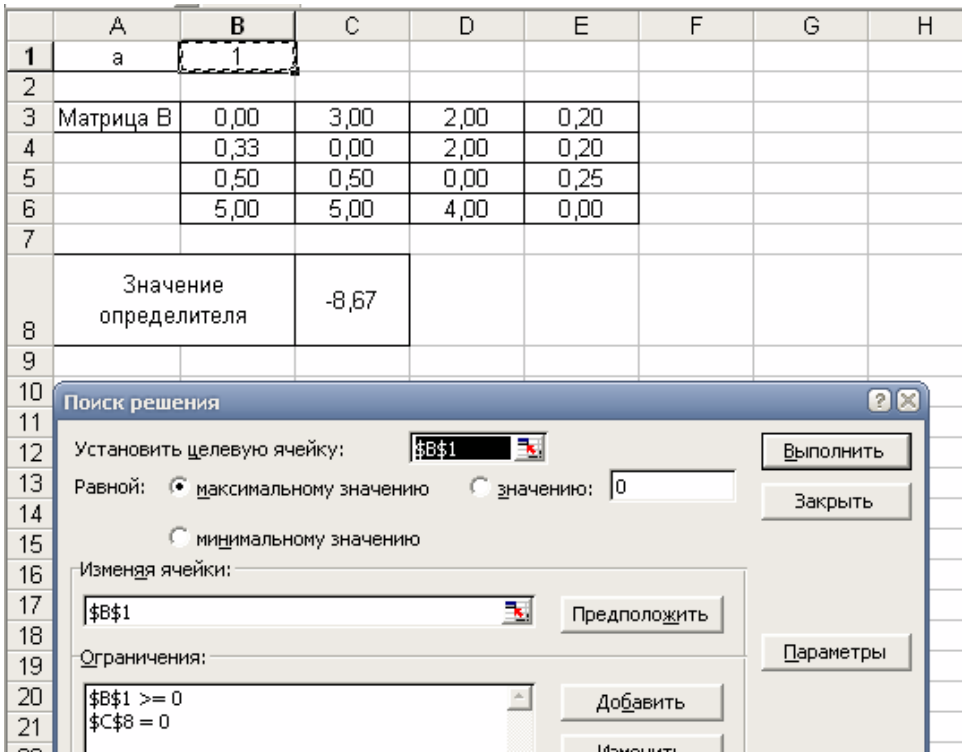
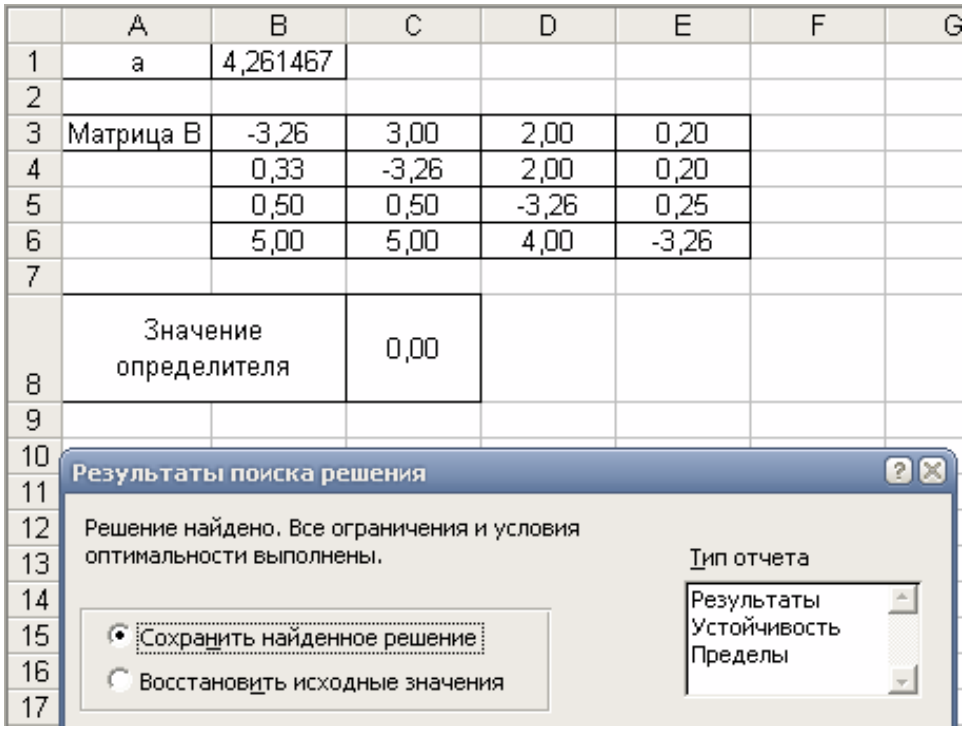


Рис. 3. Запись ЗЛП на поиск наибольшего собственного числа матрицы



	A	B	C	D	E	F	G
1	a	4,261467					
2							
3	Матрица B	-3,26	3,00	2,00	0,20		
4		0,33	-3,26	2,00	0,20		
5		0,50	0,50	-3,26	0,25		
6		5,00	5,00	4,00	-3,26		
7							
8	Значение определителя		0,00				
9							

Рис. 4. Результат поиска собственного числа

Тогда $\lambda_1 = -0,2532$; $\lambda_2 = 4,2615$; $\lambda_{3,4} = -0,00415 \pm 1,054639i$. $\lambda_{\max} = 4,2615$.

Находим собственный вектор матрицы:

$$\begin{cases} -3,2615\omega_1 + 3\omega_2 + 2\omega_3 + 0,2\omega_4 = 0; \\ 1/3\omega_1 - 3,2615\omega_2 + 2\omega_3 + 0,2\omega_4 = 0; \\ 0,5\omega_1 + 0,5\omega_2 - 3,26152\omega_3 + 0,25\omega_4 = 0; \\ 5\omega_1 + 5\omega_2 + 4\omega_3 - 3,2615\omega_4 = 0. \end{cases}$$

Система имеет только нулевое решение. Для нахождения собственного вектора W используем замену одного из уравнений системы условием нормировки: $\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 = 1$. В результате получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} -3,2615\omega_1 + 3\omega_2 + 2\omega_3 + 0,2\omega_4 = 0; \\ \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 = 1; \\ 0,5\omega_1 + 0,5\omega_2 - 3,26152\omega_3 + 0,25\omega_4 = 0; \\ 5\omega_1 + 5\omega_2 + 4\omega_3 - 3,2615\omega_4 = 0. \end{cases}$$

Решая последнюю систему с помощью *Microsoft Excel*→*Сервис*→*Поиск решения* (рис. 5, 6), получаем $\omega_1 = 0,19861$; $\omega_2 = 0,11403$; $\omega_3 = 0,09345$; $\omega_4 = 0,59391$.

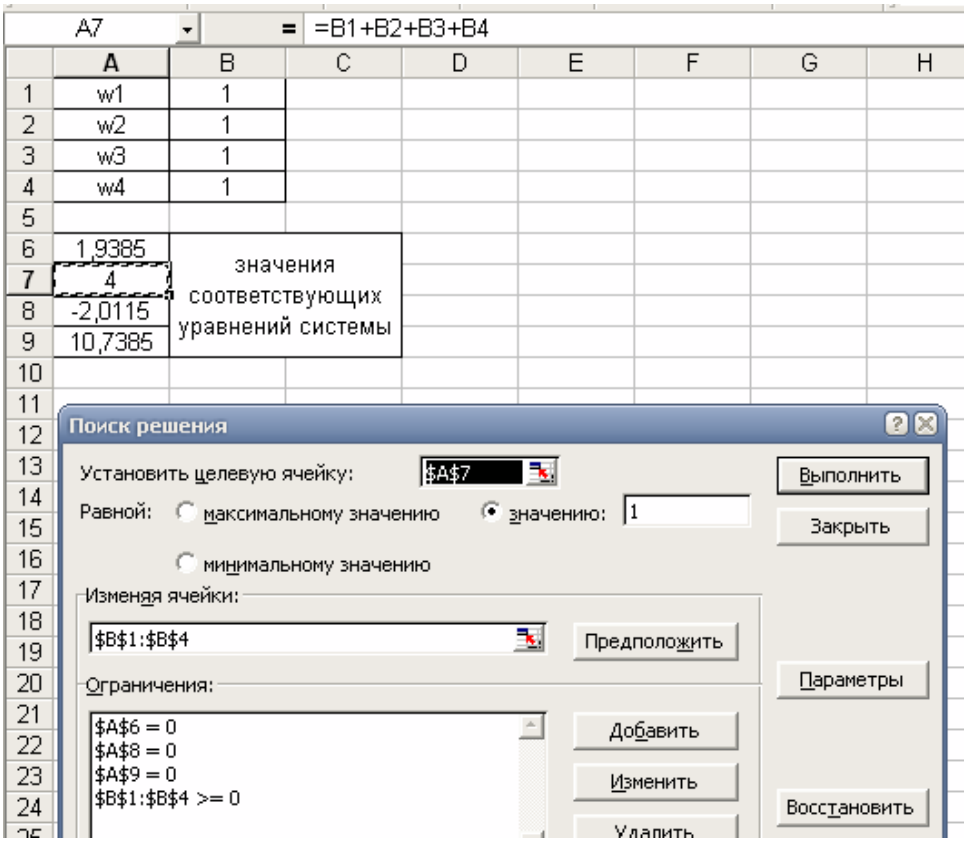


Рис. 5. Поиск решения собственных векторов матрицы

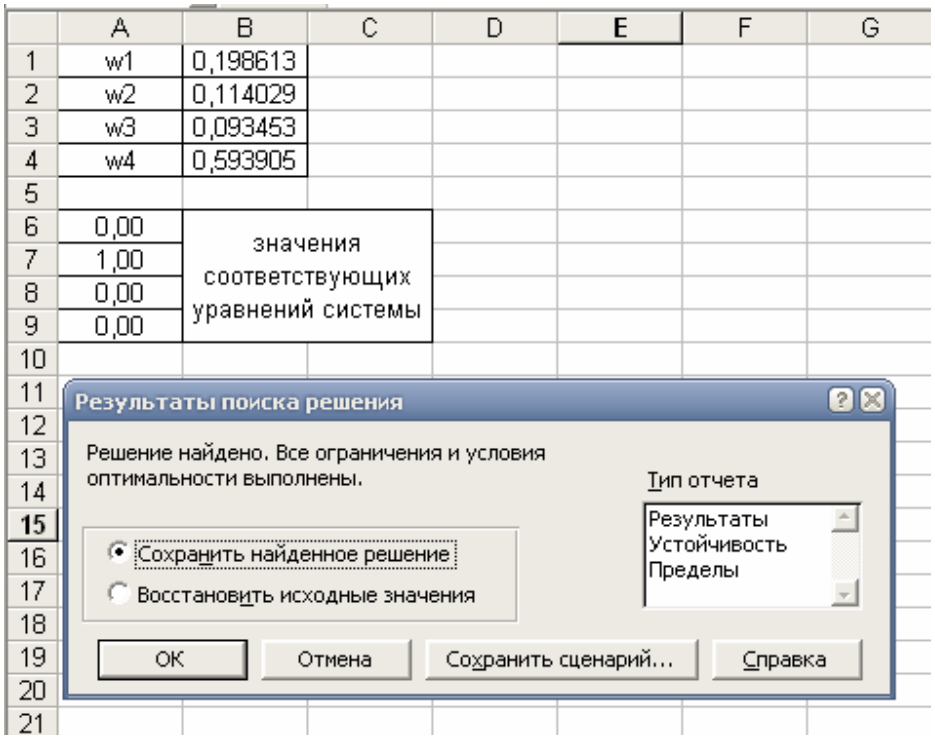


Рис. 6. Результат поиска собственных векторов

Тогда коэффициенты относительной важности критериев: $\alpha_1 = 4 \cdot 0{,}19861 = 0{,}794$; $\alpha_2 = 4 \cdot 0{,}11401 = 0{,}456$; $\alpha_3 = 4 \cdot 0{,}09345 = 0{,}374$; $\alpha_4 = 4 \cdot 0{,}59391 = 2{,}376$.

Модифицируем множества C_i:

$$C_1^{0,794} = \left\{0{,}9^{0,794}/a_1; 0{,}9^{0,794}/a_2; 0{,}6^{0,794}/a_3\right\},$$
$$C_2^{0,456} = \left\{0{,}8^{0,456}/a_1; 0{,}9^{0,456}/a_2; 0{,}5^{0,456}/a_3\right\},$$
$$C_3^{0,374} = \left\{0{,}7^{0,374}/a_1; 0{,}9^{0,374}/a_2; 0{,}3^{0,374}/a_3\right\},$$
$$C_4^{2,376} = \left\{0{,}9^{2,376}/a_1; 0{,}8^{2,376}/a_2; 0{,}5^{2,376}/a_3\right\}.$$

В результате получаем:

$$C_1^{0,794} = \left\{0{,}920/a_1; 0{,}920/a_2; 0{,}667/a_3\right\},$$
$$C_2^{0,456} = \left\{0{,}903/a_1; 0{,}953/a_2; 0{,}729/a_3\right\},$$
$$C_3^{0,374} = \left\{0{,}875/a_1; 0{,}961/a_2; 0{,}637/a_3\right\},$$
$$C_4^{2,376} = \left\{0{,}779/a_1; 0{,}588/a_2; 0{,}193/a_3\right\}.$$

Искомое множество имеет вид:

$$D = \left\{0{,}779/a_1; 0{,}588/a_2; 0{,}193/a_3\right\}.$$

Максимальное значение принадлежности имеет альтернатива a_1 – первого электромонтёра и его следует выбрать в качестве лучшего.

Библиографический список

1. Коржов, А.В. Методы и модели оценки состояния изоляции и электробезопасности кабельных линий 6(10) кВ городских электрических сетей: монография / А.В. Коржов, А.И. Сидоров. – Челябинск: «Издательский центр ЮУрГУ», 2009. – 252 с.

2. Коржов, А.В. Математическая модель повреждаемости изоляции силовых кабельных линий городских электрических сетей / А.В. Коржов, А.И. Сидоров, Е.Ю. Юрченко, А.Б. Николаевский // Электрические станции. – 2008. – № 8. – С. 40–47.

3. Борисов, А.Н. Принятие решений на основе нечетких моделей: Примеры использования / А.Н. Борисов, О.А. Крумберг, И.П. Федоров. – Рига: Зинатне, 1990. – 184 с.

К содержанию

УДК 519.852

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ И ДИСКРИМИНАНТНОГО АНАЛИЗА В МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ЭКОНОМИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ СИСТЕМ

И.М. Соколинская

В работе предлагается подход к решению задачи линейного программирования при наличии неформализованных ограничений, ориентированный на многопроцессорные вычислительные системы с массовым параллелизмом. Описывается параллельный алгоритм, базирующийся на синтезе методов линейного программирования и дискриминантного анализа. Приводятся результаты численных экспериментов, подтверждающие эффективность предложенного подхода.

Ключевые слова: линейное программирование; дискриминантный анализ; распознавание образов; параллельный алгоритм.

В практике экономико-математического моделирования часто встречаются задачи, при решении которых приходится учитывать большое число взаимосвязанных факторов, включая плохо формализуемые [1]. Процесс решения плохо формализуемой задачи включает в себя преобразование ее формулировки путем уточнений и упрощений. В результате этого процесса мы получаем формализованную задачу, имеющую некоторое отношение к исходной постановке задачи. Во многих случаях удается построить формализованную задачу в виде задачи линейного программирования. Однако решение формализованной задачи может сколь угодно сильно отличаться от решения исходной задачи в силу наличия неформализованных ограничений.

В таких ситуациях перспективным является подход, основанный на сочетании методов линейной оптимизации с процедурами экспертного оценивания. Алгоритм решения задачи в этом случае строится как итерационный процесс, в ходе которого шаг за шагом происходит уточнение ограничений, относящихся к неформализованной части задачи. Приближенные решения исходной задачи, получаемые в ходе итерационного процесса, формируют множество образцов, квалифицируемых экспертом. Применяя к этому множеству образцов процедуру дискриминантного анализа [4], мы получаем разделяющую поверхность, аппроксимирующую неформализованные ограничения. В соответствии с этим актуальной является задача разработки, анализа и реализации на ЭВМ алгоритмов решения задач линейного программирования с неформализованными ограничениями путем синтеза методов дискриминантного анализа и линейной оптимизации.

В работах [2, 3] был описан общий метод для решения задач с одним неформализованным ограничением, базирующийся на дискриминантном анализе и экспертизе новых образцов, получаемых в результате решения

задачи линейного программирования. В качестве реализации общего метода был предложен итерационный алгоритм СМ-ЛК, использующий сочетание симплекс-метода и метода линейной коррекции.

В этой работе рассматриваются теоретические и реализационные аспекты параллельной версии алгоритма СМ-ЛК.

Математическая модель

Пусть модель экономической ситуации описывается в виде задачи линейной оптимизации, в которой нам не удалось полностью формализовать несколько ограничений. Такую модель мы можем представить в виде следующей задачи линейного программирования с несколькими неформализованными ограничениями (ЛПНО) в пространстве $\mathbf{R}^n$:

$$\bar{x} \in \operatorname{Arg\,max}\left\{(c,x)\middle|Ax \le b; \bar{\phi}_i(x) \le 0; i = 1,\ldots,q\right\}. \tag{20}$$

Здесь неравенства $\bar{\phi}_i(x) \le 0 \quad (i = 1,\ldots,q)$ играют роль неформализованных ограничений в том смысле, что нам не известен вид функций $\bar{\phi}_i$. Будем предполагать, что функции $\bar{\phi}_i$ принадлежат к классу аффинных функций, и что задача (20) имеет единственное решение.

Пусть $D = \left\{x\middle|Ax \le b\right\}$ – многогранник, определяемый формализованной частью задачи ЛПНО. Будем предполагать, что D – телесное множество (то есть D содержит внутренние точки), и что D ограничен.

Обозначим как ЛПФ задачу линейного программирования с формализованной частью:

$$\max\left\{(c,x)\middle|Ax \le b\right\}. \tag{21}$$

Будем исходить из предположения, что задача (21) также имеет единственное решение $\hat{x} = \arg\max\left\{(c,x)\middle|Ax \le b\right\}$, причем $\hat{x} \ne \bar{x}$. Пусть $\bar{P}_i = \left\{x\middle|\bar{\phi}_i(x) \le 0\right\}$ – множество значений, удовлетворяющих неформализованному ограничению $\bar{\phi}_i(x) \le 0$. Пусть:

$$\bar{P}^* = \bigcap_{i=1}^{q} \bar{P}_i.$$

Тогда допустимое множество задачи ЛПНО будет иметь вид $D \cap \bar{P}^*$.

Покажем теперь, как решение задачи ЛПНО может быть сведено к решению нескольких задач с одним неформализованным ограничением.

Рассмотрим следующую последовательность независимых задач ЛПНО, каждая из которых имеет только одно неформализованное ограничение:

$$\text{ЛПНО}_1 : \bar{x}_1 = \arg\max\left\{(c,x)\middle|Ax \le b, \bar{\phi}_1(x) \le 0\right\};$$

...

$$\text{ЛПНО}_q : \bar{x}_q = \arg\max\left\{(c,x)\middle|Ax \le b, \bar{\phi}_q(x) \le 0\right\},$$

Используя алгоритм L порождения образцов из [3], мы можем построить для каждой задачи ЛПНОi $(i=1,\ldots,q)$ последовательность аффинных разделяющих функций $\tilde{\phi}_i^1,\ldots,\tilde{\phi}_i^k$. Сконструируем следующую задачу линейного программирования $ЛП^k$:

$$\tilde{x}^k \in \operatorname{Arg}\ \max\{(c,x) \mid Ax \le b; \tilde{\phi}_i^k \le 0; i=1,\ldots,q\}. \qquad (22)$$

Справедлива следующая теорема.

Теорема а). Пусть задача ЛПНО (20) имеет единственное решение $\bar{x}$. Пусть каждая задача ЛПНОi $(1 \le i \le q)$ также имеет единственное решение $\bar{x}_i$, причем $\bar{x}_i \ne \hat{x}$, где $\hat{x} = \arg\max\left\{(c,x) \middle| Ax \le b\right\}$ – единственное решение задачи ЛПФ. Пусть $\tilde{x}^k$ – решение задачи $ЛП^k$. Тогда:

$$\left\{\tilde{x}^k\right\}_{k=0}^{\infty} \to \bar{x},$$

то есть при достаточно большом k в качестве приближенного решения задачи ЛПНО (20) можно взять решение задачи $ЛП^k$ (22).

В формулировке теоремы а) мы исходили из предположения, что все задачи ЛПНОi имеют решение $\bar{x}_i$, не совпадающее с решением $\hat{x}$ задачи ЛПФ (21). На практике это требование мы можем выполнить следующим образом.

На первом этапе находим приближенные значения коэффициентов и свободных членов для всех неформализованных ограничений $\bar{\phi}_i(x) \le 0$, удовлетворяющих условию $\bar{x}_i \ne \hat{x}$ (каждое ограничение вычисляется независимо от других). Заметим, что если ни одно неформализованное ограничение не удовлетворяет условию $\bar{x}_i \ne \hat{x}$, то решением задачи ЛПНО будет $\hat{x}$.

На втором этапе добавляем к системе ограничений задачи ЛПФ найденные на первом этапе приближения неформализованных ограничений и полагаем $\hat{x}$ равным решению расширенной задачи ЛПФ. Из оставшихся неформализованных ограничений снова выбираем все, удовлетворяющие условию $\bar{x}_i \ne \hat{x}$, и находим их приближенный вид.

Процесс заканчивается, когда либо все неформализованные ограничения будут найдены, либо останутся несколько ограничений, для которых $\bar{x}_i = \hat{x}$ (эти ограничения можно отбросить). Последняя расширенная задача ЛПФ даст приближенное решение исходной задачи ЛПНО.

Параллельная версия алгоритма СМ-ЛК

Дадим описание параллельного алгоритма решения задачи ЛПНО. На первом шаге задача ЛПНО, имеющая q неформализованных ограничений, разбивается на q задач ЛПНО1,…,ЛПНОq. Каждая из этих задач независимо решается методом СМ-ЛК. Из вычисленных приближений неформализованных ограничений и формализованной части задачи ЛПНО строится полная система ограничений. На втором шаге полученная таким образом задача ре-

шается одним из методов линейного программирования. В результате с некоторым приближением мы получаем $\bar{x}$ – решение исходной задачи ЛПНО.

Нахождение каждого неформализованного ограничения оформлялось в виде независимого процесса. Вычисленные ограничения передавались некоторому выделенному процессору-координатору, который формировал полную задачу линейного программирования и решал ее каким-либо методом линейной оптимизации. Указанный подход позволяет без какой-либо модификации выполнять параллельную программу на различном количестве процессоров. Для организации обменов данными между процессами была использована система параллельного программирования MPI-2. Разработанная параллельная версия алгоритма СМ-ЛК может выполняться без каких-либо изменений как на многопроцессорных системах с общей памятью, так и на системах с массовым параллелизмом, включая кластерные системы.

Вычислительные эксперименты

Для проведения вычислительных экспериментов была использована модельная задача Mod-nq, которая имеет следующий вид:

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 \le 0 \\ \quad\vdots \\ x_1 - 2x_n \le 0 \\ x_1 + 2x_2 \le 8000 \\ \quad\vdots \\ x_1 + 2x_n \le 8000 \\ x_1 \ge 0, x_2 \ge 0, \cdots, x_n \ge 0 \end{cases}$$

$$Q_{\max} = x_1$$

$$\begin{cases} e_1(x) = \operatorname{sgn}(3x_1 - x_2 - 3000) \\ \quad\vdots \\ e_q(x) = \operatorname{sgn}(3x_1 - x_q - 3000) \end{cases}$$

Здесь $e_1,\ldots,e_q$ – экспертные функции, задающие неформализованные ограничения ($q \le n-1$). Таким образом, задача Mod-nq представляет собой задачу ЛПНО в пространстве $\mathbf{R}^n$, имеющую q неформализованных ограничений.

Для проведения экспериментов был использован вычислительный кластер Infinity . Были исследованы ускорение и расширяемость, получаемые при использовании параллельного алгоритма СМ-ЛК на базе симплекс-метода и метода линейной коррекции. Результаты по исследованию ускорения представлены на Рис. 3. Эксперименты проводились для трех размерностей: $n = 60$, $n = 80$ и $n = 100$ при фиксированном количестве неформализованных ограничений $q = 48$. Ускорение вычислялось по формуле $\alpha = \alpha_0 + t_p / t_8$, где t_8 – время, затраченное на решение задачи Mod-n48 на 8 процессорах, t_p – время, затраченное на решение этой же задачи на p про-

цессорах, $\alpha_0 = (n-60)/60$. Для каждой размерности варьировалось количество процессоров, используемых для решения задачи. Во всех трех случаях было получено ускорение, близкое к линейному.

Результаты по исследованию расширяемости для параллельного алгоритма СМ-ЛК приведены на Рис. 4. Эксперименты проводились также для трех размерностей: $n=60$, $n=80$ и $n=100$. Здесь t_{pq} обозначает время, затраченное на решение модельной задачи размерности n с q неформализованными ограничениями на p процессорах. При проведении эксперимента для каждой размерности варьировалось количество процессоров, используемых для решения задачи. При этом количество неформализованных ограничений всегда равнялось количеству процессоров.

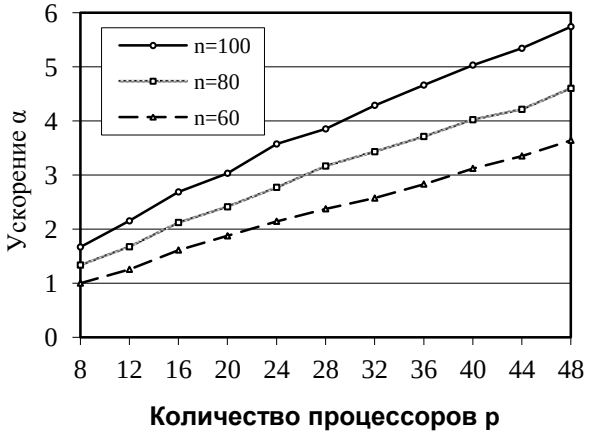


Рис. 3. Ускорение для Mod-n48

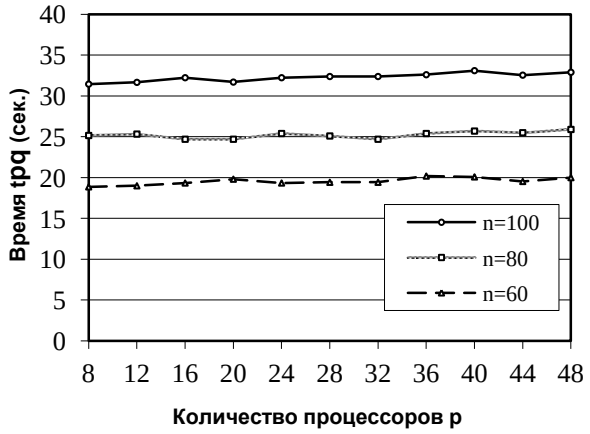


Рис. 4. Расширяемость для Mod-np

Проведенные эксперименты показали, что во всех случаях параллельный алгоритм СМ-ЛК демонстрировал расширяемость, близкую к линейной. Таким образом, можно сделать вывод о том, что параллельный алгоритм СМ-ЛК показывает хорошую масштабируемость на многопроцессорных системах с массовым параллелизмом при решении задач ЛПНО с различным количеством неформализованных ограничений.

Библиографический список

1. Мазуров, Вл.Д. О задаче оптимизации с плохо формализуемой целью / Вл.Д. Мазуров // Параметрическая оптимизация. – Свердловск: УНЦ АН СССР, 1985. - С. 51-53.

2. Соколинская, И.М. Синтез симплекс-метода и метода линейной коррекции в задачах линейной оптимизации с неформализованными ограничениями / И.М. Соколинская // Вычислительные методы и программирование. – 2005. – Т. 6, № 1. – С. 226–238.

3. Mazurov Vl.D., Sokolinskaya I.M. Discrimination analysis and randomization in linear optimization problems with not formalized restrictions // Pattern Recognition and Image Analysis. - 2005. - Vol. 15, No. 4. – Pp. 170–178.

4. McLachlan G.J. Discriminant Analysis and Statistical Pattern Recognition. - New York: John Wiley and Sons, 1992. – 526 p.

К содержанию

УДК 517.9

ОБ ОЦЕНКЕ ТОЧНОСТИ МЕТОДА ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ ГРАНИЧНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Е.В. Табаринцева

Рассматривается граничная обратная задача для нелинейного параболического уравнения. Получена оценка модуля непрерывности нелинейной обратной задачи на одном из стандартных множеств равномерной регуляризации. Для построения устойчивых приближенных решений обратной задачи используется метод квазиобращения. Получена точная по порядку оценка погрешности приближенных решений. Доказана оптимальность по порядку метода квазиобращения на рассмотренном классе равномерной регуляризации.

Ключевые слова: параболическое уравнение, нелинейное уравнение, граничная обратная задача, метод приближенного решения, оценка погрешности

Введение

Рассматривается одномерная постановка обратной граничной задачи теплообмена. Так как обратная граничная задача является неустойчивой в стандартных функциональных пространствах, то основными вопросами при ее исследовании являются вопросы построения устойчивых приближенных решений и оценки точности приближенных решений. Приближенное решение строится методом квазиобращения, который состоит в замене

неустойчивой исходной задачи устойчивой задачей для гиперболического уравнения с «малым» параметром. Получена точная по порядку оценка погрешности построенного приближенного решения на одном из классов корректности обратной граничной задачи. Получена оценка модуля непрерывности для нелинейной обратной задачи – основной оценочной функции, позволяющей исследовать методы приближенного решения на оптимальность. Доказана оптимальность по порядку метода квазиобращения с выбором параметра регуляризации по схеме М.М. Лаврентьева на рассмотренном классе корректности.

Вопросы теплообмена имеют особое значение в таких областях техники, как авиационная и ракетно-космическая техника, энергетика, металлургия. Диагностика и идентификация процессов теплообмена могут быть связаны с решением обратных задач различных типов, однако, граничные обратные задачи – это один из наиболее важных и распространенных в тепловом моделировании классов задач. Граничные обратные задачи представляют и методический интерес, т.к. задачи данного типа, по сравнению с коэффициентными и геометрическими задачами, как правило, имеют большую склонность к искажению результатов, связанную с некорректностью постановок, априорная информация о точном решении граничных обратных задач бывает ограниченной.

Рассмотренная в данной работе одномерная постановка обратной граничной задачи является основной расчетной моделью, для которой должны быть построены эффективные методы обработки экспериментальных данных.

Постановка задачи

Рассматривается задача восстановления функции $v(t)=u(1,t)$, $v(t)\in L_2[0,\infty)$ (граничного условия), где функция $u(x,t)$ удовлетворяет условиям:

$$\begin{aligned}&\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}-a(x)u+f(u)\quad (0<x<1;\ t>0)\\&u(x,0)=0;\ u(0,t)=0\end{aligned}\tag{1}$$

и дополнительному условию:

$$u_x(0,t)=q(t),\ t>0.\tag{2}$$

Здесь $q(t)\in L_2[0;\infty)$ – заданная функция, $a(x)\in C^2[0,1]$, $a(x)\geq 0$, $u(\bullet,t)\in C^2(0,1)\bigcap C([0,1])$; $u(x,\bullet)\in W_2^1\left(0,\infty\right)$; $f(\cdot)$ – непрерывная функция, такая, что $f:L_2[0,\infty)\to L_2[0,\infty)$ – отображение, удовлетворяющее условию Липшица:

$$\|f(u)-f(v)\|\leq L\|u-v\|.$$

Будем предполагать, что для заданной функции $q(t) \in L_2[0;\infty)$ поставленная обратная задача имеет решение $v(t)$, принадлежащее множеству:

$$M = \{v \in L_2[0;\infty);\ \ v' \in L_2[0;\infty)\ \ \|v\|^2_{L_2[0;\infty)} + \|v'\|^2_{L_2[0;\infty)} \le r^2\},$$

но точные значения функции $q(t)$ не известны. Известны уровень погрешности $\delta > 0$ и функция $q_\delta(t)$ такая, что $\|q - q_\delta\| \le \delta$. Требуется построить приближенное решение исходной обратной задачи и оценить его уклонение от точного решения.

Оценка условной устойчивости нелинейной обратной задачи

Рассмотрим следующие линейные нормированные пространства: $X = L_2(0,\infty)$ – пространство функций, суммируемых с квадратом, определенных при $t \in [0,\infty)$ (принимающих действительные значения), Φ – пространство комплекснозначных функций, определенных при $t \in [0,\infty)$, допускающих аналитическое продолжение в полуплоскость $\operatorname{Im} z < 0$ и таких, что $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |F(s+i\sigma)|^2\, ds < C$ при всех $\sigma < 0$.

Рассмотрим линейный оператор $F_0 : L_2[0,1] \to \Phi$, действующий по правилу $F(\lambda) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int\limits_0^\infty e^{-i\lambda t} f(t)dt$ (преобразование Фурье функций, заданных на полупрямой). Оператор $F : L_2[0,1] \to \Phi$ является изометрией.

Применяя к исходной обратной задаче преобразование Фурье, имеем следующую задачу для нелинейного обыкновенного уравнения второго порядка: требуется определить функцию $V(\lambda) = U(1;\lambda) \in \Phi$, где $U(x;\lambda)$ удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} &U_{xx}(x,\lambda) = i\lambda U(x,\lambda) + a(x)U(x,\lambda) + g(U); \\ &U(0,\lambda) = 0;\ U_x(0,\lambda) = Q(\lambda) \end{aligned} \tag{4}$$

Здесь $U(x,\lambda) = Fu = \int\limits_0^\infty e^{-i\lambda t} u(x,t)dt$ – образ Фурье функции $u(x,t)$; отображение $g : \Phi \to \Phi$ действует по правилу:

$$g(U) = F(f(F^{-1}U)).$$

Заметим, что отображение $g : \Phi \to \Phi$ удовлетворяет условию Липшица.

Задача (4) равносильна интегральному уравнению:

$$U(x,\lambda) = \frac{sh\mu_0\sqrt{\lambda}x}{\mu_0\sqrt{\lambda}} Q(\lambda) + \int\limits_0^x \frac{sh\mu_0\sqrt{\lambda}(x-\xi)}{\mu_0\sqrt{\lambda}} \left[g(U(\xi,\lambda)) + a(\xi)U(\xi,\lambda)\right] d\xi, \tag{5}$$

где $\mu_0 = \frac{1}{2}(1+i)$.

Рассмотрим величину:

$\omega(M,\delta)=\sup\left\{\|v_1(t)-v_2(t)\|: v_1,v_2\in M,\ \|q_1(t)-q_2(t)\|\le\delta\right\}$ – модуль непрерывности для нелинейной обратной задачи: на множестве M. Выполняется следующая теорема.

Теорема 1. Существуют постоянные $C>0$: $\delta_0>0$, такие, что для всех $\delta<\delta_0$ выполняется неравенство:

$$\omega(M,\delta)\le\frac{C}{\ln^2\delta}.$$

Метод приближенного решения

Метод квазиобращения для решения линейных неустойчивых задач был предложен в [3]. Далее рассматривается модификация метода квазиобращения для решения нелинейной некорректно поставленной задачи.

Вместо некорректно поставленной исходной задачи рассмотрим вспомогательную задачу для гиперболического уравнения с малым параметром $\varepsilon>0$: требуется определить функцию $v_\delta(t)=u_\delta^\varepsilon(1,t)\in L_2(0;\infty)$, где $u_\delta^\varepsilon(x,t)$ удовлетворяет условиям:

$$\begin{gathered}\varepsilon\frac{\partial^2u_\delta^\varepsilon}{\partial t^2}+\frac{\partial u_\delta^\varepsilon}{\partial t}=\frac{\partial^2u_\delta^\varepsilon}{\partial x^2}-a(x)u_\delta^\varepsilon+f(u_\delta^\varepsilon),\ (0<x<1;\ t>0)\\ u_\delta^\varepsilon(x,0)=\frac{\partial u_\delta^\varepsilon}{\partial t}(x,0)=0;\ u_\delta^\varepsilon(0,t)=0;\ \frac{\partial u_\delta^\varepsilon}{\partial x}(0,t)=q_\delta(t)\end{gathered}\tag{6}$$

Таким образом, функцию:

$$v_\delta^{\varepsilon(\delta)}(t)=u_\delta^{\varepsilon(\delta)}(1,t),\tag{7}$$

при подходящем выборе зависимости $\varepsilon=\varepsilon(\delta)$ будем рассматривать в качестве приближенного решения исходной задачи.

Применяя к (6) преобразование Фурье, получим следующую задачу для нелиейного уравнения второго порядка: требуется определить функцию $V_\delta^\varepsilon(\lambda)=U_\delta^\varepsilon(1,\lambda)\in\Phi$, где $U_\delta^\varepsilon(x,\lambda)$ удовлетворяет условиям:

$$\begin{gathered}(U_\delta^\varepsilon)_{xx}(x,\lambda)=(i\lambda-\varepsilon\lambda^2)U_\delta^\varepsilon(x,\lambda)+a(x)U_\delta^\varepsilon(x,\lambda)+f(U_\delta^\varepsilon(x,\lambda));\\ U_\delta^\varepsilon(0,\lambda)=0;\ (U_\delta^\varepsilon)_x(0,\lambda)=Q_\delta(\lambda)\end{gathered}\tag{8}$$

Задача (8) равносильна интегральному уравнению:

$$U_\delta^\varepsilon(x,\lambda)=s_\varepsilon(\lambda,x)Q_\delta(\lambda)+\int_0^x s_\varepsilon(\lambda,x-\xi)\left[g(U_\delta^\varepsilon(\xi,\lambda))+a(\xi)U_\delta^\varepsilon(\xi,\lambda)\right]d\xi\tag{9}$$

где $s_\varepsilon(x,\xi)=\dfrac{sh\sqrt{i\lambda-\varepsilon\lambda^2}\,x}{\sqrt{i\lambda-\varepsilon\lambda^2}}$.

Оценка погрешности метода приближенного решения

Рассмотрим приближенное решение v_δ^ε граничной обратной задачи, определенное формулой (7). В качестве характеристики точности приближенного решения рассмотрим величину

$$\Delta(\varepsilon,\delta)=\sup\left\{\left\|v_\delta^\varepsilon-v\right\|: v\in M_r;\ \left\|v-v_\delta\right\|\le\delta\right\}.$$

Воспользуемся очевидной оценкой:

$$\Delta(\varepsilon,\delta)\le\Delta_1(\varepsilon)+\Delta_2(\varepsilon,\delta),$$

где

$$\Delta_1(\varepsilon)=\sup\left\{\left\|v^\varepsilon-v\right\|:\ v\in M_r\right\},$$

$v^\varepsilon(t)=u_\varepsilon(1,t)$, где $u^\varepsilon(x,t)$ – решение задачи (6) с точно заданным начальным условием.

$$\Delta_2(\varepsilon,\delta)=\sup\left\{\left\|v_\delta^\varepsilon-v^\varepsilon\right\|:\left\|q-q_\delta\right\|\le\delta\right\}.$$

Оценим величины $\Delta_1(\varepsilon)$, $\Delta_2(\varepsilon,\delta)$.

Для величины $\Delta_2(\varepsilon,\delta)$ имеем оценку:

$$\Delta_2(\varepsilon,\delta)\le\delta\sup_{\lambda\ge0}\left|s_\varepsilon(1,\lambda)\right|\le\delta e^{1/2\sqrt{\varepsilon}}.$$

Далее,

$$\Delta_1(\varepsilon)\le r\sup_{\lambda\ge0}\frac{1}{\sqrt{1+\lambda^2}}\left|s_\varepsilon(1,\lambda)\frac{\mu_0\sqrt{\lambda}}{sh\mu_0\sqrt{\lambda}}-1\right|. \qquad (10)$$

Имеем следующее неравенство:

$$\sup_{\lambda\ge0}\frac{1}{\sqrt{1+\lambda^2}}\left|s_\varepsilon(1,\lambda)\frac{\mu_0\sqrt{\lambda}}{sh\mu_0\sqrt{\lambda}}-1\right|\le C\varepsilon.$$

Следовательно, $\Delta_1(\varepsilon)\le Cr\varepsilon.$

Выберем зависимость $\varepsilon=\varepsilon_0(\delta)$ из условия:

$$\delta e^{1/2\sqrt{\varepsilon}}=Cr\varepsilon.$$

Выполняется следующая теорема

Теорема 2. Существуют постоянные $\delta_0;C$ такие, что для любого $\delta\in(0,\delta_0)$ справедлива оценка погрешности метода квазиобращения на множестве M:

$$\Delta(\varepsilon_0(\delta),\delta)\le\frac{C}{\ln^2\delta}.$$

Из теоремы 2 с **учетом** теоремы 1 получаем очевидное.

Следствие. Метод **квазиобращения** оптимален по порядку на множестве M .

Библиографический список

1. Лаврентьев, М.М. О некоторых некорректных задачах математической физики / М.М.Лаврентьев. – Новосибирск: Наука, 1962.
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. Латес, Р. Метод квазиобращения и его приложения / Р. Латес, Ж.-Л. Лионс. – М.: Мир, 1970.
4. Иванов, В.К. Дифференциально-операторные уравнения и некорректные задачи / В.К. Иванов, И.В. Мельникова, А.И. Филинков. – М.: Наука, 1995.

К содержанию

УДК 551.509

УНИВЕРСАЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ ПРОГНОЗА ОПАСНЫХ ЯВЛЕНИЙ ПОГОДЫ: РЕКОНСТРУКЦИЯ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА КОНВЕКТИВНЫХ СИСТЕМ

С.М. Абдуллаев

Представлены методы нового объектно-ориентированного подхода к прогнозу опасных явлений погоды, объединяющего наблюдение, моделирование и климатологию объектов на основе реконструкций жизненного цикла конвективных систем,

Ключевые слова: прогноз, опасные явления, конвективные системы, жизненный цикл, реконструкция, климатология, дистанционные методы численное моделирование, функции принадлежности.

В докладе представлены принципы, промежуточные результаты и перспективы разработки объектно-ориентированного подхода к анализу и прогнозу опасных явлений погоды и неблагоприятных условий среды, учитывающего общие и индивидуальные особенности эволюции атмосферных объектов. Подход назван нами «универсальным алгоритмом» диагноза и прогноза [1, 2], поскольку на единой платформе он включает элементы различных разделов метеорологии (рис. 1). В том числе, новый подход объединяет дистанционные наблюдения, численное моделирование и

климатологию атмосферных объектов; ассимилирует результаты большинства прогностических технологий и производит вероятностные и детерминированные прогнозные оценки; быстро адаптируется к изменению качества исходной информации и др. Ниже, кратко излагаются основы подхода и особенности разрабатываемых методов анализа систем глубокой конвекции. Алгоритмы прогноза опасных явлений погоды, в том числе новые результаты в прогнозе грозовой активности излагаются во второй части тезисов.

Необходимое условие реализации подхода – это формализация ряда общепринятых понятий об объектах окружающей среды и принципов их применения в предметной области. В частности, ключевым для «универсального алгоритма» является понятие «жизненный цикл» – подразумевающее существование вполне различимых фаз эволюции природных и природно-антропогенных систем, таких как стадии зарождения, формирования, зрелости и диссипации объекта (о.).

Описание о. и определение стадий жизненного цикла – отдельные задачи предметных областей естествознания и выражены в концепции «жизненного цикла» [3, 4]. В практической реализации концепции требуется соблюсти три постановочных системных принципа.

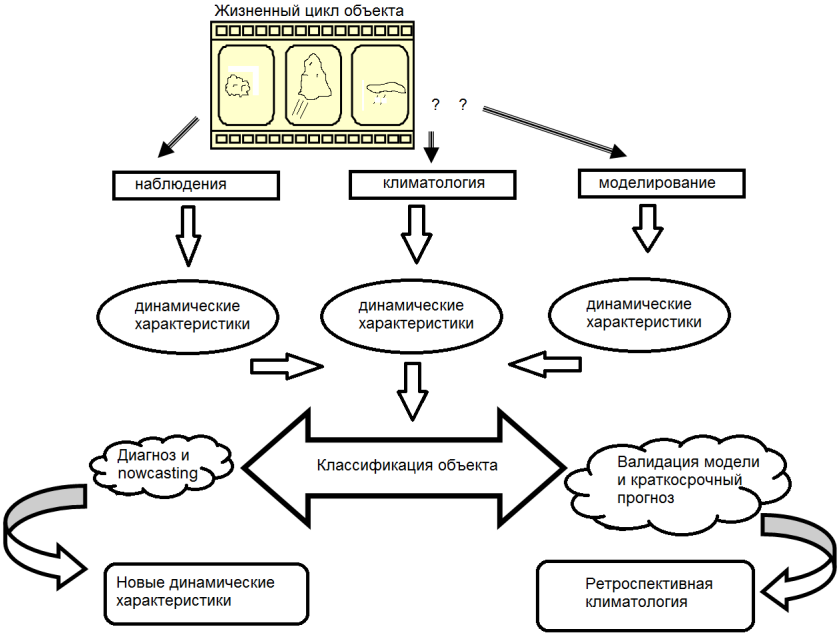


Рис. 1. Объектно-ориентированный подход, объединяющий наблюдения жизненного цикла, климатологию и численный прогноз динамических характеристик объекта

Во-первых, учесть, общее системное свойство о. – каждый из них, одновременно является системой и элементом (подсистемой) систем большего пространственно-временного масштаба. Пример – эволюция и иерархия систем кучево-дождевой облачности [3]. Группа объектов «ячейка Cb», на разных стадиях, составляют о. «конвективный шторм» или «малые» под-

системы. Последние на разных этапах жизненного цикла организуются в «большие» ансамбли. Эволюция несколько ансамблей штормов определяет жизненный цикл объект «мезомасштабная конвективная система» (МКС).

Во-вторых, необходимо учесть специфику связей элементов систем – характер их взаимодействия. В частности, взаимодействие мезомасштабных циркуляций приводит к установлению различных морфологических структур МКС. К примеру, на стадии максимальной интенсивности поля осадков МКС могут иметь линейную, дугообразную, спиралевидную и более сложные комплексные «трехмерные» формы [5]. Классификация систем (рис. 1) на этом не заканчивается. Так на стадии зрелости линейные МКС – мезомасштабные линии шквала в зависимости от направления развития новых элементов по отношению трансляции системы могут классифицироваться на быстрые, сверхбыстрые, медленные и сверхмедленные, симметричные и асимметричные системы [1, 2, 3, 6 и др.].

В-третьих, следует охарактеризовать региональные и индивидуальные особенности выбранных объектов. Среди прочего необходимо охарактеризовать синоптическую, сезонную, климатическую региональную повторяемость типов МКС [7]. Целесообразно, соотнести преимущественные морфолого-эволюционные типы систем осадков со стадиями о. «внетропический циклон» и «фронтальная система» [7]; установить их частоты в отдельных состояниях о. «климатическая система», таким как фазы Северо-Атлантического Колебания или Эль-Ниньо-Южное Колебание. Вслед за этой оценкой «репрезентативности» региональной выборки мезомасштабных систем можно перейти к индивидуальным особенностям о. с целью установить морфологические типы штормов, стадии и формы МКС предпочтительные к производству опасных явлений – гроз, осадков, града шквалов и смерчей.

Изложенные выше принципы подхода «универсальный алгоритм» – объединены в комплекс взаимосвязанных между собою методов и методик. Универсальный алгоритм (рис. 1) включает три основных этапа: 1) анализ наблюдаемой эволюции атмосферного объекта и климатологическое описание его жизненного цикла; 2) динамическую реконструкцию наблюдаемого и моделируемого объекта и оценку качества численного моделирования; 3) разработку функций принадлежности универсального алгоритма прогноза.

Исследование эволюции МКС и связанных с ними опасных явлений погоды включает выделение характерных стадий их развития, описание основных элементов и образованных ими структур на каждой фазе жизни, а также включает характеристику связей между элементами всех масштабов и другие необходимые компоненты реконструкции жизненного цикла МКС. Различают «мезоклиматологическую» и «динамическую» реконструкцию. В рамках реконструкций первого типа применимы все формы эмпирических обобщений – от простейших каталогов с характеристиками оопасных явлений сопутствовавшим морфологии и стадиям мезомасштаб-

ных систем до моделей эволюции и схем прогноза опасных явлений. Однако обеспечение преемственности различных форм обобщения между собой, а так же их воспроизведения в новых наблюдениях и при численном моделировании, требует разработки правил, содержащих критерии однозначной идентификации объектов классификации на различных стадиях их эволюции. Для этого в реконструкциях используются набор динамических характеристик объекта (рис.1), отражающих кинематику, интенсивность, геометрическую форму, пространственное и временное положение объекта. Кумулятивные распределения повторяемостей динамических характеристик – один из результатов мезоклиматологической реконструкции. В качестве иллюстрации мезоклиматологической реконструкции приведем пример исследований одной из наиболее сложных МКС – мезомасштабных комплексов локальных штормов (МКЛШ). В том числе, кратко поясним понятие «доминирующие» скопления, «трансляция» и «развитие», которые использованы в методах обобщения морфологических, кинематических и эволюционных характеристик грозоградовых штормов, и собственно динамических характеристик объекта «конвективный шторм» [1, 8–11]. Среди множества разработанных или модифицированных нами методов реконструкции, мы выделили малую их толику – наиболее простых, не требующих пространных комментариев, но не теряющих новизну методов, методик и алгоритмов: объективной селекции доминирующих штормов и конструировании его типовой структуры (рис.2, а и б), метод векторов (рис.2 в) и метод траекторий (рис. 2 г), и метод доминирующих скоплений (рис. 2 е). В том числе мы включили в рассказ одну из простейших концептуальных моделей [8–11], объясняющую результаты предыдущих методов.

Объективная селекция доминирующих штормов (рис. 2 а) Одной из важных опорных точек в эволюции МКС является стадия максимальной интенсивности конвективных явлений [1–8]. С другой стороны, концепция [1, 3] предполагает, что в любой МКС, имеющей масштабы ~ 300 км и время конвективной активности 7–8 часов, можно объективно выделить два доминирующих шторма, ответственных за главные максимумы её интенсивности: абсолютный и второй по значимости. Селекция доминирующих штормов [1, 2, 7, 8] позволяет избежать субъективности климатологических обобщений, использующих выборку штормов, сформированную на критериальных порогах отражаемости или опасных явлений погоды: такие выборки часто включают несоразмерное количество элементов различных МКС, даже если соблюдено условие сопоставимости стадий системы. Это очевидно при сравнении, изображений горизонтальных полей радиолокационной отражаемости на стадии максимума трех различных комплексов локальных штормов (рис. 2 а). *Типовая композиционная структура.* Объективная селекция штормов важна для определения типовой структуры, масштабов и эволюции наиболее мощных локальных штормов (рис. 2 б). Так обобщенный образ шторма на рисунок 2 б получен измерением пара-

метровдоминирующих локальных штормов в точке близкой к максимуму его развития и измерили его параметры. Эти шторма как мы видим, в среднем имеют размеры около 25–30 км, причем значительная часть кучево-дождевого облака «нависает» над поверхностью земли – это его новая развивающиеся элементы-«ячейки». Значительное время жизни доминирующих штормов (1,5–2 часа) позволяет с уверенностью определить их среднюю скорость и сделать оценку предсказуемости направления развития.

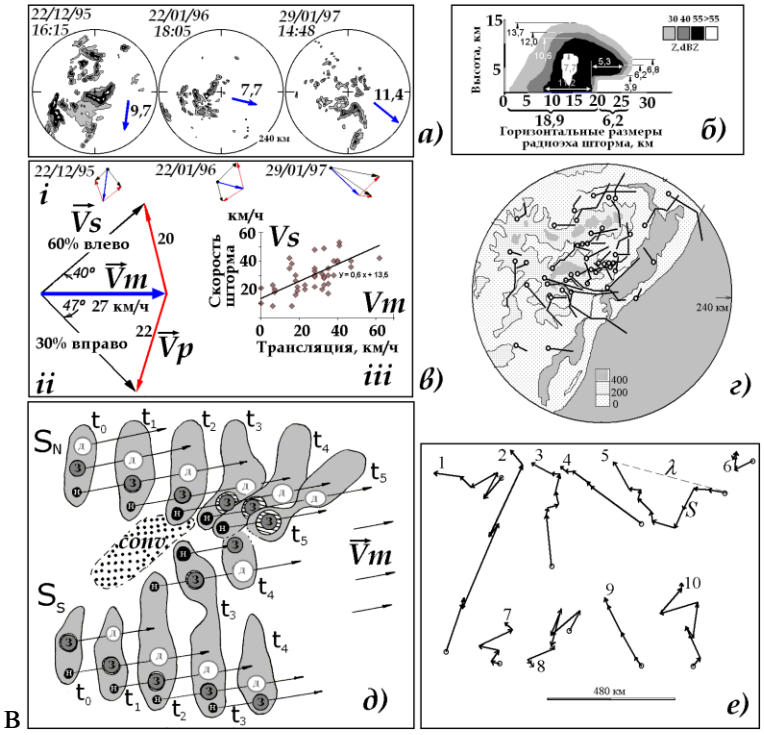


Рис. 2. Исследование мезомасштабных комплексов локальных штормов (МКЛШ). а) Стадия максимума летних МЛКШ южной Бразилии, стрелка – пассивная трансляция V_m б) Вертикальная структура отражаемости, осредненная по ИДВ, на максимуме доминирования грозо-градовых штормов 17 МКС. в) Векторный метод: i) декомпозиция средних скоростей индивидуальных штормов $V_Ш$ на трансляцию V_m и развитие; ii) осреднение скоростей и повторяемостей лево- и праводвижущихся 44 штормов; iii) скорости штормов в зависимости от трансляции. г) Метод траекторий: траектории доминирующих штормов аккумулируются на карту ландшафтов региона. д) Концептуальная модель эволюции скоплений Cb вблизи стационарных зон конвергенции объясняет причины доминирования и жизненный цикл локальных штормов в северном полушарии. е) Метод доминирующих скоплений: траектории максимумов интенсивности α-кластера в движущейся системе координат. Начало траектории (первый квазичасовой максимум) отмечено кружком, последующие максимумы – стрелками. Цифры от 1 до 10 соответствуют различным МКЛШ южного полушария. Для случая 5 показана длина траектории S и отрезок λ соединяющий начало и конец траектории. Адаптировано из [3, 8]

Метод векторной декомпозиции (рис.2в). Постановка вопроса о кинематических динамических характеристиках – движении шторма, его трансляции $\vec{v}_m$ и его развитии $\vec{v}_p$ имеет важное методическое значение при поиске причин появления конкретного шторма. Трансляция – это общее движение всей МКС и её элементов, с некоторой скоростью характеризующий крупномасштабный ведущий поток, а развитие – это видимое перемещение системы за счет появление новых элементов. Разложение скоростей доминирующих штормов южного полушария на трансляцию и развитие (рис. 2 в, i) обнаруживает предполагаемые закономерности. Первое правило «закон сохранения развития» – наличие характерной скорости развития штормов 20–25 км/ч. Второе «правило полушарий» касается преимущественного направления движения штормов и «правило двух третей» для доминирующих штормов: в северном (южном) полушарии две трети штормов для доминирующих отклоняются вправо (влево) от направления трансляции, и одна треть штормов «нарушает» правило полушария (рис. 2 в, ii). Третье «правило ускорения и замедления»: шторма имеют тенденцию смещаться быстрее (медленнее) трансляции, когда ее значения меньше (больше), чем 23÷25 км/ч (iii). Последнее наблюдение вытекает из уравнений регрессии, связывающих движение доминирующего шторма и трансляцию $V_S=0{,}6V_m+13{,}5$ км/ч и $V_S=0{,}5V_m+12{,}3$ км/ч для 200 (100) штормов с Z>40 (55) dBZ. Очевидно, что для высоких скоростей потока в средней тропосфере скорость шторма приближается сверху к половине V_m. Малые скорости ведущего потока и шторма скорее свидетельствуют об отсутствии условий для предпочтительного направления развития шторма мезо-β. Очевидно, что положение всех штормов на небольшой промежуток моменты времени вперед можно предсказать, предварительно определив скорость трансляции и добавив к ней средний вектор развития. С другой стороны траектории доминирующих штормов часто отклоняется от этой «линейной» модели рисунка 2 в.

Метод траекторий доминирующих штормов (рис. 2 г) заключается в многолетнем аккумулировании траекторий доминирующих штормов принадлежащих одному типу МКС на подходящую ландшафтную карту региона. Отметим две очевидные закономерности, полученные этим методом. «Океаническое правило» состоит в том, что летние шторма – это сугубо континентальное явление: их развитие, начинаясь на суше, быстро прекращается при выходе на морское или озерное побережье; «ландшафтное правило» – летние доминирующие шторма чаще всего возникают на склонах возвышенностей, окаймляющих речные долины, а затем их траектории сходятся к пониженной части рельефа. Очевидно, что метод траекторий перспективен для локализации взаимодействующих с конвекций квазиперманентных циркуляций пограничного слоя.

Концептуальная модель эволюции штормов (рис. 2 д). Замечено, что криволинейное движение доминирующих штормов в регионах развития горно-долинной и бризовой циркуляций (рис. 2 г) напоминает движение штормов вблизи стационарных зон конвергенции (рис. 2 д) – процесса, впервые объясненного в наших ранних работах [9,10]. Дело в том, что модель эволюции штормов, проходящих вблизи стационарных зон сходимости приземного ветра в погранслое (рис. 2д), которая объясняет видимые эффекты разделения, слияния, стационирования локальных штормов и другие процессы вблизи таких зон, отражает процесс развития доминирующих элементов скоплений кучево-дождевой облачности масштаба большого мезо-β, т.е. процесс того же пространственно-временного масштаба, который отображается при аккумуляции траекторий (рис. 2 г). Следует заметить, что концептуальная модель (рис. 2 д) и её модификации (зеркальное отражение в случае южного полушария) объясняет и предсказывает все типы мезоклиматических аномалий осадков, связанных с термомеханическими неоднородностями погранслоя, включая эффекты антропогенного влияния крупных городов на распределение конвективных явлений. Помимо этого она объясняет ряд прогностических правил, например, правило «двух третей»: в умеренных широтах северного полушария при типичном направлении трансляции V_m с юго-запада на северо-восток и типичном появлении новых элементов (Н) скопления справа от предыдущих зрелых (З) и диссипирующих (Д) и обходе шторма S_N севернее зоны конвергенции шторм «стационирует», но направление развития его новых элементов сохраняется. Однако приближение такого же право-движущегося шторма S_S с юга к зоне конвергенции может привести к возникновению групп новых ячеек с северной стороны шторма, что в моменты t_2 и t_3 будет восприниматься как деление и возникновение лево-движущегося шторма. В совокупности же мы получим, что на два (доминирующих) шторма с нормальным для северного (южного) полушария правым (левым) развитием появится один аномальный с левым или правым отклонением направления движения. При прогнозе нового развития, следует учитывать, что происхождение квазистационарной зоны сходимости приземного ветра не всегда «внешнее»: стационарные или малоподвижные линии конвергенции могут быть обусловлены предыдущим развитием конвективных штормов, например, оттоком холодного воздуха из-под шторма S_N.

Применение принципа иерархичности конвективных зон осадков к полям приземной конвергенции позволило нам найти порог [9, 10], начиная с которого приземная конвергенция существенно влияет на интенсивность зоны осадков большого масштаба мезо-β, что может воздействовать на последовательность доминирования и форму скопления. Основные свойства скопления, такие как масштабы и периодичность появления элементов остаются без изменения.

Исследования траекторий штормов в неподвижной системе координат дополняет метод доминирующих скоплений (рис. 2 е). Метод доминирующих скоплений в различных вариантах применялся в [1, 3, 10, 12] и заключается в аккумуляции максимумов интенсивности в движущейся со скоростью трансляции системе координат и отображением главных максимумов интенсивности скоплений, соединенных направленными отрезками. Такие диаграммы (рис. 2 е) как бы указывают на распространение активной конвекции внутри воздушной массы. Длина таких траекторий S изменялась от 300 до 1000 км. Наряду со случаями относительно запутанных траекторий максимума (случаи 1, 6 и 8), как видим, многие МКС (2, 4, 9 и др.) имеют своеобразную «ось интенсивности», которая транслируется с воздушной массой. Другие (3, 7, 10) имеют некоторое «подобие» направленности (случаи 2–22 декабря 1995, 6–22 января 1996 и 10–29 января 1997, представлены на рис. 2 а, в). Если ввести простую меру «сложности траекторий в движущейся системе»: отношение между длиной отрезка λ, соединяющего концы ломаной кривой S, т.е. начальную и последнюю активные ячейки Cb, к длине траектории максимума S, то можно численно выразить степень линейности или простоты систем. Очевидно, что наиболее «простая» траектория когда $\lambda/S=1$. В рассмотренных нами случаях λ/S изменялась от 0,32 до 0,99, превышая 0,5 в 60 % случаев. Обнаружение скрытой линейной структуры «неорганизованных» систем дает основание для поиска факторов избранности того или иного направления развития скопления мезо-α и обосновывает векторный метод прогноза развития новых скоплений на промежуток времени до нескольких часов. Например, найденная закономерность уточняет времена появления штормов в схеме на рис. 2 д: при нормальном направлении развития систем в северном полушарии более южный доминирующий шторм появляется позднее, чем северный.

Заметим, что помимо описанных методов обоснования репрезентативности выборки, последовательного отбора доминирующих событий, поиске сигналов от иерархически соподчиненных мезомасштабных явлений и др. (рис.1 и рис.2), климатологические реконструкции жизненного цикла перспективны во многих областях естествознания. Так, в работе [4] систематизированы методы реконструкции применительно к природно-антропогенным системам. Среди прочего, эти методы позволяют обоснованно подходить к интерпретации численного моделирования неблагоприятных условий среды в условиях антропогенного изменения ландшафтов [13], оценке состояния [14] и прогнозированию геоэкологических систем [15]. Сущность этих методов раскрывается в динамических реконструкциях мезомасштабных конвективных систем и разработки алгоритмов краткосрочного прогноза опасных явлений изложенных во второй части доклада.

Библиографический список

1. Абдуллаев, С.М. Жизненный цикл мезомасштабных конвективных систем: концепция, климатология и прогноз: дис. … д-ра геогр. наук / С.М. Абдуллаев. – М., Гидрометцентр РФ, 2010. – 407 с.

2. Lenskaia, O.Yu. Organization and evolution of mesoscale convective systems using radar data: objective description. The “dominating thunderstorm” conception and its application to MCS climatology. / O.Yu Lenskaia, S. M. Abdullaev, A.A. Zhelnin //Preprints, 15th Conf. on Mesoscale Proc., 2013, Portland, Oregon. – URL: https://ams.confex.com/ams/15MESO/webprogram/Paper227607.html.

3. Абдуллаев, С.М. Жизненный цикл мезомасштабных конвективных систем / С.М. Абдуллаев, А.А. Желнин, О.Ю. Ленская // Метеорология и гидрология. – 2009. – № 5. – С. 34–45.

4. Абдуллаев, С.М. Жизненный цикл природно-антропогенных систем: концепция и методы исследования / С.М. Абдуллаев, О.Ю. Ленская, Ю.А. Сапельцева // Вестник Воронежского Университета. Серия: География. Геоэкология. – 2013. – № 2. – С. 96–106.

5. Абдуллаев, С.М. Структура мезомасштабных конвективных систем в центральной России / С.М. Абдуллаев, А.А. Желнин, О.Ю. Ленская // Метеорология и гидрология. – 2012. – № 1. – С. 20–32.

6. Абдуллаев, С.М. Эволюционная классификация мезомасштабных линий шквала / С.М. Абдуллаев, О.Ю. Ленская // Метеорология и гидрология. – 1998. – № 3. – С. 24–32.

7. Ленская, О.Ю. Мезомасштабная организация и эволюция систем осадков на юге Бразилии: дис. … канд. геогр. Наук / О.Ю. Ленская. – М., 2006. – 220 с.

8. Abdullaev, S.M. A Diagnostic and Forecasting Techniques Based on Radar Derived Translation and Propagation of Convective Systems / S.M. Abdullaev, O.Yu. Lenskaia // Preprints, 36th Conf. on Radar Meteorology, 2013. Breckenridge, CO, Amer. Meteor. Soc., 386. – 2013. – URL: https://ams.confex.com/ams/36Radar/Paper228139.html.

9. Абдуллаев, С.М. Стационарные зоны конвергенции приземного ветра масштаба мезо-β: пространственно-временные характеристики / С.М. Абдуллаев // Активное воздействие на атмосферные процессы в Молдове. – Кишинев, 1992. – Т. 3. – С. 122–135.

10. Абдуллаев, С.М. Эволюция и иерархия скоплений кучево-дождевой облачности: дис. … канд. физ.-мат. наук / С.М. Абдуллаев. – М., Гидрометцентр РФ, 1992. – 206 с.

11. Абдуллаев, С.М. Влияние полей конвергенции приземного ветра на интенсивность осадков скоплений Cb / С.М. Абдуллаев, Н.С. Арская, А.А. Желнин // Метеорология и гидрология. – 1994. – №.8. – С. 33–37.

12. Abdoulaev S. Mesoscale precipitation systems in Rio Grande do Sul. Part 3: Structure and evolution of non-line mesoconvective systems / Abdoulaev, S., A. Starostin, O. Lenskaia // Brazilian Journal of Meteorology. – 2001. – V. 16. – n. 2. – Pp. 87–102.

13. Ленская, О.Ю. Численное моделирование характеристик пограничного слоя атмосферы крупного промышленного города (на примере г. Челябинска) / О.Ю. Ленская., С.М Абдуллаев., А. И. Приказчиков., Д.Н Соболев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Вычислительная математика и информатика». – 2013. – Т. 2. – № 2. – С. 65–82.

14. Сапельцева, Ю.А. К вопросу о границах и экологической опасности природно-антропогенных систем / Ю.А. Сапельцева, С.М Абдуллаев // Естественные и технические науки. – 2013. – № 1. – С. 149–152.

15. Гаязова, А.О. Прогнозирование численности Microcystis Aeruginosa на основе правил нечеткой логики и нечетких нейронных сетей / А.О. Гаязова, С.М. Абдуллаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Вычислительная математика и информатика». – 2012. – № 47 (306). – С. 5–11.

К содержанию

УДК 551.509 + 004.9

ФУНКЦИИ ПРИНАДЛЕЖНОСТИ УНИВЕРСАЛЬНОГО АЛГОРИТМА ПРОГНОЗА ОПАСНЫХ ЯВЛЕНИЙ ПОГОДЫ: ГРОЗОВАЯ АКТИВНОСТЬ КОНВЕКТИВНЫХ СИСТЕМ

С.М. Абдуллаев, О.Ю. Ленская

Описана объектно-ориентированная оценка качества прогноза использующая динамической реконструкции жизненного цикла наблюдаемых и моделируемых конвективных систем. Предложен алгоритм прогноза опасных явлений основанный на функциональном преобразовании динамических характеристик этих систем. Приведен пример разработки функций принадлежности к прогнозу грозовых явлений.

Ключевые слова: конвективные системы, динамические реконструкции, дистанционные методы, численное моделирование, алгоритм прогноза опасных явлений, функции принадлежности, полярность и интенсивность гроз.

В этой статье продолжается описание этапов «универсального алгоритма» прогноза начатое в [1]. Сначала будут описаны методы динамической реконструкции жизненного цикла наблюдаемого и моделируемого конвективных объектов, необходимых для объектно-ориентированной оценки качества численного моделирования и воспроизведения прогностических технологий. Эти оценки призваны решить многие из проблем верификации результатов численных прогнозов высокого разрешения (см. [2, 3, 4, 5, 6, 7] среди многих других). Несколько подробнее будет описан алгоритма прогноза, включая новые функции принадлежности прогноза электрической активности конвективных систем.

Динамическая реконструкция жизненного цикла МКС – это объектно-ориентированный процесс идентификации и оценки систем представляющий особую форму объединения эмпирических и численных методов на основе климатологических выборок динамических характеристик объекта рассматривается нами как основа диагноза и прогноза опасных явлений погоды сопровождающих конвекцию. Сопоставляя эмпирические динамические характеристики наблюдаемых МКС с распределением аналогичных характеристик из мезоклиматологической реконструкции (см. [1]), можно установить степень принадлежности индивидуальной МКС к климатологической выборки. Аналогично устанавливается принадлежность прогнозируемой системы. Затем по квантилям климатологических распределений можно определить величину отклонения прогнозируемого набора динамических характеристик от наблюдаемого набора, что собственно и есть оценка согласия прогноза и наблюдения объекта. Пример динамической реконструкции мезомасштабной конвективной системы сопровождаемой торнадо и моделируемой в среде Weather Research Model (WRF) приведен в [7].

Используя динамические реконструкции, можно объективно установить степень прогнозируемости опасных явлений любого метода, в том числе и обеспечить преемственность подходов. Так, пользуясь правилами наукастинга шквалов, смерчей, града, экстремальных сумм осадков и гроз, можно адаптировать или сконструировать новые динамические характеристики отражающие потенциал опасного явления погоды (ОЯП). В этом случае, оценка прогнозируемости ОЯП получается как естественный продукт динамической реконструкции: достаточно сопоставить потенциалы ОЯП, полученные в ходе краткосрочного численного прогноза и диагностические, полученные из анализа радиолокационных или других наблюдений. Как вариант реконструкции, могут сравниваться результаты ансамблевого прогноза, а с учетом некоторых архитипичных форм эволюции – своеобразных каркасов жизненного цикла создаваться экспертные системы вероятностного и детерминированного прогнозирования. Основа таких систем в гибкости и точности функций принадлежности прогноза.

Разработка функций принадлежности универсального алгоритма прогноза включает прогностические мезоклиматические и динамические реконструкций с формализацией прогнозных правил и созданию прогнозных функций алгоритма. Остановимся на реализации подхода в виде алгоритма сверхкраткосрочного или краткосрочного прогноза опасных явлений погоды. Пусть предмет исследования – это диагноз (прогноз) какого-либо явления связанного с текущим (будущим) состоянием объекта наблюдения (моделирования). Очевидно, что в необходимый набор динамических характеристик объекта X^i включить, те характеристики, которые являются потенциальными предикторами тех или иных явлений. Например, если по наблюдаемому или модельному полю радиолокационной отражаемости необходимо оценить максимальную скорость порыва ветра при прохожде-

нии объекта «линия штормов», то в набор X^i следует включить скорость конвективного региона линии, значение отражаемости в объекте, форму объекта, площадь и положение слоистообразного региона [7, 8, 9]. Далее необходимо установить связь между отдельными категориями опасных явлений и X^i, т.е. сформулировать эмпирические правила прогноза.

В след за этим, производится разработка функций принадлежности универсального алгоритма прогнозирования**.** Для этого каждое правило прогноза опасных явлений формализуется в одну или несколько функций принадлежности динамической характеристики к прогнозу опасного явления с интенсивностью f в диапазоне значений $f_{\min} \le f < f_{\max}$, т.е. строятся однопараметрические зависимости $M_j(X_j^i)$, где X_j^i диагностическое или прогнозируемое значение динамической характеристики, а значение M_j принадлежит интервалу [0,1]. Очевидно, что число таких функций $j = \overline{1, J}$ меньше или равно числу динамических характеристик $i = \overline{1, I}$, т.е. $J \le I$. Оценка вероятности опасного явления искомой интенсивности, $P(f)$ вычисляется как взвешенная сумма функций принадлежности прогнозу $M_j(X_j^i)$, $j = \overline{1, J}$.

$$P(f) = \sum_{j=1}^{J} \lambda_j M_j(X_j^i), \qquad (1)$$

где в формуле (1) при заданном значении X_j^i вычисленное значение функции принадлежности прогнозу $M_j(X_j^i)$ умножается на индивидуальный коэффициент $|\lambda_j| \le 1$ – известную оценку вклада динамической характеристики объекта в возможность осуществления того или иного сопутствующего явления. При условии, что алгебраическая сумма весов должна быть больше единицы $\sum^{J} \lambda_j \ge 1$, первоначальный выбор весов λ_j осуществляется экспертно – ранжированием потенциальных предикторов X_j^i по степени значимости и за тем уточняется в процессе диагноза и прогноза.

Первая реализация «универсального алгоритма» осуществлена в рамках проекта 14.B37.21.0613, где установлены основные взаимосвязи и оценен потенциал опасных явлений погоды шести архитипов мезомасштабных систем осадков с интенсивной и умеренной конвективной активностью и обложными осадками, в т.ч. построены 36 прогностических реконструкций шквало- и паводко, градо- и грозо опасных систем. Формализованы общие системные и специфические объектно-ориентированные прогнозные правила. Первые, учитывают общие закономерности эволюции МКС, в т.ч. квазипериодические колебания интенсивности конвекции, с периодами 0,25, 1 и 3 часа; доминирование линейных и дугообразных скоплений масштаба мезо-β, сопряженное с цикличностью интенсивности α-кластера; консервативность скорости роста и диссипации конвективных элементов; свойство «запрета» на появление гроз и осадков в местах транслируемой

воздушной массы, ранее занятых конвекцией. Специфические правила, учитывают эволюцию отдельных типов систем: эволюционную классификацию линий шквала; скрытую структуру комплекса локальных «неорганизованных» штормов; эволюции доминирующих штормов под влиянием стационарных зон конвергенции природного и антропогенного происхождения, влияние ландшафтных особенностей региона на траектории штормов (см. [1]) и грозовую активность отдельных систем и др. При этом во вновь реализуемые правила можно агрегировать любые типы не объектно-ориентированных методов краткосрочного прогноза – здесь главное установить приблизительное соответствие между предикторами прогноза и динамическими характеристиками X^i, определяемыми при реконструкции эволюции объектов. Например, в процессе создания правил связанных с объектом «локальный шторм» были адаптированы уже известные функции нечеткой логики системы экстраполяционных прогнозов nowcasting [10, 11], новыерезультаты физико-статистических методов и прогностические индексы численных моделей [12–16]. Таким образом, была решена задача прогностических реконструкций жизненного цикла – это селекция индивидуального набора X^i, используемого для создания правил прогноза отдельных категорий опасных явлений или воздействий производимых объектом в различных его состояниях.

В результате преобразовании правил прогноза опасных явлений в индивидуальные наборы однопараметрические функции принадлежности $M_j(X_j^i)$ вошли как функции основанные на общих и локальных свойствах облачности, так и специфические объектные. К первым относятся, например время суток, скорость адвекции, максимальная по всему полю отражаемость, ко вторым «сеточные переменные», например описывающие локальную интенсивность осадков. К объектным относятся как строго формализуемые характеристики, такие как ориентация, и скорость объекта «линия», максимальная отражаемость «локального шторма», так и лингвистические характеристики объектов, например «дугообразная», «монолитная» линия (здесь $M_j(X_j^i)$-синглетон).

Приведем пример разработки функции принадлежности к прогнозу в двух категориях опасных явлений: «общая грозовая активность» как суммы разрядов из облака на землю CG и внутриоблачных разрядов CC и «сильный разряд CG» с токами > 40кА. В разработке использованы результаты [17, 18, 19 и 20]. Основными для оценки общей грозовой активности являются поля горизонтальной отражаемости на высотах изотерм 0, –10, –20, –30 ºС. Для удобства применения, общая грозовая активность приведена к числу разрядов за 5 минут нормализована на стандартный пиксель площади 4×4 км^2. Вычисления вероятности проводится на основе поля горизонтальной отражаемости высоте по локальной максимальной радиолокационной отражаемости Z_m измеряемой в dBZ. В таблице приведены наиболее употребляемые значения принадлежности M(X).

Таблица

Функции принадлежности 1 молниевый разряд за 5 минут на площади 4×4км^2

X_1, dBZ	$M(X_1)$	X_2, dBZ	$M(X_2)$	X_2, dBZ	$M(X_3)$	X_4, dBZ	$M(X_4)$
35	0,01	30	0,03	25	0,03	20	0,05
42	0,1	33	0,1	27	0,1	22	0,1
45	0,25	36	0,25	30	0,25	25	0,25
48	0,5	40	0,5	34	0,5	30	0,5
50	0,75	44	0,75	38	0,75	34	0,75
52	0,9	48	0,9	42	0,9	38	0,9
54	0,95	50	0,95	46	0,95	41	0,95
55	0,98	52	0,98	48	0,98	45	0,98
56	0,99	53	0,99	50	0,99	48	0,99
60	1	55	1	53	1	50	1
0 ºC	0 ºC	–10 ºC	–10 ºC	–20 ºC	–20 ºC	–30 ºC	–30 ºC

Функции можно использовать для оконтуривания интенсивности гроз по диагностическим полям или моделируемым полям отражаемости с весом λ=0.9 для обычных условий суши с высотами менее 1000 м, для высот более 1 км, и подветренных зон городов, вес λ=1÷1,25, а для поверхности океанов, морей, крупных озер и водохранилищ вес принимать не более 0,7. Очевидно, что четыре функции принадлежности с весами описывают диапазон общей грозовой активности от 0 до 5 разрядов с площади 4×4 км^2. Вероятность грозы вычисляется следующим образом – с известным весом просто суммируются все значения принадлежности M(X) по 4 вертикальным площадкам, согласно значению Z_m на площади пикселя. К примеру пусть на высотах 0, –10, –20, –30 ºC наблюдаются отражаемости 50, 48, 36, и 30 dBZ над поверхностью с весом λ =0,9. Используя значения $M(x_i)$ из таблицы и при необходимости интерполируя их, получим значение *P(f)*.

$$P(f) = \lambda_i M(x_i) = 0{,}9\times(0{,}75+0{,}9+(0{,}5+(36-34)\times 0{,}25/(38-34))+0{,}5)=2{,}775\times 0{,}9=2{,}5.$$

Значение *P(f)* = 2,5>1 означает, с одной стороны, что с вероятностью в 100 % в ближайшие 5 минут произойдет один разряд, при этом в этом же объеме (т.е. над площадкой) следует ожидать не менее двух разрядов.

Важная прикладная задача – построение функции принадлежности сильных грозовых разрядов облако-земля обоснована и реализована нами впервые. Здесь важен следующий аспект проблемы, что сила тока в положительных разрядах CG+ в равнинных условиях в среднем почти на 10 кА выше, чем отрицательных разрядов CG- [19]. Однако положительные разряды, составляют 15–20 % от общего числа CG. Это нами объясняется тем, что в производстве отрицательных разрядов главную роль играют отдельные мультиячейковые штормы или линии штормов в начальной стадии развития кучево-дождевой конвекции (рис. 1 а), а в производстве сильных положительных (и реже отрицательных) разрядов главную роль играют мезомасштабные системы, сопровождаемые обширным регионом слоистообразных осадков (рис. 1 б).

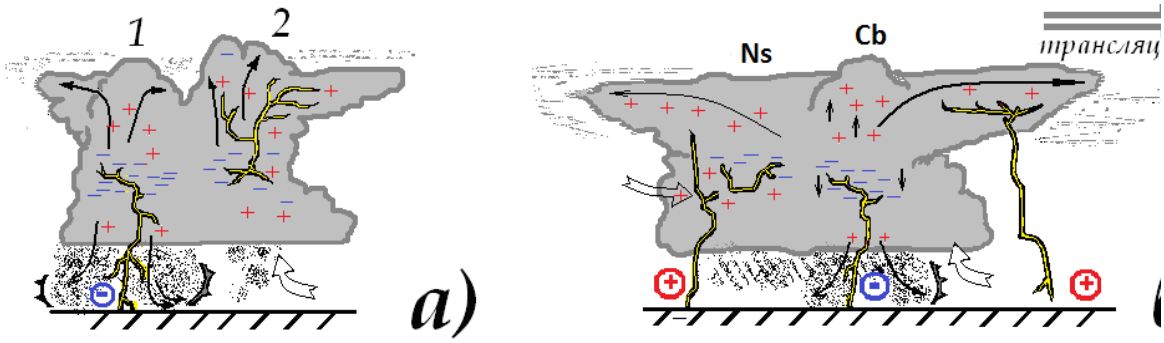


Рис. 1. Распределение зарядов и грозовые разряды а) в объекте «мультиячейковый шторм» при трансляции ниже средней ~ 10 мс$^{-1}$ и б) поперек объекта «сверхбыстрая линии шквала» при трансляции со скоростью больше средней. Пояснение к рисунку. В шторме а) показаны внутриоблачные разряды (CC) растущей ячейки 2 и ступенчатый лидер, несущий отрицательный разряд CG- в зрелой ячейке 1. Большая часть ближних к земле положительных зарядов удаляется вместе с частицами осадков и меньшая часть выносится с ледяными частицами вверх. В линейной МКС б), возвратные удары CG- в зрелой ячейке конвективного региона (Cb) даже более часты, чем в шторме, причем им сопутствуют редкие и более сильные положительные разряды CG+ из наковальни и региона обложных слоистообразных осадков (Ns). Стрелками показаны движения воздуха относительно трансляции шторма

На основе этих и других реконструкций нами предложен следующий набор функций принадлежности «сильных разрядов CG» (рис. 2). Во-первых, учтено, что функции принадлежности прогноза сильных разрядов CG не могут быть основаны только на значении отражаемости в одном пикселе и должны учитывать наличие соседних пикселей в данном случае – четырех пикселей. Первая функция (рис. 2 а) учитывает максимальную отражаемость в одном из этих пикселей. Кроме того климатологические исследования [19] показывают, что число сильных ударов должно возрастает в весенние сезоны, т.е. в условиях, характеризуемых большими скоростями ветра (сдвига) в тропосфере и относительно низкой тропопаузой, и в целом для высоких скоростей трансляции систем (рис. 2 б). Функция на рис. 2 в обусловлена, главным образом тем, что интенсивность разрядов пропорциональна объёму смешанной части облака >30 dBZ при низких температурах, в пределах первых 5 км выше нулевой изотермы [18]. Функция на графике 2 г отражает факт относительного увеличения числа положительных разрядов в зрелой стадии систем, т.е. с длительностью процесса конвекции [17, 18].

В заключении, резюмируем три этапа «универсального алгоритма».

1. На репрезентативной выборке данных дистанционных или обычных наблюдений производится анализ поведения объектов, сопровождаемый морфолого-эволюционной классификацией объектов. В опорных фазах эволюции подобных объектов определяются динамические характеристики, описывающие различные свойства о., как правило, отражающие предмет диагноза и прогноза. Результат этапа – климатологические распределения динамических характеристик о. на различных стадиях его жизни – базис для оценки качества численного моделирования объектов.

2. На выборке тестируемых наблюдаемых и моделируемых объектов, устанавливается принадлежность этих объектов к диапазонам климатически типичных или редких событий, определяется вероятностная климатическая дистанция между их динамическими характеристиками. Итог этапа – комплексная оценка качества реконструкции жизненного цикла о. моделью, включая оценку прогностического потенциала численной модели – исследование воспроизведения динамических характеристик в интервалах принадлежности прогноза.

3. Универсальный алгоритм прогноза, оперирует с линейной комбинацией функций принадлежности прогноза – однопараметрических аналитических функций заданных на интервале принадлежности динамической характеристики о. с весовым множителем, учитывающим вклад каждой функции в прогноз данной категории данного явления или условий среды. Универсальность алгоритма позволяет трансформировать функции принадлежности нечеткой логики системы autonowcasting, результаты физико-статистических методов, прогнозы численных моделей. Набор вычисленных значений функций трансформируется одновременно в вероятность возникновения сопутствующего явления данной категории и детерминированную оценку его интенсивности.

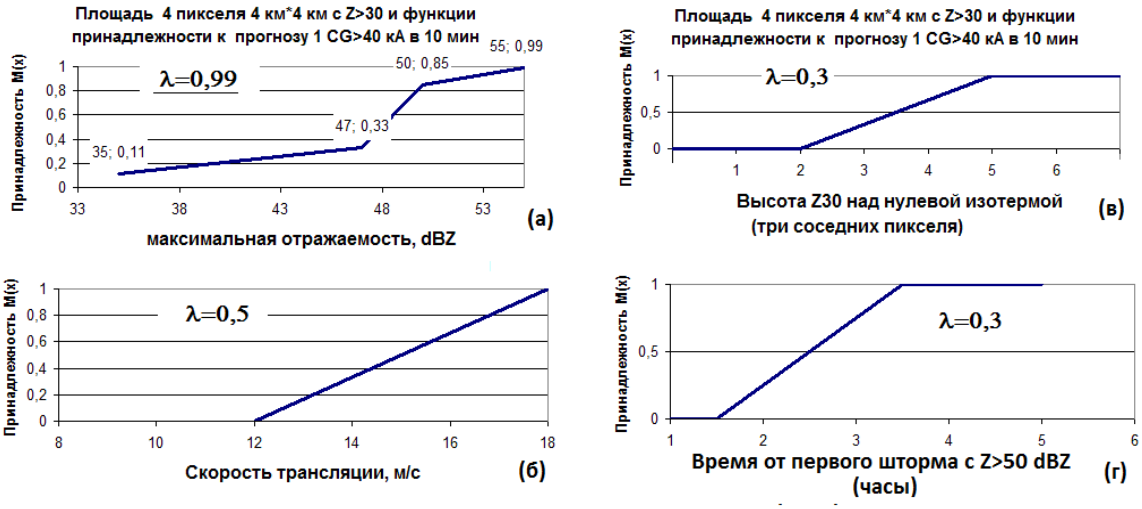


Рис. 2 Функции принадлежности сильных грозовых разрядов облако-земля. Примечание: веса λ на графиках требуют уточнения.

Отметим, что в настоящее время выделение динамических характеристик из метеорологических полей реализуются большей частью интерактивно. Ожидается, что совершенствование алгоритма дисплея жизненного цикла [21] и внедрение новых техник анализа численных прогнозов конвективных систем ускорят обработку больших объемов наблюдаемых и прогнозных полей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках соглашения № 14.B37.21.0613.

Библиографический список

1. Абдуллаев, С.М. Универсальный алгоритм прогноза опасных явлений погоды: реконструкция жизненного цикла конвективных систем / С.М. Абдуллаев // Сб. Трудов 66-й научной конференции ППС ЮУрГУ. – 2014.

2. Davis, C. Object-Based Verification of Precipitation Forecasts. Part II: Application to Convective Rain Systems / C.Davis , B. Brown, R. Bullock // Mon. Wea. Rev. – 2006. – V.134. – C. 1785–1795.

3. Rossa, A. Overview of methods for the verification of quantitative precipitation forecasts / A. Rossa, P. Nuirmi, E. Ebert.// in Precipitation: Advances in measurement, Estimation and Prediction. – 2008. Springer. – Chapter 16. – C. 419–452.

4. Gilleland, E. Intercomparison of spatial forecast verification methods / E. Gilleland, D. Ahijevych, B.G. Brown, B. Casati, E.E. Ebert // Wea. Forecasting. – 2009. – V. 24. – C. 1416–1430.

5. Berenguer, M. The diurnal cycle of precipitation from continental radar mosaics and numerical weather prediction models. Part II: Intercomparison among numerical models and with nowcasting / M. Berenguer, M. Surcel, I. Zawadzki, M. Xue, F. Kong//Mon. Wea. Rev. – 2012. – V.140. – C. 2689–2705.

6. Adams-Selin, R.D. Sensitivity of Bow-Echo Simulation to Microphysical Parameterizations / R.D. Adams-Selin, S.C. van den Heever, R.H. Johnson // Wea. Forecasting. – 2013. – V. 28. – C. 1188–1209.

7. Lenskaia, O.Yu,. Organization and evolution of mesoscale convective systems using radar data: objective description. The “dominating thunderstorm” conception and its application to MCS climatology. / O.Yu Lenskaia, S.M. Abdullaev, A.A. Zhelnin // Preprints, 15th Conf. on Mesoscale Proc. – 2013. Portland, Oregon. – URL: https://ams.confex.com/ams/15MESO/webprogram/Paper227607.html.

8. Ленская, О.Ю. Использование доплеровского радара и данных наземных наблюдений для изучения и прогноза шквалов / О.Ю Ленская, С.М. Абдуллаев // Вестник Челябинского университета. – 2005. – Вып. 1. – № 1(1). – С. 131–143/

9. Ленская, О.Ю. Методические вопросы использования спутниковой и радиолокационной информации в мезомасштабном прогнозе (на примере опасных явлений погоды в Москве 24 июля 2001 г.) / О.Ю. Ленская // Вестник Челябинского Университета. – 2007. – Вып. 2. – № 6(84). – С. 131–143.

10. Mueller, C., T. NCAR Autonowcast system / C.Mueller, T. Saxen, R. Roberts, J. Wilson, T. Betancourt, S. Dettling, N. Quin, J. Yee // Wea. Forecasting. – 2003. – V.18(4). – C. 545–561.

11. Lin, P.-F. Objective prediction of warm season afternoon thunderstorms in Northern Taiwan using a fuzzy logic approach / Lin, P.-F., P.-L. Chang, B. J.-D. Jou, J. W. Wilson, R. D. Roberts // Wea. Forecasting. – 2012. – V.27. – C. 1178–1197.

12. Duda, J.D. Spring and summer Midwestern severe weather reports in supercells compared to other morphologies / J.D. Duda, W.A. Gallus JR // Wea. Forecasting. – 2010. – V.25(1). – C. 190–206.

13. Smith, B.T. Convective modes for significant severe thunderstorms in the contiguous United States. Part I: Storm classification and climatology / B.T. Smith, R.L. Thompson, J.S. Grams, C. Broyles, H.E. Brooks // Wea. Forecasting. – 2012. – V. 27 (5) – C. 1114–1135.

14. Thompson, R.L. Convective modes for significant severe thunderstorms in the contiguous United States. Part II: Supercell and QLCS tornado environments / R.L. Thompson, B.T. Smith, J.S. Grams, A.R. Dean, C. Broyles // Wea. Forecasting. –2012. – V. 27 (5). – C. 1136–1154.

15. Zheng, L. Organizational modes of mesoscale convective systems over Central East China / Zheng, L, J. Sun, X. Zhang, C. Liu // Wea. Forecasting. – 2013. – V. 28. – C. 1081–1098.

16. Grams, J.S. A climatology and comparison of parameters for significant tornado events in the United States / J.S. Grams, R.L. Thompson, D.V. Snively, J.A. Prentice, G.M. Hodges, L.J. Reames // Wea. Forecasting. – 2012. – V. 27. – C. 106–123.

17. Abdoulaev, S. An exploratory study of lightning activity on Southeast and South of Brazil / S. Abdoulaev, V.S. Marques, F.M. A. Pinheiro, E.F. A. Martinez, O. Lenskaia // Prepr. 20th Conf. on Severe Local Storms. Amer. Met. Soc., 11–15, September, 2000, P.5.2, Orlando, Florida. – 2000. – C. 110–111.

18. Abdoulaev, S. Analysis of mesoscale system using cloud-to-ground flash data / S. Abdoulaev, V.S. Marques, F.M. A. Pinheiro, E.F. A. Martinez, O. Lenskaia // Brazilian Journal of Geophysics. – 2001. – V 19. – n1. – C. 75–95.

19. Abdoulaev, S. Oscilações intrasazonais e centros de ação das tempestades com descargas nuvem-terra na America do Sul / S. Abdoulaev // Anais XII Congresso Brasileiro de Meteorologia, Foz de Iguaçu, Parana, 4–9 Agosto de 2002. – 2002. – C. 1027–1052.

20. Cecil, D.J. Three years of TRMM precipitation features. Part I: Radar, radiometric, and lightning characteristics / D.J.Cecil, S.J. Goodman, D.J. Boccippio, E.J. Zipser, S.W. Nesbitt // Mon. Wea. Rev. – 2005. – V. 133. – C. 543–566.

21. Абдуллаев, С.М. Алгоритмы краткосрочного прогноза с использованием радиолокационных данных: оценка трансляции и композиционный дисплей жизненного цикла / С.М. Абдуллаев, О.Ю. Ленская, А.О. Гаязова, О.Н. Иванова, А.А. Носков, Д.Н. Соболев, Г.И. Радченко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Вычислительная математика и информатика». – 2014. – Том 3. – № 1. – С. 17–32.

К содержанию

ФАКУЛЬТЕТ МАТЕМАТИКИ, МЕХАНИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК

УДК 517.956.226

ОБ АСИМПТОТИКЕ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННОГО УРАВНЕНИЯ В СЛУЧАЕ СМЕНЫ УСТОЙЧИВОСТИ

Е.А. Деркунова

Построена и обоснована асимптотика решения сингулярно возмущенного уравенения в случае, когда корни его вырожденного уравения не являются изолированными во всей рассматриваемой области и проекция их пересечения выходит на начальный отрезок

Ключевые слова: сингулярно возмущенная задача, асимптотика, метод пограничных функций, смена устойчивости, метод дифференциальных неравенств

Рассмотрим уравнение:

$$\varepsilon\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\Lambda(x,t)\frac{\partial u}{\partial x}\right)=f(u,x,t) \tag{1}$$

с начальным условием:

$$u(x,0,\varepsilon)=u^0(x),\quad 0\le x\le 1, \tag{2}$$

где $\varepsilon>0$ – малый параметр.

Решение $u(x,t,\varepsilon)$ задачи (1), (2) ищется в области:

$D=\{(x,t)\colon x_0(t)\le x\le x_1(t),\ 0\le t\le T\}$, где $x=x_0(t)$ и $x=x_1(t)$ – характеристики, выходящие соответственно из точек (0,0) и (1,0) и определяемые уравнением $\frac{dx}{dt}=\Lambda(x,t)$ (считаем, что $\Lambda(x,t)$ – гладкая функция и все характеристики, выходящие из точек начального отрезка $\{t=0,\ 0\le x\le 1\}$ существуют при $0\le t\le T$).

Хорошо известно [1], что если вырожденное уравнение:

$$f(u,x,t)=0 \tag{3}$$

имеет корень $u=\varphi(x,t)$, который устойчив в области D, т.е. выполнено неравенство:

$$f_u(\varphi(x,t),x,t)<0,\quad (x,t)\in D, \tag{4}$$

и если начальная функция $u^0(x)$ принадлежит области притяжения этого корня, то решение $u(x,t,\varepsilon)$ задачи (1), (2) существует и удовлетворяет предельному равенству:

$$\lim_{\varepsilon\to 0} u(x,t,\varepsilon) = \varphi(x,t), \quad x_0(t) \le x \le x_1(t), \quad 0 < t \le T. \tag{5}$$

Более сложная ситуация возникает тогда, когда уравнение (3) имеет корни $u = \varphi_1(x,t)$ и $u = \varphi_2(x,t)$, пересекающиеся по некоторой кривой, проекция которой на плоскость (x,t) лежит в области D. Если эта проекция не выходит на начальный отрезок (расположена выше него), то при определенных условиях нетрудно доказать (так же, как это сделано в [2] для обыкновенного дифференциального уравнения), что предельный переход (5) имеет место, но теперь $\varphi(x,t)$ - составной корень уравнения (3), равный соответственно $\varphi_1(x,t)$ и $\varphi_2(x,t)$ по разные стороны от линии пересечения корней. Затем в статье [3] рассматривался еще более сложный случай, когда проекция линии пересечения корней выходит на начальный отрезок при выполнения следующего условия на функцию f: функция правой части уравнения (1) зависит от $\varepsilon^{\frac{1}{p}}$ и имеет вид:

$$f(u,x,t,\varepsilon) = -k(x,t)(u-\varphi_1(x,t))(u-\varphi_2(x,t)) + \varepsilon^{\frac{1}{p}} f_1(u,x,t,\varepsilon^{\frac{1}{p}}),$$

где $p > 1$, k, φ_1, φ_2, f_1 – достаточно гладкие функции, $k(x,t) > 0$, $f_1(u,x,t,0) > 0$ в области D.

Здесь мы продолжим изучение задачи статьи [3]: будем рассматривать случай, когда корни вырожденного уравнения пересекаются по линии, проекция которой выходит на начальный отрезок, но откажемся от непосредственной регуляризации правой части уравнения (1), связанной с членом порядка $\varepsilon^{\frac{1}{p}}$, $p > 1$. При этом наложим на функцию правой части следующее условие

Условие A_1. Функция $f(u,x,t)$ имеет вид:

$$f(u,x,t) = -k(x,t)\big(u-\varphi_1(x,t)\big)\big(u-\varphi_2(x,t)\big),$$

где k, φ_1, φ_2 – достаточно гладкие (дважды непрерывно дифференцируемые) функции, $k(x,t) > 0$ в области D.

При условии A_1 вырожденное уравнение (3) имеет два корня:

$$u = \varphi_1(x,t) \text{ и } u = \varphi_2(x,t).$$

Условие A_2. Корни $u = \varphi_1(x,t)$ и $u = \varphi_2(x,t)$ уравнения (3) удовлетворяют соотношениям:

$$\varphi_1(x,t) = \varphi_2(x,t), \quad \text{при} \quad x = \psi(t), \quad 0 \le t \le T,$$

где $\psi(t)$ – гладкая функция, $x_0(t) < \psi(t) < x_1(t)$, при $0 \le t \le T$;

$$\varphi_1(x,t) > \varphi_2(x,t) \quad \text{при} \quad x_0(t) \le x < \psi(t), \quad 0 \le t \le T;$$
$$\varphi_1(x,t) < \varphi_2(x,t) \quad \text{при} \quad \psi(t) < x \le x_1(t), \quad 0 \le t \le T.$$

Условие A_2 означает, что корни $u = \varphi_1(x,t)$ и $u = \varphi_2(x,t)$ уравнения (3) пересекаются по кривой, проекция которой на плоскость (x,t) лежит в области D и описывается уравнением $x = \psi(t)$, $0 \le t \le T$. Для краткости будем обозначать эту проекцию буквой C.

Из корней φ_1 и φ_2 образуем два составных корня уравнения (3):

$$\breve{u}(x,t) = \begin{cases} \varphi_1(x,t), & x_0(t) \le x \le \psi(t), \\ \varphi_2(x,t), & \psi(t) \le x \le x_1(t), \end{cases} \quad 0 \le t \le T;$$

$$\hat{u}(x,t) = \begin{cases} \varphi_2(x,t), & x_0(t) \le x \le \psi(t), \\ \varphi_1(x,t), & \psi(t) \le x \le x_1(t), \end{cases} \quad 0 \le t \le T.$$

Отметим, что составные корни $\breve{u}$ и $\hat{u}$ являются непрерывными, но, вообще говоря, негладкими на кривой C. Из условий A_1 и A_2 следует, что:

$$\breve{u}(x,t) > \hat{u}(x,t), \quad (x,t) \in D \backslash C;$$

$$\breve{u}(x,t) = \hat{u}(x,t), \quad (x,t) \in C;$$

$$f_u(\breve{u}(x,t),x,t) < 0, \quad f_u(\hat{u}(x,t),x,t) > 0, \quad (x,t) \in D \backslash C; \tag{6}$$

$$f_u(\breve{u}(x,t),x,t) = f_u(\hat{u}(x,t),x,t) = 0, \quad (x,t) \in C. \tag{7}$$

Неравенства (6) позволяют назвать корень $\breve{u}(x,t)$ устойчивым, а корень $\hat{u}(x,t)$ неустойчивым (см. (4)). Следует, однако, заметить, что в точках кривой C неравенство $f_u(\breve{u}(x,t),x,t) < 0$ не выполнено (см. (7)), и это обстоятельство не позволяет однозначно ответить на вопрос о том, будет ли решение $u(x,t,\varepsilon)$ задачи (1), (2) стремиться при $\varepsilon \to 0$ к составному корню $\breve{u}(x,t)$ в области D (вблизи линии C даже не исключая начального отрезка).

Наконец, потребуем выполнения еще одного условия, которое обеспечивает принадлежность начальной функции $u^0(x)$ области притяжения составного устойчивого корня $\breve{u}(x,t)$.

Условие A_3. $u^0(x) > \hat{u}(x,0)$ при $0 \le x \le 1$.

Основной результат состоит в следующем: если выполнены условия A_1-A_3, то для достаточно малых ε задача (1), (2) имеет решение $u(x,t,\varepsilon)$ и выполняется предельное равенство

$$\lim_{\varepsilon \to 0} u(x,t,\varepsilon) = \breve{u}(x,t), \quad x_0(t) \le x \le x_1(t), \quad 0 < t \le T.$$

Библиографический список

1. Васильева, А.Б. Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений / А.Б. Васильева, В.Ф. Бутузов. – М: Высшая школа, 1990. – 208 с.

2. Бутузов, В.Ф. Сингулярно возмущенные задачи в случае смены устойчивости / В.Ф. Бутузов, Н.Н. Нефедов, К.Р. Шнайдер // Итоги науки и техники. Сер. Совр. математика и ее прилож. Тематические обзоры. – М.: ВИНИТИ, 2002. – Т. 109. Дифференц. уравнения. Сингулярные возмущения.

3. Бутузов, В.Ф. О сингулярно возмущенном уравнении в частных производных первого порядка в случае пересечения корней вырожденного уравнения / В.Ф. Бутузов, Е.А. Деркунова // Диференц. уравнения. – 2009. – Т. 45, № 2. – С. 180–190.

К содержанию

УДК 370.00

О КОМПЛЕКСНОМ ДИФФЕРЕНЦИРОВАННОМ ПОДХОДЕ К ИЗУЧЕНИЮ МАТЕМАТИКИ В ТЕХНИЧЕСКОМ ВУЗЕ

Л.А. Логинова

В статье отражены некоторые аспекты комплексного дифференцированного обучения математике студентов; сформулированы условия, обеспечивающие эффективное осуществление комплексного дифференцированного обучения.

Ключевые слова: комплексное дифференцированное обучение математике, математическое образование, дифференциация обучения, индивидуальные качества.

Современный подход к стратегии развития системы высшего профессионального образования заключается в возрастании требований общества к уровню подготовки квалифицированного специалиста. Первостепенной задачей высшего профессионального образования становится подготовка конкурентоспособного, компетентного работника. В связи с этим необходима разработка практических подходов к организации образовательного процесса, позволяющего повысить качество подготовки выпускника высшей профессиональной школы.

Математика является интегрирующей составляющей при изучении многих дисциплин в техническом вузе, она закладывает теоретическую базу для изучения специальных дисциплин и составляет основу общенаучной подготовки специалиста. В связи с этим предъявляются высокие требования к уровню математических знаний. Математическое образование формирует такие качества специалиста, как логическая стройность и строгость умозаключений, пространственное воображение, умение привести убедительные и аргументированные доказательства, видеть все в целом и деталях, проанализировать ситуацию и найти нестандартное решение.

Как мы все знаем, математика – это одна из дисциплин, при изучении которой у студентов возникают большие трудности по ее овладению. Это обусловлено такими причинами как: ограниченный запас математических знаний (наличие пробелов в школьной математической подготовке); недооценка роли математики в будущей профессиональной деятельности (многие студенты не считают, что математика пригодится им в их профессиональной деятельности, а также при изучении других дисциплин по выбранной специальности); возрастание доли самостоятельной работы студентов и недостаточное владение навыками самостоятельного учебного труда; процесс обучения строится без учета индивидуальных особенностей студентов; не осуществляется дифференциация дидактического материала; переход на лекционно-семинарскую систему занятий; не достаточное умение работать с учебной литературой, студенты испытывают затруднения в дифференциации главного и второстепенного в содержании лекций, пособий и другой литературы; наличие преемственности между различными разделами курса высшей математики, что приводит к затруднениям при восприятии материала новой темы в случае отсутствия достаточного уровня усвоения материала других тем.

В высшей школе практикуется традиционная форма обучения, которая характеризуется: едиными для академической группы стратегическими и тактическими целями обучения; реализацией этих целей посредством единого содержания, системы заданий, изложенных на едином для всех уровне, в одно и тоже время; руководством преподавателя учебной деятельностью всей группы студентов; совместной работой студентов в группе в едином для всех режиме [1].

Теоретические исследования и изучение практики преподавания в высших учебных заведениях показали, что в условиях существующих педагогических технологий высшей школы преобладает единообразие и усредненный подход к студентам, хотя в рамках одной группы наблюдается большой разброс уровня знаний, умений обучающихся по математике.

Это объясняется тем, что в вуз поступают студенты из школ с разными программами и разным уровнем изучения математики и как следствие с разным уровнем знаний, умений по предмету; разными индивидуальными способностями и задатками; они владеют не на достаточном уровне такими логическими методами познания, как синтез, анализ, индукция, дедукция, сравнение, аналогия, абстрагирование, обобщение, конкретизация, классификация и др. Поэтому решение проблемы дифференциации обучения математике студентов является актуальным.

Исследователи указанной проблемы отмечают, что дифференциация приводит к достижению разнообразия в образовании, что является залогом его стабильности, обеспечивает возможность выбора наиболее эффективных образовательных технологий [4, 5, 6].

Сущность дифференцированного подхода в обучении студентов состоит, на наш взгляд, в том, чтобы идти в образовательном процессе от личностных особенностей, которыми располагают студенты, обучать его с учетом потенциальных возможностей, которые необходимо актуализировать. Мы считаем, что дифференцированный подход предполагает: переход от ориентации на усредненного обучаемого к вариативности программ обучения; переход от статистической модели знаний к процессу умственных действий; применение психолого-педагогической диагностики и коррекции личности; прогнозирование развитие личности. Он должен быть гибким и подвижным, позволяющим преподавателю в процессе обучения подходить индивидуально к каждому студенту и способствовать общей активизации учебной группы.

Существующая практика дифференцированного обучения представлена тремя направлениями: предметно-дидактическим, психологическим, социально-педагогическим [7].

Предметно-дидактическая дифференциация обучения связана с организацией научных знаний в системы в процессе обучения с учетом их предметного содержания, новизны, объективной трудности, уровня интегрированности, обеспечивающая индивидуальный подход в обучении [7]. Предметная дифференциация задает нормативную деятельность с учетом специфики научной области знания, но не учитывает имеющуюся у обучаемых индивидуальную готовность, предпочтения к предметному содержанию, виду и форме задаваемых знаний.

Психологическая дифференциация обучения – направлена на учет индивидуальных особенностей личности, понимаемых как сложное психическое образование, обусловленное генетическими, анатомо-физиологическими, социальными причинами и факторами в их сложном взаимодействии и взаимовлиянии [7].

Социально-педагогическая дифференциация обучения – ориентирована на социальный заказ и с технологической стороны связана с управлением развитием личности извне по относительно единообразной методике, реализует требования общества воспитывать личность с заранее заданными свойствами и осуществлять социализацию обучаемого не только путем овладения им нормативной деятельностью, но и через постоянное преобразование [7].

Мы полагаем, что в вузе при проектировании дифференцированного обучения студентов необходима реализация положений всех его рассмотренных вариантов, что и определяется нами как комплексное дифференцированное обучение.

Осуществление комплексного дифференцированного обучения невозможно без диагностирования учебных возможностей студентов, выделения временных типологических групп и организации учебного процесса в соответствии с реальными способностями студентов и ориентацией на зону ближайшего развития. Если преподаватель имеет представление об инди-

видуальных особенностях того или иного студента, он будет знать, как они влияют на его учебно-познавательную деятельность: как управляет он своим вниманием, быстро ли и прочно запоминает; долго ли обдумывает вопрос; как быстро воспринимает учебный материал и др. Учет психофизиологических, интеллектуальных и психических черт важен для достижения цели – повышения эффективности обучения.

В ходе исследования нами были выделены индивидуальные качества, которые необходимо учитывать при комплексном дифференцированном обучении студентов. К ним мы отнесли: общие и специальные способности – обучаемость, способность к творчеству; учебные умения – познавательная самостоятельность; обученность – уровень предварительных знаний; мотивы самообразования; работоспособность; познавательные интересы; память; индивидуальный стиль деятельности; глубина и прочность усвоения знаний [2].

По результатам изучения индивидуальных социальных, психологических и интеллектуальных особенностей для достижения поставленных учебно-воспитательных целей и задач группу необходимо разбить на подгруппы.

Первая подгруппа – состоит из студентов, которые по разным причинам не имеют интереса к изучению математики, имеют слабый уровень математической подготовки. Студенты этой группы пассивны на занятиях, у них большие пробелы в знаниях, не проявляют любознательности, самостоятельности, стремятся получить результат без достаточного осмысления. Склонны выбирать легкие пути достижения цели, не скрывают незаинтересованности в работе, однако, вынужденные приспосабливаться к обстоятельствам, для получения положительной оценки пытаются списать, получить подсказку.

Вторая группа – состоит из студентов, которые имеют недостаточный уровень математической подготовки, знания по математике у них поверхностные и разрозненные. Они стремятся получить знания для овладения своей будущей профессией, хотя это желание носит неустойчивый и непостоянный характер. Студенты этой подгруппы не могут реально оценить уровень собственной математической подготовки, берутся решать сложные задачи. Однако пробелы в знаниях, нередко достаточно значительные, приводят к тому, что большая часть материала остается непонятой. Студенты не всегда осознают значимость знаний и умений, полученных при изучении математики, для решения будущих профессиональных задач. Первая и вторая подгруппы относятся к подгруппе первого уровня, который является минимальным, необходимым уровнем, обеспечивающим уровень знаний требуемых Государственным образовательным стандартом. Студенты, обучающиеся по данному уровню должны знать формулировки всех основных определений, свойств, формул и теорем, иметь твердые представления обо всех изучаемых понятиях, уметь применять теоретические знания для решения стандартных и типовых задач.

Третья подгруппа студентов – подгруппа второго уровня. Эта подгруппа состоит из студентов, которые имеют средний уровень математической подготовки. Их отличает умение выделять существенные и второстепенные признаки, действовать по аналогии, выполняют работу, как правило, чисто механически, они не берутся решать самостоятельно трудные задачи. Обучаясь по второму уровню, студенты кроме требований, предъявляемых в первом уровне обучения, должны знать вывод и доказательства основных формул, теорем и свойств, иметь представление о роли, месте и связи материала изучаемых тем со своей профессиональной деятельностью.

Четвертая подгруппа – подгруппа третьего уровня – состоит из студентов, которые понимают значение математики для изучения других наук и учебных дисциплин, они достаточно хорошо математически подготовлены и имеют достаточно высокий уровень интеллектуального развития. Это уровень с повышенными, по сравнению с предыдущими уровнями, требованиями и включающий их объем. Студент, обучающийся по повышенному уровню, должен знать и уметь доказывать и выводить основные формулы, теоремы и свойства. Уметь самостоятельно прорабатывать теоретический материал и пользоваться им в практической деятельности, в свободной форме грамотно и четко излагать и выделять ключевые теоретические понятия и основные практические выкладки. Свободно пользоваться теоретическими знаниями при решении практических задач и применять знания в нестандартных ситуациях, связанных со своей профессиональной деятельностью.

Для каждой подгруппы, с учетом поставленных учебно-воспитательных проблем, целей и задач, индивидуальных особенностей студентов подгруппы, разрабатываются траектории обучения, выбираются средства и методы обучения в зависимости от формы и вида занятия. Совокупность форм, методов, средств и траектории обучения определяет конкретное педагогическое воздействие на студентов каждой подгруппы.

И в заключении хотелось отметить ряд важных условий, выполнение которых необходимо для успешного и эффективного осуществления комплексного дифференцированного обучения математике:

- реализация комплексного дифференцированного обучения невозможна без учета в процессе обучения индивидуальных интеллектуальных и психологических особенностей студентов;
- для осуществления комплексного дифференцированного обучения необходимо наличие разработанного дидактического обеспечения, дающего возможность самообразования, саморазвития, самовыражения студентов; свободу выбора каждым студентом форм и способов усвоения учебного материала; возможность выбора преподавателем тех форм и того содержания учебного материала, которые позволяли бы осуществлять педагогическую поддержку каждого студента с учетом целей его индивидуального развития [3];

- следует особо подчеркнуть приоритет фундаментальных знаний: каждый студент должен овладеть определенным объемом математических знаний, умений, необходимых для получения выбранной профессии и для продолжения изучения или применения математики в дальнейшем непрерывном образовании. При этом должен действовать принцип «минимакса»: предлагать студенту содержание образования по максимуму и проверять, чтобы он усвоил определенный базовый объем знаний, необходимый для его дальнейшего обучения и работы по выбранной специальности;
- дифференцированному подходу к обучению свойственны такие формы работы, в основе которых лежит совместная или самостоятельная учебно-познавательная деятельность студентов, при этом преподавателем осуществляется лишь общее руководство такой деятельностью. Функцией преподавателя является не передача готового знания, а организация такой работы студентов, при которой они смогут самостоятельно решить поставленную проблему, применить свои знания в изменившихся условиях или в новой ситуации.

Мы считаем, что комплексное дифференцированное обучение математике студентов должно быть направлено на развитие таких его личных качеств как: развитие потребности в профессионально ориентированных знаниях, что достигается путем использования на занятиях по математике индивидуальных заданий, содержащих прикладные профессионально ориентированные задачи; развитие логического и математического мышления – достигается путем включения задач на доказательство, смекалку, ребусов, творческих задач, заданий на отыскание ошибки в предложенном решении, задач с недостатком или избытком данных, поисковых заданий на отыскание рационального способа решения; развитие интеллектуальных качеств студента: математическая индукция, логическое, пространственное, образное, техническое мышление, память, внимание, пространственное воображение и так далее; развитие интереса к изучению математике, – предполагает использование учебно-профессиональных задач на занятиях и в качестве заданий для самостоятельной работы.

Таким образом, как показали результаты проведенного нами педагогического исследования, применение комплексного дифференцированного обучение математике способствует повышению качества профессиональной подготовки будущего специалиста, а также формированию социально активной, творческой личности.

Библиографический список

1. Бикмурзина, Р.Р. Дифференцированный подход к формированию познавательной самостоятельности студентов младших курсов вузов в процессе обучения математике: автореф. дис. … канд. пед. наук / Р.Р. Бикмурзина. – Саранск, 1996. – 18 с.

2. Логинова, Л.А. Комплексное дифференцированное обучение как средство повышения качества профессиональной подготовки курсантов военно-инженерных вузов (на примере преподавания математики): дис. … канд. пед. наук / Л.А. Логинова. – Челябинск., 2008. – 205 с.

3. Логинова, Л.А. Познавательная самостоятельность как основа функционирования комплексного дифференцированного обучения курсантов / Л.А. Логинова // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Образование, здравоохранение, физическая культура». – 2006. – Вып. 9. – № 16 (71). – С. 194–197.

4. Жафяров, А.Ж. Индивидуализация и дифференциация в педагогической теории и практике (анализ отечественного опыта) / А.Ж. Жафяров, Е.С. Никитина, М.Е. Федотова. – Новосибирск: Изд. НГПУ, 2004. – 36 с.

5. Парышев, Ю.В. Дифференцированное обучение как условие оптимизации образовательного процесса: дис. … канд. пед. наук / Ю.В. Парышев. – СПб., 2004. – 143 с.

6. Унт, И.Э. Индивидуализация и дифференциация обучения / И.Э. Унт. – М.: Педагогика, 1990. – 188 с.

7. Якиманская, И.С. Личностно-ориентированное обучение в современной школе / И.С. Якиманская. – М., 1997. – 96 с.

К содержанию

УДК 51(07) + 378.147

ОРГАНИЗАЦИЯ ЦЕННОСТНО-ОРИЕНТИРОВАННОГО ОБУЧЕНИЯ МАТЕМАТИКЕ

В.И. Осмоловский

Для реализации ценностно-ориентированного обучения математике должна быть обеспечена соответствующая организация структурных компонентов управления этим процессом. Рассмотрены организационные требования к содержанию обучения, его средствам, методам и формам, а также соответствующие требования для организации взаимодействия студентов с преподавателями.

Ключевые слова: управление и организация процесса обучения; содержание, методы, средства, формы ценностно-ориентированного обучения математике.

С точки зрения науки управления понятие «организация» трактуется как формирование управляемой и управляющей систем – объекта и субъекта управления [1]. В педагогической науке управление – это такая организация учебного процесса, такое воздействие на него, которое приближает его к цели [7]. Таким образом, организация как составная часть управ-

ления учебным процессом, сопровождает его, оснащает, обеспечивает достижение цели. Цель ценностно-ориентированного обучения по учебной дисциплине – развитие не только интеллектуальных (знания и умения), но и морально-волевых и эстетических качеств личности студента. Усиление положительных и ослабление отрицательных влияний в том числе и во внеучебное время. Одно из основных условий достижения поставленной педагогической цели – соответствующая организация структурных компонентов системы управления.

Объектом управления являются интеллектуальные, морально-волевые и эстетические качества личности студента, обобщенно представленные в ценностных категориях истины, добра и красоты. В плане организации необходимо обеспечить получение информации об исходном состоянии управляемого объекта, определить не только наличный уровень соответствующих качеств, но и психологические ценностные установки. Для этого разработан специальный тест. Методика его составления и проведения тестирования описана в прошлых публикациях [5]. Систематическая обратная связь и соответствующая коррекция должны быть организованы на весь период обучения (наблюдение, тестирование, создание ситуаций выбора и т.п.).

Следующий компонент системы управления – содержание обучения. В аспекте организации требуется обеспечить ориентацию содержания обучения, а также его методов, форм и средств не только на истину, а на всю триаду категориальных ценностей в комплексе.

В настоящее время содержание обучения математике ориентировано только на истину, причем часто в неявной форме. Требуется существенная переработка содержания обучения математике с акцентом на все три категориальные ценности в явной форме. Такая переработка содержания обучения должна включать элементы историзма, философские начала, биографические этюды, духовные и эстетические аспекты математики, новейшие достижения физики, приложения математики в профессиональной деятельности инженеров, экономистов, других специалистов и т.п. Компонент содержания учебной дисциплины – теория математики и история ее развития представлены в процессе обучения ценностно нейтрально или, в лучшем случае, с ориентацией только на истину. Потенциальные возможности ценностного ориентирования остаются без использования педагогами. Это происходит потому, что теория науки и история ее развития подвергнуты только дидактической переработке в русле когнитивно-информационной направленности обучения. Такая же односторонность характерна и для другого компонента содержания учебной дисциплины – способов деятельности как репродуктивных, так и творческих. Для эффективного ценностного ориентирования эти компоненты содержания учебной дисциплины должны быть подвергнуты педагогической переработке, обеспечивающей не только информационную, но и эмоционально-ценностную направленность на общечеловеческие ценности.

Теорию науки и способы деятельности необходимо представить, с одной стороны, в перспективной направленности на будущую профессиональную деятельность, а с другой стороны – в ретроспективной направленности и эмоциональной насыщенности в русле общечеловеческих ценностей с учетом жизненной смысловой сферы студентов.

С точки зрения философской герменевтики образование должно учить пониманию, а «понимание лежит в основе добра» [6]. Истинное понимание сопровождается переживанием и сопереживанием, поэтому учебный материал должен быть нацелен на обеспечение эмоциональной и когнитивной эмпатии. Эту мысль высказывал еще Л.С.Выгодский: «только то знание может привиться, которое прошло через душу ученика» [2]. Вместе с тем ценностная направленность и эмоциональное наполнение содержания обучения – это трудная и мало разработанная проблема. Требуется большая подготовительная работа, в которой необходимо использовать специфику математики – представлять учебный материал в виде системы задач, связанных с жизненными планами студентов, обеспечивать историчность содержания обучения и его нравственную регуляцию через изучения выдающихся личностных качеств ученых, их моральных принципов и поступков, использовать имитационные задачи, требующие нравственного выбора, представлять учебную информацию не только как результат, но и как эмоционально окрашенный процесс ее добывания.

Результатом будет не только переработанное содержание обучения, но и ценностно-ориентированные средства обучения (учебные пособия, компьютерные программы, демонстрационные и раздаточные дидактические материалы и т.п.). Учебное пособие ценностно-ориентированного управляющего типа по математике предполагает, что обеспечиваются управляющие воздействия, под которыми понимаются элементы консультационной поддержки (общие указания, конкретные рекомендации, ожидаемые промежуточные результаты, справочные сведения, корректирующие замечания и т.п.). Состав элементов определяется конкретным заданием для самостоятельного выполнения, но деятельность студентов не должна быть полностью детерминирована, чтобы оставались возможности для собственных усилий, размышлений, попыток [4].

Наборы заданий для самостоятельного выполнения ориентированы на активный поиск истины (проблемные задания, решение двумя и более способами, исторические казусы, задания на материале будущей специальности студентов, задачи с «подвохом», эвристические приемы решения задач и т.п.). Однако этого не достаточно, необходима ориентация на нравственные и эстетические ценности, что для учебного пособия по математике пока является нерешенной задачей. Возможные пути решения рассмотрены выше при анализе содержания ценностно-ориентированного обучения математике.

Перспективно создание специальных компьютерных программ для сопровождения курса лекций, в которых возможно представление не столько наборов задач, сколько разнообразных видеоматериалов, иллюстрирующих интеллектуальные, нравственные и эстетические аспекты учебного материала (отрывки из кинофильмов, иллюстрации использования научных понятий на практике, представление в динамике изучаемых понятий с акцентом на их нравственные и эстетические составляющие, красота природы и ее математическое описание, интервью с учеными и производственниками и многое другое).

Для организации ценностно-ориентирующего обучения математике кроме содержания и средств обучения необходим также выбор методов и форм обучения. М.Е.Дуранов отмечает, что выбор методов обучения зависит от содержания процесса обучения, его логики, уровня подготовленности участников педагогического процесса, целей обучения, наличия средств обучения, логики самого процесса [3]. В ценностно-ориентирующем обучении происходит расширение его содержания и обогащение его целей, поэтому методы обучения рассматриваются во взаимосвязи с методами воспитания как способы организации такого взаимодействия преподавателей и студентов, которое направлено на усвоение содержания образования и формирование соответствующей ценностной ориентации личности студента.

Методы информационно-убеждающие обеспечивают организацию передачи ценностно-ориентирующей учебной информации (словесные, наглядные; индуктивные и дедуктивные; создание проблемных ситуаций учебного и нравственного характера). Методы инструктивно-практические обеспечивают организацию деятельности студентов по усвоению и практическому использованию полученной информации (практические; репродуктивные и проблемно-поисковые; метод самостоятельной работы студентов). Методы, побуждающие и контролирующие, обеспечивают организацию стимулирования и контроля учебной деятельности студентов (методы формирования профессиональных интересов; эмоционально-нравственной ситуации; долга и ответственности; методы устного и письменного контроля; методы самоконтроля).

Методы обучения реализуются в организационных формах обучения. При обучении математике в вузе основные формы – это лекции, практические занятия, консультации. Возможности лекции в ценностном ориентировании значительно расширяются с применением технических средств, таких как компьютер, видеокамера, видеопроектор, видеоплеер, средства обратной связи. Но все это требует предварительной подготовки демонстрационных материалов, программ, видеофильмов, наборов заданий.

Практические занятия представляют большие возможности для использования фронтальных, групповых и индивидуальных форм организации

выполнения заданий по изучаемой теме, в том числе заданий нравственного характера и адаптированных к будущей профессиональной деятельности. Консультации должны быть максимально индивидуализированы с учетом наличного уровня знаний и умений по учебной теме, а также морально-волевых и эстетических ориентаций студентов. Именно при индивидуальной работе со студентом есть возможность более эффективно использовать информационно-убеждающие методы для корректировки ценностной ориентации личности. Здесь перспективно использовать элементы тьюторской системы, где главное – пара «тьютор – студент» и происходит субъект-субъектное взаимодействие, развивающее компетентность студентов, а это не только знания и умения, но и направленность личности (мотивация, ценностные ориентации, инициативность, целеустремленность и другие качества). Исследователи предлагают и другие формы обучения – конференции и семинары, диспуты, использование ситуаций будущей профессиональной деятельности, доклады и сообщения [8].

Ценностно-ориентированный процесс обучения предъявляет к преподавателям требования быть носителями соответствующих качеств личности, быть примером для студентов. Это – высоконравственное поведение, честность, доброжелательность, бескорыстие, ответственность, добросовестность, безупречный внешний облик, требовательность не только к студентам, но и к себе, поиск новых способов ценностного ориентирования.

Эстетическим требованиям должны удовлетворять учебные аудитории и другие помещения учебных корпусов, жилые комнаты общежитий, благоустройство территории, внешний вид зданий университетского городка.

Организация и осуществление ценностно-ориентированного обучения математике приводит к определенным результатам, которые должны быть оценены по соответствующим критериям и в сравнении с исходным состоянием объекта управления. Развитость интеллектуальной сферы личности студента – это не только знания и умения, но и сообразительность, находчивость, целеустремленность, трудолюбие, упорство. Нравственная сторона личности студента раскрывается в таких качествах, как уважение к людям, доброжелательность, товарищеская взаимопомощь, отзывчивость, соблюдение этических норм. Эстетическая направленность личности проявляется в понимании красоты, стремлении ее создавать в своем внешнем облике и в окружающей среде, бережном отношении к прекрасному во всех его проявлениях. Для оценки используются наблюдения, тестирование, индивидуальные беседы, мнения преподавателей.

Полученные результаты и их оценка позволяют сделать вывод об эффективности описанной организации ценностно-ориентированного обучения математике и внести соответствующие коррективы для следующего этапа (семестр, учебный год) такого обучения.

Библиографический список

1. Васильев, Ю.В. Педагогическое управление в школе: методология, теория, практика: моногр. / Ю.В.Васильев. – М.: Педагогика, 1990. – 144 с.
2. Выгодский, Л.С. Педагогическая психология / Л.С.Выгодский. – М.: Педагогика, 1991. – 480 с.
3. Дуранов, М.Е. Педагогический процесс и педагогическая деятельность: проблемы, исследования и организация: моногр. / М.Е.Дуранов. – М.: Гуманит. издат. Центр ВЛАДОС, 2009. – 365 с.
4. Осмоловский, В.И. Учебное пособие ценностно-ориентированного управляющего типа / В.И.Осмоловский // Учебное пособие в условиях реструктуризации учебного процесса: Материалы научно-практической конф. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2000. – С. 42–44.
5. Осмоловский, В.И. Ценностное ориентирование студентов в процессе обучения математике / В.И. Осмоловский, Ю.А. Ахкамова // Вестник ЮУрГУ. – 2013. – Т.5, № 2. – С. 116–119.
6. Сулима, Н.И. Философская герменевтика и образование / Н.И. Сулима // Педагогика. – 1999. – № 1. – С. 36–43.
7. Талызина, Н.Ф. Как управлять усвоением знаний / Н.Ф.Талызина // Советская педагогика. – 1983. – № 3. – С. 17–23.
8. Шефер, О.Р. Нравственное воспитание учащихся в процессе обучения физике: моногр. / О.Р.Шефер. – М.: Педагогика, 2003. – 268 с.

К содержанию

УДК 517.977.58

ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ СМЕШАННОГО ЖЕСТКОГО УПРАВЛЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ЛЕОНТЬЕВСКОГО ТИПА

А.А. Эбель

Рассматривается постановка задачи смешанного жесткого управления системы уравнений леонтьевского типа.

Ключевые слова: задача смешанного жесткого управления, система уравнений леонтьевского типа, условие Шоултера-Сидорова.

Пусть M и L – квадратные матрицы $n \times n$, причем $\det L = 0$, матрица M (L, p)–регулярна ($\exists \lambda \in C : \det(\lambda L - M) = 0$ $\exists p \in \{0\} \cup N$ равное нулю, если в точке ∞ L – резольвента $(\lambda L - M)^{-1}$ матрицы M имеет устранимую точку и равна порядку полюса в противном случае).

При постановке задачи смешанного жесткого управления для систем леонтьевского типа введем в рассмотрение пространства:

– состояний:

$$X = H^1(R^n) = \{x \in L_2((0;\tau);R^n) : \dot{x} \in L_2((0;\tau);R^n)\};$$

– управлений:

$$U = H^{p+1}(R^n) = \{u \in L_2((0;\tau);R^n) : \dot{u} \in L_2((0;\tau);R^n)\},$$

$$U^0 = R^n.$$

Выделим в U^0 компактное и выпуклое множество начальных допустимых управлений U^0_{ad}, а также компактное и выпуклое множество U_{ad} в пространстве U.

Для решения задачи смешанного жесткого управления будем искать тройку $(v_0, v(t), x(v_0, v(t))) \in U^0_{ad} \times U_{ad} \times X$ почти всюду удовлетворяющую системе леонтьевского типа:

$$L\dot{x}(t) = Mx(t) + Du(t) + f(t), \tag{1}$$

с начальным условием Шоултера-Сидорова:

$$\left[R^L_\mu(M)\right]^{p+1}(x(0) - u_0) = 0, \tag{2}$$

при этом

$$J(v_0, v(t)) = \min_{(u_0, u(t)) \in U^0_{ad} \times U_{ad}} J(u_0, u(t)), \tag{3}$$

где

$$J(u_0, u(t)) = \sum_{q=0}^{1} \int_0^\tau \left\| Cx^{(q)}(t, u_0, u(t)) - Cx_0^{(q)}(t) \right\|^2 dt, \tag{4}$$

$$t \in (0;\tau),\ \tau \in R_+.$$

Приведем без доказательства теорему о существовании единственного решения задачи (1), (2).

Теорема. Пусть матрица M (L,p) – регулярна, $p \in \{0\} \cup N$, причем $\det M \neq 0$. Тогда существует единственное решение $(v_0, v(t), x(v_0, v(t))) \in U^0_{ad} \times U_{ad} \times X$ – точка минимума функционала (4), а $x(v_0, v(t))$ – сильное решение задачи (1), (2) и определяется формулой:

$$x(v_0, v(t)) = \lim_{k\to\infty} \Bigg[X^t_k v_0 - \sum_{q=0}^{p} \left(M^{-1}(I - Q_k)L\right)^q M^{-1}(I - Q_k)\left(f(t) + Du(t)\right)^{(q)} +$$

$$+ \int_0^\tau R^{t-s}_k Q_k \left(f(s) + Du(s)\right) ds \Bigg]. \tag{5}$$

Здесь:

$$X_k^t = \left(\left(L - \frac{t}{k} M \right)^{-1} L \right)^{k(p+1)},$$

$$Q_k = \left(k L_k^L (M) \right)^{p+1},$$

$$R_k^t = \left(\left(L - \frac{t}{k} M \right)^{-1} L \right)^{k(p+1)-1} \cdot \left(L - \frac{t}{k} M \right)^{-1}.$$

Будем искать приближенные решения задачи (1) – (4) в виде:

$$u_0 = \mathrm{col}(a_{01}, \ldots, a_{0n}),$$

$$u(t) = \mathrm{col}\left(\sum_{j=0}^{\ell} a_{1j} t^j, \ldots, \sum_{j=0}^{\ell} a_{nj} t^j \right).$$

В результате алгоритм нахождения приближенного решения (1)–(4) сводится к решению задачи выпуклого программирования относительно массива $A_{n \times \ell+2} = (a_{ij})$ [1].

Преимуществом рассмотрения задачи смешанного жесткого управления в сравнении с задачами стартового и оптимального управления является более гибкое регулирование управляющего воздействия.

Применим задачу смешанного жесткого управления на примере динамической балансовой модели:

$$x(t) = Ax(t) + B\dot{x}(t) + g(t). \qquad (6)$$

Здесь элемент a_{ij} матрицы прямых затрат A означает количество продукции i-й отрасли необходимой для производства единицы продукции и/или услги j-й отрасли. Элемент b_{ij} матрицы B представляет определенный технологический запас особого типа благ (машины, механические инструменты, промышленные здания и сооружения, рабочий запас первичных и промежуточных материалов), производимых i-й отраслью, который используется j-й отраслью для производства единицы продукции и/или услуги им выпускаемым, или удельные капитальные вложения. В любой динамической балансовой модели предприятия, матрица B всегда содержит нулевые строки, а условие $\det B = 0$ является естественным в экономических приложениях, так как не все отрасли являются производительными. Элементы $g_i(t)$ вектор-функции $g(t)$ показывают выпуск конечного продукта i-й отраслью или спрос на продукцию i-й отрасли. Элементы $x_i(t)$ вектор-функции $x(t)$ есть значения валового выпуска продукции i-й отрасли. Т.е. система уравнений (6) означает, что общая стоимость валового выпус-

ка продукции распределяется на внутреннее потребление Ax, развитие основных производственных фондов $B\dot{x}$ и на внешнее потребление g(t).

Очевидно, что систему уравнений (6) можно записать в следующем виде:

$$L\dot{x}(t) = Mx(t) + f(t), \qquad (7)$$

где матрица $M = I - A$, $L = B$, $y(t) = -g(t)$ с соответствующим экономическим смыслом.

Работа любой экономической системы подчинена определенным целям, для достижения которых необходимо управление такой системой, поэтому включение в динамическую балансовую модель управления и приведение к одной из задач смешанного управления приводит к получению более адекватным реальным экономическим задачам моделям.

Начальное условие Шоултера – Сидорова (2) имеет тот же экономический смысл, что и задача Коши, т.е. состояние системы – объем продукции или услуги – в начальный момент времени. Содержания управления в начальном условии (2) $u_{0i}(t)$ для того или иного i-го вида деятельности предприятия исходя из смысла задачи может принимать только неотрицательные значения, и подразумевать необходимость начальных инвестиций в соответствующий вид деятельности.

В отличие от стартового управления для начинающего работать предприятия (проекта) только начальное управляющее воздействие редко имеет место применения на практике. В задаче (1)–(4) управление входит в систему (1), управление $u_i(t)$ для каждого i-го вида деятельности предприятия может принимать как положительные, так и неположительные значения, если матрица $B = I$. Положительность значений $u_i(t)$ свидетельствуют о доходности i-го вида деятельности, а сами значения определяют количество ресурсов, которые могут быть перенаправлены, например, в другие отрасли. Отрицательность значений $u_i(t)$ свидетельствуют о затратности i-го вида деятельности, а сами значения определяют количество ресурсов, которые востребованы, например, из других отраслей.

Функционал стоимости (4) отражает цели управления экономической системой. Учитывая, что $x_0(t)$ – плановый выпуск продукции, $Cx(t)$ и $Cx_0(t)$ – это фактическая и плановая величина, выражаемая через выпуск продукции, например, прибыль. Отличительной особенностью задачи смешанного жесткого управления системы уравнений леонтьевского типа является то, что критерием качества управления будет только достижение плановых показателей с сохранением плановых темпов прироста без учета управления как u_0, так и u.

В докладе представлены результаты расчетов для балансовой модели А.Г. Гранберга [2]. Эта модель народного хозяйства состоит из трех отраслей: производство орудий труда, производство предметов труда и произ-

водство предметов потребления. Капитальные вложения осуществляются только первой отраслью. Вторая обеспечивает промежуточное потребление. Весь фонд потребления учитывается третьей отраслей.

Расчеты проводились согласно данным приведенным для модели А.Г. Гранберга [2]:

$$L = \begin{pmatrix} 1,5 & 1,6 & 0,9 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \; M = \begin{pmatrix} 0,9 & -0,116 & -0,075 \\ -0,5 & 0,452 & -0,425 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$f(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -32-10t \end{pmatrix}, \; x_0(t) = \begin{pmatrix} 18+t \\ 50+t \\ 32+10t \end{pmatrix}.$$

Матрицы D, C и N приняты единичными.

Библиографический список

1. Келлер, А.В. Об алгоритме решения задач оптимального и жесткого управления / А.В. Келлер // Программные продукты и системы. – 2011. – № 3. – С. 170–174.

2. Гранберг, А.Г. Динамические модели народного хозяйства / А.Г. Гранберг. – М.: Экономика, 1985. – 239 с.

К содержанию

УДК 517.927.21

КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ДАННЫМИ

В.И. Заляпин, Ю.С. Попенко, Е.В. Харитонова

Исследованы достаточные условия однозначной разрешимости в неклассической краевой задаче для линейного обыкновенного дифференциального уравнения. С помощью метода квадратур установлена связь рассматриваемой задачи с простой задачей Валле-Пуссена.

Ключевые слова: краевая задача; распределенные условия; многоточечная задача Валле-Пуссена.

Введение. Различные физические и биологические процессы, а также высокоточные динамические измерительные процедуры приводят к рассмотрению неклассических задач для обыкновенных дифференциальных уравнений.

Здесь возникают задачи типа задачи Валле-Пуссена ([1]):

$$L(x) = x^{(n)} + p_{n-1}(t)x^{(n-1)} + ... + p_1(t)x' + p_0(t) = f(t)$$
$$t \in [a;b], \quad a \le t_1 \le ... \le t_k \le b, \quad x^{(s)}(t_j) = X_{js},$$
$$s = 0,1,...,r_j - 1,\ j = 1,2,...,k, \quad \sum_{j=1}^{k} r_j = n$$

или задачи Ильина-Моисеева ([2]):

$$\frac{d}{dt}\left(p(t)\frac{dx}{dt}\right) - q(t)x = f(t),$$
$$x(0) = 0, \quad \sum_{i=1}^{k} a_i x(t_i) = x(1), \quad t \in [0;1],$$
$$0 < t_1 < ... < t_k \le 1.$$

Эти задачи стимулировали интерес исследователей к общим многоточечным краевым задачам:

$$L(x) = x^{(n)} + p_{n-1}(t)x^{(n-1)} + ... + p_1(t)x' + p_0(t) = f(t),$$
$$t \in [a;b], \quad a \le t_1 \le ... \le t_k \le b,\ U_i(x) = X_i,$$
$$i = 1,2,...,n, \quad U_i(x) = \sum_{j=1}^{k} a_i^j x(t_j).$$

Впервые подобные задачи рассматривались еще в начале прошлого века. Впоследствии ими интенсивно занимались многие математики, из которых отметим Азбелева Н.В., Левина А.Ю., Покорного Ю.В., их учеников и последователей.

Задачи с распределенными данными

Мы будем рассматривать, близкую в идейном плане к упомянутым выше, задачу с распределенными данными:

$$L(x) = x^{(n)} + p_{n-1}(t)x^{(n-1)} + ... + p_1(t)x' + p_0(t) = f(t)$$
$$t \in [a;b], \quad U_i(x) = X_i, i = 1,2,...,n, \qquad (1)$$
$$U_i(x) = \int_a^b g_i(t)x(t)dt$$

где функции $g_i(t),\ i = 1,2,...,n,$ будем предполагать линейно независимыми, а коэффициенты уравнения – непрерывными на отрезке $[a;b]$. Очевидно, в силу линейности задачи (1), её однозначная разрешимость эквивалентна однозначной разрешимости соответствующей однородной задачи:

$$L(x) = 0, U_j(x) = 0. \qquad (2)$$

Пусть $\varphi_1(t), \varphi_2(t), ..., \varphi_n(t)$ – фундаментальная система решений уравнения $L(x) = 0$. Любое решение этого уравнения представимо в виде:

$$x_0(t) = c_1\varphi_1(t) + c_2\varphi_2(t) + ... + c_n\varphi_n(t),$$

с некоторым набором постоянных, при этом условие однозначной разрешимости задачи (2) эквивалентно тривиальной разрешимости системы линейных относительно постоянных c_i уравнений:

$$\left\{ \sum_{i=1}^{n} c_i \int_a^b g_j(t)\varphi_i(t)dt = 0, \quad j = 1, 2, ..., n, \right.$$

т.е. невырожденности матрицы:

$$\Gamma(g, \varphi) = \left(\int_a^b g_j(t)\varphi_i(t)dt \right)_{i,j=1,...,n}. \tag{3}$$

Обозначим через $M[g_1, g_2, ..., g_n]$ линейную оболочку функций g_i, через $\{e_i^M\}_{i=1,n}$ – ортонормированный базис в M, через $N[\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_n]$ – линейную оболочку функций φ_j, соответствующий базис – через $\{e_j^N\}_{j=1,n}$. Справедлива следующая теорема.

Теорема 1. *Матрица* $\Gamma(g, \varphi)$ *вырождена тогда и только тогда, когда пересечение* M *и ортогонального дополнения к* N *непусто:* $M \cap N^{\perp} \neq 0$.

Лемма 1*.(Коваленко[3])* Если M, N, $\{e_i^M\}_{i=1,n}$, $\{e_j^N\}_{j=1,n}$ *– такие, как и выше, то имеет место равенство:*

$$\left| \left(\int_a^b g_i(t)\varphi_j(t)dt \right) \right|^2 = \left| \left(\int_a^b g_i(t)g_j(t)dt \right) \right| \cdot \left| \left(\int_a^b \varphi_i(t)\varphi_j(t)dt \right) \right| \cdot \left| \left(\int_a^b e_i^N(t)e_j^M(t)dt \right) \right|^2.$$

При этом:

$$\left| \left(\int_a^b e_i^N(t)e_j^M(t)dt \right) \right| \leq 1,$$

знак равенства в последнем неравенстве достигается тогда и только тогда, когда $M \equiv N$. *Здесь символом* $|\gamma_{ij}|$ *обозначен определитель матрицы, составленной из элементов* γ_{ij}, $i, j = 1, 2, ..., n$.

◁ Достаточность утверждения теоремы очевидно следует из леммы Коваленко. Для доказательства необходимости допустим, что матрица $\Gamma(g, \varphi)$ вырождена, но в M нет ненулевых элементов, ортогональных N, т.е. если элемент $u = \sum_1^n \alpha_i g_i(t)$ удовлетворяет условию:

$$\int_a^b u(t)\varphi_s(t)dt = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i \int_a^b g_i(t)\varphi_s(t)dt = 0, \quad s = 1,2,...,n \quad , \tag{4}$$

то это означает, что все α_i равны нулю. Соотношение (4) – система линейных уравнений относительно констант α_i, определитель которой – определитель матрицы $\Gamma(g,\varphi)$. Поскольку эта матрица предполагается вырожденной, то у системы есть ненулевое решение, а вместе с ним и ненулевой элемент $u \perp N$, что противоречит предположению. Теорема доказана.▷

Метод квадратур и задача Валле-Пуссена

Пусть

$$U_j(x) = \int_a^b g_j(t)x(t)dt = \sum_{q=1}^{n} x(t_q)w_j^q + R_j(x), \quad j = 1,2,...,n \tag{5}$$

некоторая квадратура на заданном множестве узлов $a \le t_1 < t_2 < ... < t_n \le b$ с фиксированными функциями g_j. Напомним, что квадратура (5) называется *точной* на классе функций, если для любой функции $\phi(t)$ из этого класса $R(\phi) \equiv 0$.

Лемма 2. *Если фундаментальная система решений однородного уравнения обладает на отрезке [a;b] свойством чебышёвости, то существует единственная квадратура, точная на множестве решений этого уравнения.*

◁ Рассмотрим:

$$U_j(\varphi_i) = \int_a^b g_j(t)\varphi_i(t)dt = \gamma_{ij} = \sum_{q=1}^{n}\varphi_i(t_q)w_q^j \,. \tag{6}$$

Поскольку фундаментальная система решений однородного уравнения обладает свойством чебышёвости, то матрица $\Phi = \left\| \varphi_i(t_q) \right\|_{i,q=1,n}$ невырождена (например [4]) и система (6) однозначно разрешима относительно весов w_q^j при заданных γ_{ij}.

Для произвольного решения $x_0(t)$ однородного уравнения (2) получим:

$$U_j(x) = \int_a^b g_j(t)\sum_{s=1}^{n} c_i\varphi_i(t)dt = \gamma_{ij} = \sum_{s=1}^{n} c_i \int_a^b g_j(t)\varphi_i(t)dt \,.$$

Подставляя в последнее соотношение в квадратуру (6), приходим к соотношению:

$$\sum_{s=1}^{n} c_i \int_a^b g_j(t)\varphi_i(t)dt = \sum_{s=1}^{n} c_i \sum_{q=1}^{n}\varphi_i(t_q)w_q^j = \sum_{q=1}^{n} x(t_q)w_q^j \,,$$

из которого следует справедливость доказываемого утверждения.▷

Для дальнейшего нам понадобится матричная форма системы (6) и явное выражение весов w_q^j. Введем следующие обозначения: $W = \left\| w_q^i \right\|$ –

матрица весов точных квадратур (5), $\Phi = \left\| \varphi_i(t_q) \right\|_{i,q=1,n}$ – матрица значений фундаментальной системы решений однородного уравнения в точках t_q, $U(x) = \left(U_j(x) \right)$ – вектор граничных условий, $V(x) = \left(x(t_q) \right)$ – вектор значений функции $x = x(t)$ в узлах квадратуры (6). Система (6) примет в этих обозначениях вид $W \cdot \Phi = \Gamma(g, \varphi)$.

Поскольку матрица Φ невырождена, то решение этого уравнения принимает вид:

$$W = \Gamma \cdot \Phi^{-1}. \tag{7}$$

Пусть $\tilde{x} = \tilde{x}(t)$ – решение какой-нибудь задачи Коши для неоднородного уравнения $L(x) = f$, $x = x(t)$ – решение краевой задачи (1). Положим $y(t) = x(t) - \tilde{x}(t)$. Легко видеть, что функция $y(t)$ – решение полуоднородной краевой задачи:

$$L(y) = 0, U_j(y) = X_j - U_j(\tilde{x}) = Y_j,\ j = 1, 2, ..., n \tag{8}$$

Используя лемму 2, заключаем, что существуют веса w_q^j такие, что $U_j(y) = \sum_{q=1}^{n} y(t_q) w_q^j$. Отсюда:

$$U_j(y) = \sum_{q=1}^{n} y(t_q) w_q^j = Y_j.$$

Последнее равенство в матричных обозначениях примет вид:

$$W \cdot V(y) = Y.$$

В предположении невырожденности матрицы W заключаем, что:

$$V(y) = W^{-1} Y.$$

Изложенные выше рассуждения доказывают следующую теорему:

Теорема 2. *Если $y = y(t)$ – решение краевой задачи с распределенными данными (8), матрицы $\Gamma(g, \varphi)$ и $\Phi(\varphi)$ – невырожденные, то это решение является решением простой задачи Валле-Пуссена:*

$$L(y) = 0, V(y) = W^{-1} Y.$$

Этот факт позволяет при изучении задач с распределенными условиями использовать известные факты из теории многоточечных краевых задач Валле-Пуссена.

Библиографический список

1. Сансоне, Дж. Обыкновенные дифференциальные уравнения. Т. 1 / Дж. Сансоне. – М.: ИЛ, 1953. – 275 с.

2. Ильин, В.А. Нелокальная краевая задача для оператора Штурма-Лиувилля в дифференциальной и разностной форме / В.А. Ильин, Е.И. Моисеев // ДАН СССР. –1986. – Т. 291, № 3. – С. 534–539.

3. Коваленко, С.П. Об одном равенстве для определителей / С.П. Коваленко // Математические методы анализа динамических систем. – 1983. – № 7. – С. 24–27.

4. Хартман, Ф. Обыкновенные дифференциальные уравнения / Ф. Хартман. – М.: МИР, 1970. – 727 с.

К содержанию

УДК 517.988.52

ЗАМЕЧАНИЕ К ТЕОРИИ ВОГНУТЫХ И ПСЕВДОВОГНУТЫХ ОПЕРАТОРОВ

М.Л. Катков

В настоящей работе определяется класс операторов, так называемых k-сжатий. Понятие k-сжатия является естественным обобщением понятий u_0-вогнутого и u_0-псевдовогнутого операторов, рассмотренных в [1] и [2]. Для операторов из выделенного класса доказывается сходимость итераций к неподвижной точке. Монотонность оператора не предполагается.

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

Пусть X – банахово пространство, полуупорядоченное конусом K, $K(u_0)$ – компонента, порожденная элементом $u_0 \in K$ [1].

Определение метрики, порожденной порядком:

$$\rho(x;y) = \min\left\{t:\ e^{-t}x \le y \le e^{t}x;\ x;y \in K(u_0);\ t \le 0\right\}.$$

Определение k-сжатия. Положительный оператор T, действующий в X, будем называть k-сжатием, если выполняются условия:

1) для любого $x \in K(u_0)$ $Tx \in K(u_0)$;

2) для любых $x, y \in K(u_0)$ существует $q = q(x;t)$ такое, что $0 < q(x;t) < 1$ $(t = \rho(x,y))$, при котором выполняется неравенство:

$$\rho(Tx;Ty) \le q(x;t)\rho(x;y).$$

Замечание 1. Монотонный u_0-вогнутый оператор [1] является k-сжатием.

Замечание 2. Гетеротонный u_0-псевдовогнутый оператор является k-сжатием. Действительно, пусть $\hat{T}$ – сопутствующий оператор для гетеротонного оператора T [2], пусть $t=\rho(x;y)$. Тогда имеем очевидные неравенства:

$$Tx=\hat{T}(x;x)\le\hat{T}\left(e^t y;e^{-t}y\right)\le e^{qt}\hat{T}(y;y)=e^{qt}Ty,$$

$$Ty=\hat{T}(y;y)\le\hat{T}\left(e^t x;e^{-t}x\right)\le e^{qt}\hat{T}(x;y)=e^{qt}Tx.$$

Поэтому:

$$\rho(Tx;Ty)\le q(x;t)\rho(x;y).$$

Теорема. *Пусть оператор T является k-сжатием и имеет неподвижную точку $x_*\in K(u_0)$. Тогда для любого $y_0\in K(u_0)$ последовательность $\{y_n\}$, где $y_n=T(y_{n-1})$, сходится к x_* по метрике ρ.*

Доказательство. Положим $t_n=\rho(y_n,x_*)$. Последовательность $\{t_n\}$ убывает. Предположим, что

$$t=\lim_{n\to\infty}t_n\ne 0.$$

Рассмотрим шар с центром в точке x_* радиуса t. Оператором T этот шар отображается в шар с центром в этой же точке радиуса $q(x_*,t)t$, так как оператор T есть k-сжатие. Положим ε равным $t-qt$. Возьмем n настолько большим, чтобы выполнялось неравенство $e^{t_n}<e^t+e^{\frac{\varepsilon}{2}}-1$. Положим $z=\alpha x_*+\beta y_n$, где $\alpha+\beta=1$, $\alpha>0$; $\beta>0$. Определим ρ из равенства $\beta=\dfrac{e^t-1}{e^{t_n}-1}$.

В этом случае $\rho(x_*;z)$ оказывается равным t, что очевидным образом следует из системы неравенств:

$$\left(\alpha+\beta e^{-t_n}\right)x_*\le z\le\left(\alpha+\beta e^{t_n}\right)x_*;$$

$$e^{-t_n}x_*\le y_n\le y^{t_n}x_*.$$

Непосредственной проверкой устанавливается справедливость системы неравенств:

$$e^{-\frac{\varepsilon}{2}}y_n\le\left(\alpha e^{-t_n}+\beta\right)\le z\le\left(\alpha e^{t_n}+\beta\right)y_n\le e^{\frac{\varepsilon}{2}}y_n.$$

Поэтому $\rho(Tz,Ty_n)<\dfrac{\varepsilon}{2}$.

В результате неравенство треугольника приводит к очевидному противоречию:

$$t \le \rho\left(x_*; y_{n+1}\right) \le \rho\left(Tx_*, Tz\right) + \rho\left(Tz; Ty_n\right) \le t - \frac{\varepsilon}{2}.$$

Теорема доказана.

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. – И. 36. – С. 237–380.

3. Катков, М.Л. О существовании неподвижной точки у равномерно сжимающего монотонного оператора / М.Л. Катков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5, № 2. – С. 160–161.

4. Катков, М.Л. Замечание к теории вогнутых операторов / М.Л. Катков // Наука ЮУрГУ: Материалы 65-й научной конференции. Секции естественных наук. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013. – С. 35–38.

К содержанию

УДК 519.833.7

О СИЛЬНО ГАРАНТИРОВАННОМ РЕШЕНИИ ОДНОЙ ЛИНЕЙНО-КВАДРАТИЧНОЙ ИГРЫ

К.Н. Кудрявцев, И.С. Стабулит, С.А. Шунайлова

Формализуется понятие сильно гарантированного решения в кооперативной игре двух лиц с побочными платежами и при неопределенности. В линейно-квадратичном варианте игры найден явный вид такого решения и установлены коэффициентные условия его существования.

Ключевые слова: кооперативная игра, неопределенность, риск, гарантированное решение.

Систематическое изучение кооперативных игр при неопределенности началось с монографии В.И. Жуковского [1]. В ней был заложен один из подходов к формализации различных понятий оптимальности в игровых задачах при неопределенности, основанный на построении аналога седловой точки. Однако, этому подходу свойственен ряд негативных свойств. Наиболее же существенным «минусом» является то, что опирающиеся на аналог седловой точки принципы оптимальности не устойчивы к отклонению неопределенности. Решения, оптимальность которых сохраняется при

любой реализации неопределенности, можно формализовать на основе аналога максимина [2]. Такой подход был использован в [3] для бескоалиционных игр при неопределенности, в данной работе он будет применен к кооперативной игре при неопределенности.

Рассмотрим кооперативную игру двух лиц с побочными платежами и при неопределенности в нормальной форме, которая отождествляется с кортежем:

$$\left\langle \{1,2\}, \{\mathrm{X}_i\}_{i=1,2}, \mathrm{Y}, \{f_i(x,y)\}_{i=1,2} \right\rangle. \qquad (1)$$

Здесь 1 и 2 – порядковые номера игроков, $\mathrm{X}_i \subseteq \mathrm{R}^{n_i}$ – множество *стратегий* x_i у *i*-го игрока, пара $x = (x_1, x_2) \in \mathrm{X} = \mathrm{X}_1 \times \mathrm{X}_2$ называется *ситуацией* игры (1), $\mathrm{Y} \subseteq \mathrm{R}^m$ – множество значений y, принимаемых нестохастическими неопределенными факторами, $f_i(x,y)$ – скалярная функция выигрыша *i*-го игрока $(i = 1,2)$.

Игра протекает следующим образом. Игроки совместно и согласованно выбирают свои стратегии, в результате чего складывается ситуация $x = (x_1, x_2)$. Независимо от действий игроков реализуется конкретное значение неопределенного фактора $y \in \mathrm{Y}$. На образовавшейся в результате паре $(x,y) \in \mathrm{X} \times \mathrm{Y}$ каждый *i*-й игрок $(i = 1,2)$ вычисляет свой *предварительный выигрыш* – значение функции выигрыша $f_i(x,y)$ на сложившейся паре. На следующем этапе игры игроки перераспределяют между собой образовавшийся суммарный выигрыш $f_1(x,y) + f_2(x,y)$. Полученная в результате перераспределения часть суммарного выигрыша и есть *выигрыш игрока i*. Целью *i*-го игрока является такой согласованный с партнером выбор стратегии x_i, и такое последующее перераспределение суммарного выигрыша, чтобы его окончательный выигрыш оказался по возможности *большим*, учитывая при этом возможность реализации любого значения неопределенного фактора из множества Y.

В отличие от использованного в [4] аналога седловой точки, формализуем решение игры (1) на основе аналога максимина. Для этого предположим возможность *информационной дискриминации* игроков, а именно рассматриваем игру:

$$\left\langle \{1,2\}, \{\mathrm{X}_i\}_{i=1,2}, \mathrm{Y}^{\mathrm{X}}, \{f_i(x,y)\}_{i=1,2} \right\rangle, \qquad (2)$$

отличающуюся от (1) лишь тем, что Y заменено на Y^{X} – множество всех функций $y(x)$ (*контрситуаций* в терминологии Н.Н. Красовского [5]), заданных на X со значениями в Y, m-вектор-функции $y(x)$ далее будем называть *неопределенностями в игре* (2), а функции выигрыша $f_i(x,y)$ понимать как суперпозиции $f_i(x,y) = f_i(x, y(x))$ $(i = 1,2)$.

Партия игры разыгрывается следующим образом. Игроки совместно и согласованно выбирают каждый свою стратегию $x_i \in \mathrm{X}_i$ $(i=1,2)$. В результате образуется ситуация игры (2) – упорядоченный набор стратегий $x=(x_1,x_2)\in \mathrm{X}=\mathrm{X}_1\times\mathrm{X}_2$. Предполагаем *информационную дискриминацию* игроков и *дополнительную «информированность»* неопределенности. Именно, по аналогии с иерархическими играми первый ход здесь за игроками: они выбирают свои стратегии $x_i \in \mathrm{X}_i$ $(i=1,2)$ и сообщают об этом ЛПР, «ведающему» построением неопределенностей. Второй ход за указанным ЛПР – он формирует две неопределенности в виде непрерывных на X m-вектор-функций $y^{(i)}(x)$ $(i=1,2)$ и сообщает о своем выборе игрокам. При этом предполагается, что неопределенности формируются таким образом, чтобы «максимально испортить» выигрыши отдельно каждому игроку. Игроки, используя эту информацию, выбирают ситуацию, доставляющую «хороший» выигрыш (например, гарантированный дележ) каждому из игроков.

Формализацию сильно гарантированного решения (СГР) проведем в два этапа:

Этап 1. Каждой ситуации $x\in\mathrm{X}$ и каждому игроку $i=1,2$ поставим в соответствие единственную непрерывную на X вектор-функцию $y^{(i)}(x)$ такую, что:

$$f_i\left(x,y^{(i)}(x)\right)=\min_{y\in\mathrm{Y}} f_i\left(x,y(x)\right)=f_i[x] \quad (i=1,2).$$

Этап 2. Игре (2) сопоставим кооперативную игру двух лиц с побочными платежами (без неопределенностей) – «игру гарантий»:

$$\left\langle \{1,2\},\{\mathrm{X}_i\}_{i=1,2},\{f_i[x]\}_{i=1,2}\right\rangle,$$

и найдем для нее гарантированный дележ, а именно ситуацию $x^e=(x_1^e,x_2^e)\in\mathrm{X}$ и вектор $f^e=(f_1^e,f_2^e)\in\mathrm{R}^2$, для которых выполнены:

во-первых, *условие коллективной рациональности*:

$$\max_{x\in\mathrm{X}}\left(f_1[x]+f_2[x]\right)=f_1\left[x^e\right]+f_2\left[x^e\right];$$

во-вторых, *условие индивидуальной рациональности*: если

$$f_1\left[x^e\right]+f_2\left[x^e\right]=f_1^e+f_2^e,$$

то справедлива система из двух неравенств:

$$f_1^e\ge\max_{x_1\in\mathrm{X}_1}\min_{x_2\in\mathrm{X}_2} f_1[x],\quad f_2^e\ge\max_{x_2\in\mathrm{X}_2}\min_{x_1\in\mathrm{X}_1} f_2[x].$$

Полученную в результате пару $\left(x^e, f^e\right) \in \mathrm{X} \times \mathrm{R}^2$ назовем *сильно гарантированным решением* игры (1), при этом x^e есть *сильно гарантирующая ситуация* игры (1), а f_i^e *сильно гарантированный дележ игрока i* $\left(i = 1,2\right)$.

«Игровой смысл» предлагаемого решения состоит в следующем. Если игроки выбрали стратегии $x_i \in \mathrm{X}_i$ $\left(i = 1,2\right)$, то каждый *i*-й из них «обеспечивает» себе выигрыш $f_i\left(x, y\right)$, не меньший $f_i\left[x\right]$ при реализации любых значений неопределенных факторов $y \in \mathrm{Y}$, то есть $f_i\left[x\right]$ есть гарантия для игрока *i* при использовании всеми игроками своих стратегий из ситуации $x \in \mathrm{X}$ и появлении (независимо от их выбора) любой неопределенности $y \in \mathrm{Y}$.

Предположим, что в игре (1) $\mathrm{X}_i = \mathrm{R}^n$, $\mathrm{Y} = \mathrm{R}^m$ (задача без ограничений), а функции выигрыша линейно-квадратичны по x_i, y и имеют вид:

$$\begin{aligned} f_1\left(x, y\right) &= x_1' A_{11} x_1 + 2x_1' x_2 + x_2' A_{12} x_2 + \\ &\quad + 2x_1' C_1 y + y' D_1 y + 2a_1' x_1 + 2b_1' x_2, \\ f_2\left(x, y\right) &= x_1' A_{21} x_1 - 2x_2' x_1 + x_2' A_{22} x_2 + \\ &\quad + 2x_2' C_2 y + y' D_2 y + 2a_2' x_1 + 2b_2' x_2, \end{aligned} \tag{3}$$

где x_1, x_2 – *n*-вектора (столбцы), y – *m*-вектора-столбец, штрих сверху означает операцию транспонирования, постоянные векторы a_i, b_i и матрицы A_{ij}, C_i, D_i соответствующих размерностей, причем A_{ij} и D_i – симметричны $\left(i, j = 1,2\right)$; далее $A_{ij} < 0$ $\left(D_i > 0\right)$ означает, что квадратичная форма $x_j' A_{ij} x_j$ $\left(y' D_i y\right)$ определенно отрицательна (соответственно, положительна).

Итак, далее рассматриваем кооперативную игру двух лиц с побочными платежами и при неопределенности:

$$\left\langle \left\{1,2\right\}, \left\{\mathrm{X}_i = \mathrm{R}^n\right\}_{i=1,2}, \mathrm{Y}=\mathrm{R}^m, \left\{ f_i\left(x_1, x_2, y\right) \div \left(3\right)\right\}_{i=1,2} \right\rangle, \tag{4}$$

здесь функции выигрыша $f_i\left(x_1, x_2, y\right)$ определены в (3), стратегиями *i*-го игрока являются *n*-вектора-столбцы $x_i \in \mathrm{R}^n$, неопределенные факторы принимают значения $y \in \mathrm{R}^m$.

Утверждение 1. Если в (3) матрицы:

$$A_{ij} < 0, \quad D_i > 0 \quad \left(i, j = 1,2\right),$$

то у игроков в игре (4) не существует максиминных стратегий.

Утверждение 2. Если в (3) матрицы:

$$A_{ij} < 0, \quad D_i > 0 \quad \left(i, j = 1,2\right),$$

то сильно гарантированное решение игры (4) существует и имеет вид $\left(x^e, f^e\right)$, где сильно гарантирующая ситуация $x^e = \left(x_1^e, x_2^e\right)$ определяется формулами:

$$x_1^e = -\left[A_{11} + A_{21} - C_1 D_1^{-1} C_1'\right]^{-1} \left(a_1 + a_2\right),$$

$$x_2^e = -\left[A_{12} + A_{22} - C_2 D_2^{-1} C_2'\right]^{-1} \left(b_1 + b_2\right),$$

а сильно гарантированный дележ – любой вектор $\left(f_1^e, f_2^e\right) \in \mathrm{R}^2$, для которого:

$$f_1^e + f_2^e = -\left(a_1' + a_2'\right)\left[A_{11} + A_{21} - C_1 D_1^{-1} C_1'\right]^{-1} \left(a_1 + a_2\right) -$$

$$-\left(b_1' + b_2'\right)\left[A_{12} + A_{22} - C_2 D_2^{-1} C_2'\right]^{-1} \left(b_1 + b_2\right).$$

Библиографический список

1. Жуковский, В.И. Кооперативные игры при неопределенности и их приложения / В.И. Жуковский. – М.: Едиториал УРСС, 2009. – С. 336.

2. Zhukovskiy, V.I. The Vektor-Valued Maximin / V.I. Zhukovskiy, M.E. Salukvadze. – N.Y.: ACADEMIC PRESS. – 404 p.

3. Жуковский, В.И. Уравновешивание конфликтов при неопределенности. II. Аналог максимина / В.И. Жуковский, К.Н. Кудрявцев // Математическая теория игр и ее приложения. – 2013. – Т. 5, № 2. – С. 3–45.

4. Кудрявцев, К.Н. О существовании гарантированных по выигрышам и рискам решений в кооперативных играх при неопределенности / К.Н. Кудрявцев // Системы управления и информационные технологии, 1.1(39). – 2010. – С. 148–152.

5. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М: Наука, 1974. – 456 с.

К содержанию

УДК 517.521.8

ОЦЕНКА СКОРОСТИ СХОДИМОСТИ ПОЛИНОМОВ ГРОНУОЛЛА В ОБЛАСТИ СХОДИМОСТИ И ВНЕ ЭТОЙ ОБЛАСТИ

Л.В. Матвеева

В настоящей работе подытоживаются результаты исследования полиномов Гронуолла, начатые в работе автора «Оценка скорости сходимости последовательности полиномов Гронуолла» и продолженные в других работах автора.

Ключевые слова: методы суммирования, полиномы Гронуолла, скорость сходимости.

Пусть однозначная функция $f(z)$ аналитична в некоторой окрестности начала координат. Тогда функция $f(z)$ раскладывается в степенной ряд $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$. Обозначим m-ю частичную сумму этого ряда через $s_m^f = \sum_{k=0}^{m} a_k\, z^k$, через S_f множество особых точек функции $f(z)$ и через A_f – максимальную область, в которую продолжается $f(z)$. Частичную сумму ряда функции $\frac{1}{1-z}$ обозначим через $\sigma_n(z)$.

Определение. Линейный метод B, определяемый бесконечной матрицей $(b_{m,n})$, суммирует ряд $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ к $f(z)$ равномерно внутри области $D \subset \mathbb{C}$, если существует такой номер m_0, что для любого компакта $Q \subset D$ и для всех $m \geq m_0$ ряды $\sum_{k=0}^{\infty} b_{m,k} s_k^f(z)$ равномерно сходятся к функции $f(z)$ на компакте Q.

Определение. Область $U \subset A_f$ назовем C-областью функции $f(z)$, аналитичной в некоторой окрестности начала координат, если существует линейный метод, суммирующий последовательность $\{s_m^f(z)\}$ к $f(z)$ равномерно внутри U.

Естественно рассматривать такие линейные методы, максимальные C-области которых включают в себя круг сходимости степенного ряда $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$. Тогда метод суммирования позволяет вычислить как значения функции в круге сходимости степенного ряда, так и значения ее аналитического продолжения в C-области. Большинство предлагаемых методов суммирования суммируют ряд $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ в звездных областях, т.е. в областях, содержащих с каждой точкой отрезок, соединяющий эту точку и начало координат. [1]

В работе [2] показано, что если метод $(b_{m,n})$ суммирует $\sum_{k=0}^{\infty} z^k$ к $1/(1-z)$ в некоторой области D, то можно описать область D_f, в которой этот метод, будет суммировать $\sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$ к $f(z)$. Поэтому изучение C-областей метода суммирования достаточно провести для геометрического ряда $\sum_{k=0}^{\infty} z^k$.

Односвязная область D называется производящей, если выполнены условия: (1) D содержит начало координат; (2) D не содержит множества $\{1\} \cup \{\infty\}$.

Частной производящей областью функции $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k z^k$, соответствующей производящей области D, назовем множество $D_f = \left\{z: \frac{z}{\xi} \in D \text{ для всех } \xi \in S_f\right\}$.

Теорема. (Обобщение теоремы Окада [3]) *Пусть при $m \geq m_0$ все степенные ряды $\varphi(z,m) = \sum_{k=0}^{\infty} b_{m,k} z^{k+1}$ являются целыми функциями, и пусть $\{q_m\}$ – некоторая последовательность. Пусть для любого замкнутого подмножества $Q \subset D$ производящей области D существует такая постоянная C_Q, что выполнены условия:*

(1) $\varphi(1,m) \to 1$ при $m \to \infty$;

(2) для всех $z \in Q$ и для всех $m \geq m_0$ справедливо неравенство $|\varphi(z,m)| < C_Q q(m)$.

Тогда для любой функции $f(z)$, аналитической в некоторой окрестности начала координат, и для любого замкнутого множества $G \subset D_f$ найдутся такие постоянные $M_G > 0, N_G > 0$, что для всех $m \geq m_0$ справедливо неравенство $\left|\sum_{k=0}^{\infty} b_{m,k} s_k^f - f(z)\right| < M_G q(m) + N_G |1 - \varphi(1,m)|$.

Если, кроме того, для некоторой последовательности $\{q_1(m)\}$ и для любого замкнутого множества $Q \subset D$ существует такая постоянная $C_{Q'} > 0$, что для всех $z \in Q$ и всех $m > m_0$ справедливо неравенство

(3) $|\varphi(z,m-1) - \varphi(z,m)| < C_{Q'} q_1(m)$,

то существует такая постоянная $R_G > 0$, что для всех $z \in G$ и всех $m > m_0$ справедливо неравенство $\left|\sum_{k=0}^{\infty} b_{m-1,k} s_k^f(z) - \sum_{k=0}^{\infty} b_{m,k} s_k^f(z)\right| < R_G q(m) + N_G q_1(m)$.

Гронуолл в работе [4] ввел широкий класс методов суммирования расходящихся рядов, который содержит многие известные методы суммирования. А.А. Меленцов, используя методы суммирования Гронуолла, нашел метод, суммирующий ряд и на отрезке луча, лежащим за особой точкой функции, т.е. в незвездной области.

Метод Гронуолла $\left[F(w); \frac{1}{1-w}\right]$ задается отображающей функцией $F(w) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k w^k \, (c_1 \neq 0)$ и конкретной весовой функцией $g(w) = 1/(1-w)$, и элементы его матрицы определяются по формулам:

$$c_{m,n}^F = \frac{1}{2\pi} \oint \frac{\left(1 - F(w)\right) F^n(w)}{(1-w) w^{m+1}} dw (m, n \geq 0),$$

где интегрирование ведется по γ – простому, достаточно малому контуру вокруг начала координат. На отображающую функцию $F(w)$ в работе [1] накладываются три условия: 1) $F(w)$ аналитична в замкнутом единичном круге $\overline{K}$, исключая, может быть, точку $w = 1$, и однолистна в K; 2) $F(w)$ непрерывна в $\overline{K}$, $F(0) = 0$, $F(1) = 1$, $F(K) \subseteq K$; 3) ряд Тейлора $F(w)$ аб-

солютно сходится при $w=1$. Последнее условие отличается от первоначального условия Гронуолла и предложено А.А. Меленцовым, но оказалось удобнее для оценки скорости сходимости в случае весовой функции $g(w) = 1/(1-w)$.

Определение. Полином $P_m^F(z) = \sum_{n=0}^{m} c_{m,n}^F (\sum_{k=0}^{n} z^k)$ будем называть m-м полиномом Гронуолла метода $[F(w), {}^{1}/_{(1-w)}]$.

Из условия $F(0)=0$ следует, что $c_{m,n}^F = 0$ при $n>m$, поэтому степень m-го полинома Гронуолла не превосходит m. Область $T(F)$, ограниченную кусочно-гладкой кривой $\tau(F)=\{z : z=[F(e^{ix})]^{-1}, x\in[0;2\pi]\}$ назовем областью суммируемости метода $[F(w), \frac{1}{1-w}]$. Как доказано в работах [4] и [5] метод $[F(w); \frac{1}{1-w}]$ суммирует ряд $\sum_{k=0}^{\infty} z^k$ к $1/(1-z)$ в области $T(F)$.

Теорема Биринделли [5]. *Геометрический ряд* $1+z+z^2+\cdots+z^n+\cdots$ *суммируется методом* $[F(w), \frac{1}{1-w}]$ *к сумме* $1/(1-z)$ *внутри кривой* $\tau(F)=\{z : z=[F(e^{ix})]^{-1}, x\in[0;2\pi]\}$.

Вне этой области последовательность $P_m^F(z)$ расходится. Условие $F(K)\subseteq K$ означает, что область суммируемости метода $[F(w), \frac{1}{1-w}]$ включает область сходимости степенного ряда $\sum_{k=0}^{\infty} z^k$.

В работе [6] оценивалась скорость сходимости полиномов Гронуолла в случае аналитической отображающей функции внутри области $T(F)$.

Теорема [6]. *Пусть отображающая функция* $F(w)$ *аналитична в* $\overline{K}$ *и* $g(w)=\dfrac{1}{1-w}$. *Тогда для любого замкнутого множества* $Q\subset T(F)$ *найдутся такие постоянные* $C_Q>0$ *и* $R_Q>1$, *что для всех* $z\in Q$ *и всех* $m\geq 0$:

$$|P_m^{[F;g]}(z)-\frac{1}{1-z}|\leq \frac{C_Q}{R_Q^m}.$$

В работе [7] оценивалась скорость сходимости полиномов Гронуолла внутри области $T(F)$ в случае отображающей функции, с заданным модулем непрерывности на единичной окружности. Обозначим через $W^rH^\omega(L_{h,\varphi})$ класс таких аналитических в $L_{h,\varphi}$ функций $F(w)$, что $F^{(r)}(w)$ непрерывна до границы $L_{h,\varphi}$ и $\omega(\delta, F^{(r)})$ не превосходит фиксированного модуля непрерывности $\omega(\delta)\neq 0$.

Теорема [7]. *Пусть отображающая функция* $F(w)$ *принадлежит классу* $W^rH^\omega(L_{h,\varphi})$. *Тогда для любого замкнутого множества* $Q<T(F)$ *найдется такая постоянная* $C_Q>0$, *что для всех* $z\in Q$ *и для всех* $m>r+1$ *справедливо неравенство:*

$$\left|P_m^F(z)-\frac{1}{1-z}\right| < C_Q\int_0^{1/(m-r)} t^{r-1}\omega(t)dt.$$

В работе [8] показано, что последовательность $P_m^F(z)$ на границе области $T(F)$ ограничена для каждого $z \neq 1$.

Теорема [8]. *Если отображающая функция $F(w)$ имеет ограниченное изменение на единичной окружности и ее производная не равна 0 на единичной окружности, то для каждого $z \in \tau(F)\backslash\{1\}$ последовательность $\{P_m^F(z)\}$ ограничена.*

В работе [9] показано, что вне области суммируемости последовательность полиномов Гронуолла $P_m^F(z)$ расходится достаточно быстро со скоростью порядка $\frac{1}{\rho^{m+1}}$, где $0 < \rho < 1$.

Теорема [9]. *Для любой точки z, лежащей вне замыкания области суммируемости $\overline{T(F)}$, найдутся такие точка $w_0 \in K$ и постоянная $C \neq 0$, что:*

$$\lim_{m\to\infty} P_m^F(z) w_0^{m+1} = C.$$

Библиографический список

1. Кук, Р. Бесконечные матрицы и пространства последовательностей / Р. Кук. – М.: Физматгиз, 1980. – 472 с.

2. Матвеева, Л.В. Оценка скорости сходимости последовательности полиномов Гронуолла / Л.В. Матвеева // Исслед. по функцион. анализу. – Свердловск: Ур. гос. ун-т. – 1978. – С. 49–64.

3. Матвеева, Л. В. Области равномерной сходимости и теорема Окада / Л.В. Матвеева // Наука ЮУрГУ. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2011.– Т. 3. – С. 149–152.

4. Gronwall, T.H. Summation of series and conformal mapping / T.H. Gronwall // Ann. Math. – 1932. – V. 33, N 2. – Pp. 101–117.

5. Birindelli, C. Contributo all' analisi dei metodi di sommazione di Gronwall / C. Birindelli // Rendic. del Circolo Matemat. de Palermo. – 1937. – V. 61. – Pp. 157–176.

6. Матвеева, Л.В. Полиномы Гронуолла с аналитической отображающей функцией / Л.В. Матвеева // Наука ЮУрГУ. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2009. – Т. 2. – С. 153–156.

7. Матвеева, Л.В. Зависимость скорости сходимости полиномов Гронуолла от свойств отображающей функции / Л.В. Матвеева // Матем. заметки. – 1980. – Т. 28, № 4. – С. 513–524.

8. Матвеева, Л.В. Поведение полиномов Гронуолла на границе области суммируемости / Л.В. Матвеева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 7, № 34(293). – С. 165–167.

9. Матвеева, Л.В. Поведение полиномов Гронуолла вне области суммируемости / Л.В. Матвеева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013 – Т. 5, Вып. 2. – С. 156–159.

К содержанию

УДК 515.128

ОДНОРОДНЫЕ λ-МНОЖЕСТВА

С.В. Медведев

Изучаются некоторые свойства CDH-пространств. В частности, доказано, что любое h-однородное несчётное λ-пространство X гомеоморфно своему подпространству $X \setminus A$ для любого счётного множества $A \subset X$.

Ключевые слова: CDH-пространство; λ-пространство; пространство первой категории; h-однородное пространство.

Все пространства предполагаются сепарабельными метрическими.

Понятие CDH-пространства является классическим; оно встречалось ещё в работах Кантора, Брауэра, Фреше и многих других математиков прошлого века. Сепарабельное топологическое пространство X называется *счётно плотно однородным*, если для любых двух счётных всюду плотных множеств A и B из пространства X существует такой гомеоморфизм $f : X \to X$, что $f(A) = B$. Кратко такое пространство X называется *CDH-пространством.* Это понятие применяется только для сепарабельных пространств. Несложно проверить, что каждое счётное CDH-пространство всегда дискретно. Важными примерами CDH-пространств служат евклидово пространство $\mathbb{R}^n$, гильбертов куб $[0;1]^\omega$ и полное пространство Эрдоша, т.е. множество точек из гильбертова пространства ℓ_2, все координаты которых являются иррациональными числами.

Следующая теорема, доказанная М. Хрусаком и З. Авилесем [1], показывает, что сравнительно просто устроенные CDH-пространства всегда гомеоморфны полным метрическим пространствам.

Теорема 1. *Любое борелевское CDH-пространство метризуемо полной метрикой.*

Из теоремы 1 следует, что поиск других CDH-пространств нужно вести среди множеств, устроенных более сложно, чем борелевские множества в польских пространствах. Ниже в теореме 2 указан ещё один класс CDH-пространств.

В некоторых моделях теории множеств (например, MA + ¬CH или модель Коуэна) можно построить аналитическое CDH-пространство, которое не метризуемо полной метрикой (см. [1] или [5]).

Куратовский (см. [2]) ввел так называемые λ-пространства. Сепарабельное пространство X называется *λ-пространством*, если любое счётное подмножество из X является G_δ-множеством в X. Можно доказать [2], что любое несчётное польское пространство содержит несчётное

λ-пространство. Отметим следующие связи между λ-пространствами и пространствами первой категории. Напомним, что пространство X называется пространством *первой категории*, если его можно представить в виде счетного объединения нигде не плотных подмножеств.

Лемма 1 [2]. *Любое λ-пространство является пространством первой категории.*

Лемма 2 [3]. *Любое CDH-пространство первой категории является λ-пространством.*

Теорема 2 усиливает недавний результат Хернандез-Гутиерреза, Хрусака и ван Милла [4, теорема 4.9].

Нульмерное пространство называется *h-однородным*, если любое его непустое открыто-замкнутое подмножество гомеоморфно всему пространству.

Теорема 2. *Любое h-однородное несчётное λ-пространство является CDH-пространством.*

Отметим два любопытных свойства h-однородных λ-пространств.

Теорема 3. *Пусть дано h-однородное несчётное λ-пространство X. Тогда X гомеоморфно своему подпространству $X \setminus A$ для любого счётного множества $A \subset X$.*

Доказательство. Так как пространство X нигде не счётно, то дополнение $X \setminus A$ является всюду плотным подмножеством в X. Согласно лемме 1, X – пространство первой категории. Тогда [2] дополнение $X \setminus A$ также будет пространством первой категории относительно себя.

Так как пространство X нульмерно, то существует такая последовательность $\mathcal{U}_1, \mathcal{U}_2, \ldots$ дискретных открытых счётных покрытий пространства X, что семейство $\mathcal{U} = \{U \in \mathcal{U}_n : n \in \omega\}$ образует счётную базу пространства X, причём для любого n покрытие $\mathcal{U}_{n+1}$ вписано в покрытие $\mathcal{U}_n$. По определению h-однородного пространства, для каждого множества $U \in \mathcal{U}$ существует гомеоморфизм $\varphi_U : X \to U$.

Построим счётное множество $A^* = A \cup \bigcup\{\varphi_U(A) : U \in \mathcal{U}\}$. Из определения λ-пространства следует, что A^* – множество типа G_δ в пространстве X. Несложно проверить, что $X^* = X \setminus A^*$ – всюду плотное множество типа F_σ в пространстве первой категории X; следовательно, X^* также является множеством первой категории в X. Более того, X^* – множество типа F_σ в пространстве X. Поэтому множество X^* можно представить в виде счётного объединения $X^* = \bigcup\{X_n : n \in \omega\}$ замкнутых (в X) множеств X_n. Так как пространство X нульмерно, то без ограничения общности можно считать, что множества $\{X_n : n \in \omega\}$ попарно не пересекаются. Из построения вытекает, что множество $\varphi_U(X_n)$ замкнуто и нигде не плотно в X, причём $\varphi_U(X_n) \subset U \setminus A$ для любого $U \in \mathcal{U}$ и любого n.

Применяя лемму 4 из [8], делаем вывод, что любое открытое множество из пространства $X \setminus A$ содержит нигде не плотное замкнутое (относительно $X \setminus A$) подмножество, гомеоморфное пространству *X*. Тогда по теореме 3 из [8] пространство $X \setminus A$ гомеоморфно h-однородному расширению $h(X,\omega)$ пространства *X* относительно пространств первой категории. В [8] было показано, что для любого сепарабельного h-однородного пространства *X* первой категории расширение $h(X,\omega)$ гомеоморфно самому пространству *X*. Теорема доказана.

Теорема 4. *Пусть дано нульмерное несчётное λ-пространство X. Тогда X можно вложить в качестве замкнутого множества в некоторое h-однородное несчётное λ-пространство X*, причём мощность пространства X* равна мощности пространства X.*

Доказательство. В качестве пространства *X** возьмём h-однородное расширение $h(X,\omega)$ пространства *X* относительно пространств первой категории, см. [6]. По определению, пространство *X** содержит замкнутое подмножество, гомеоморфное пространству *X*. Поэтому мощность пространства *X** не меньше мощности пространства *X*. С другой стороны, пространство *X** можно представить в виде счетного объединения $X^* = \bigcup\{X_n : n \in \omega\}$ замкнутых множеств X_n. Следовательно, мощность пространства *X** не больше мощности пространства *X*. Итак, $|X^*| = |X|$.

Проверим, что *X** является λ-пространством.

Так как пространство *X* нульмерное, то и пространство *X** также нульмерное, см. [6]. Поэтому без ограничения общности можно считать, что множества $\{X_n : n \in \omega\}$ попарно не пересекаются. Несложно показать, что каждое множество X_n само является λ-пространством. Возьмём произвольное счётное множество $A \subset X^*$. Для любого *n* пересечение $X_n \cap A$ имеет тип G_δ относительно X_n. Значит, дополнение $X_n \setminus A$ имеет тип F_σ относительно X_n. Так как дополнение $X^* \setminus A = \bigcup\{X_n \setminus A : n \in \omega\}$ является множеством типа F_σ в *X*, то само множество *A* имеет тип G_δ в *X*. Теорема доказана.

Теперь опишем случаи, когда пространство не является CDH-пространством.

Теорема 5. *Если пространство X первой категории содержит замкнутое подмножество, гомеоморфное канторову совершенному множеству, то X не является CDH-пространством.*

Доказательство. В пространстве *X* возьмём замкнутое подмножество *F*, гомеоморфное канторову совершенному множеству. Так как пространство *X* первой категории, то множество *F* нигде не плотно в *X*. Зафиксируем счётное всюду плотное в *F* подмножество *A*, гомеоморфное пространству рациональных чисел. Согласно теореме 2 из статьи [7] в пространстве *X* существует всюду плотное σ-дискретное множество *B* типа G_δ. Неслож-

но проверить, что множество $F \setminus (A \cup B)$ гомеоморфно пространству иррациональных чисел. Следовательно, множество $F \setminus (A \cup B)$ не является множеством типа F_σ относительно F. Учитывая, что множество F замкнуто в X, делаем вывод о том, что $X \setminus (A \cup B)$ не является множеством типа F_σ относительно пространства X. Значит, объединение $A \cup B$ не является множеством типа G_δ в X. Поэтому не существует гомеоморфизма $f : X \to X$, переводящего множество B в $A \cup B$. Итак, X не является CDH-пространством. Теорема доказана.

Последнее утверждение можно усилить, если ввести следующее понятие. *Типом* счётного всюду плотного множества D из пространства X называется семейство множеств $\{f(D)$: f – гомеоморфизм пространства X на себя$\}$. Несложно убедиться, что X является CDH-пространством тогда и только тогда, когда в нем существует ровно один тип счётных всюду плотных подмножеств. В совместной работе Кунена, Медини и Здомского [5] доказано, что если пространство X удовлетворяет свойству совершенного ядра для открытых подмножеств и не обладает свойством Бэра, то в пространстве X существует континуум счётных всюду плотных множеств различных типов. Следующая теорема 6 обобщает последний результат.

Теорема 6. *Пусть в пространстве X существуют открытое подмножество U первой категории и замкнутое множество F, такие, что F гомеоморфно канторову совершенному множеству и* $F \subset U$. *Тогда в пространстве X существует континуум счётных всюду плотных множеств различных типов.*

Кратко рассмотрим также один из вариантов обобщения понятия CDH-пространства. С этой целью вместо счётного всюду плотного множества из пространства X возьмём произвольное всюду плотное множество.

Пространство X называется *плотно однородным относительно пространства A*, если для любых двух всюду плотных подмножеств A_1 и A_2 пространства X, каждое из которых гомеоморфно пространству A, существует такой гомеоморфизм $f : X \to X$, что $f(A_1) = A_2$. В общем случае возникающая ситуация получается очень сложной. Однако ван Энгелен [9] доказал следующую теорему 7, если в качестве пространства X выбрать канторово совершенное множество.

Теорема 7. *Пусть дано нульмерное однородное абсолютное борелевское множество A, причём* $A \notin \Delta^0_3$. *Тогда канторово совершенное множество плотно однородно относительно A.*

Следующая теорема показывает, что выбор канторового совершенного множества в качестве объемлющего пространства является существенным. Напомним, что бэровское пространство $B(\omega)$ – это счётная степень счётного дискретного пространства в тихоновской топологии.

Теорема 8. *Пусть дано нульмерное пространство X первой категории, счётная степень которого гомеоморфна самому пространству X. Тогда бэровское пространство* $B(\omega)$ *не плотно однородно относительно пространства X.*

Доказательство. Построим два всюду плотных вложения пространства X в бэровское пространство $B(\omega)$.

По условию теоремы счётная степень X^{ω} гомеоморфна пространству X. Следовательно, в пространстве X нет изолированных точек. Как известно [3], канторово множество C является универсальным для нульмерных сепарабельных метрических пространств. Поэтому оно содержит всюду плотное подмножество Y, гомеоморфное X. В пространстве $B(\omega)$ возьмём всюду плотное счётное множество Q_1. Тогда [3] произведение $X_1 = Y \times Q_1$ гомеоморфно X. Несложно проверить, что X_1 всюду плотно в произведении $B_1 = C \times B(\omega)$, причём $B_1 \approx B(\omega)$. По построению X_1 лежит внутри σ-компактного множества $E = C \times Q_1$.

С другой стороны, пространство X нигде не локально компактно, так как оно является пространством первой категории. Поэтому в бэровском пространстве $B(\omega)$ найдётся всюду плотное множество Z, гомеоморфное X. Более того, существует такое замкнутое в пространстве $B(\omega)$ дискретное бесконечное счётное множество D, что $D \subset Z$. Очевидно, что множество D замкнуто также относительно Z. Тогда множество $X_2 = Z^{\omega}$ всюду плотно в пространстве $B_2 = B(\omega)^{\omega} \approx B(\omega)$. По построению, множество D^{ω} замкнуто в B_2 и содержится в X_2.

Допустим, что существует гомеоморфизм $f : B_1 \to B_2$, для которого $f(X_1) = X_2$. Так как непрерывный образ компактного пространства является компактным пространством, то множество $f(E)$ будет σ-компактным в силу непрерывности отображения f. При этом образ $f(E)$ содержит замкнутое подмножество D^{ω}. Следовательно, множество D^{ω} окажется σ-компактным пространством. По построению множество D^{ω} гомеоморфно бэровскому пространству $B(\omega)$. Отсюда следовало бы, что бэровское пространство $B(\omega)$ является σ-компактным пространством. Однако известно [2], что пространство $B(\omega)$ не σ-компактно. Получили противоречие.

Итак, гомеоморфизма $f : B_1 \to B_2$, переводящего множество X_1 в множество X_2, не существует. Значит, бэровское пространство $B(\omega)$ не плотно однородно относительно пространства X.

Теорема доказана.

Замечание. Теоремы 2–6 и 8 получены автором статьи.

Библиографический список

1. Hrusak, M. Countable dense homogeneity of definable spaces / M. Hrusak, B. Zamora-Aviles // Proc. Amer. Math. Soc.. – 2005. – Vol. 133. – Iss. 11. – Pp. 3429–3435.
2. Куратовский, К. Топология. Т.1.: моногр. / К. Куратовский; пер. с англ. М.Я. Антоновского. – М.: Мир, 1966. – 595 с.
3. Fitzpatric, Jr.B. Countable dense homogeneity and the Baire property / Jr.B. Fitzpatric, H-X. Zhou // Topology Applic. – 1992. – Vol. 43. – Pp. 1–14.
4. Hernandez-Gutierrez, R. Countable dense homogeneity and λ-sets / R. Hernandez-Gutierrez, M. Hrusak, J. van Mill // Preprint. – 2013. – 14 p.
5. Kunen, K. Seven characterizations of non-meager P-filters / K. Kunen, A. Medini, L. Zdomskyy // Preprint available at http://arXiv 1311.1677. – 2013.
6. Medvedev, S.V. On properties of h-homogeneous spaces of first category / S.V. Medvedev // Topology Applic. – 2010. – Vol. 157. – Pp. 2819–2828.
7. Медведев, С.В. К вопросу о пространствах первой категории / С.В. Медведев // Вестн. Моск. Ун-та. Сер. 1. Математика. Механика. – 1986. – № 2. – С. 84–86.
8. Medvedev, S.V. About closed subsets of spaces of first category / S.V. Medvedev // Topology Applic. – 2012. – Vol. 159. – Pp. 2187–2192.
9. van Engelen, F. Homogeneous Borel sets / F. van Engelen // Proc. of Amer. Math. Soc. – 1986. – Vol. 96. – Iss. 4. – Pp. 673–682.

К содержанию

УДК 651.01 + 378.016

ОБ УСЛОВИЯХ ФОРМИРОВАНИЯ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ КОМПЕТЕНТНОСТИ БУДУЩИХ МЕНЕДЖЕРОВ

Г.С. Кочеткова, Н.Н. Овчинникова

Дан понятийный аппарат проблемы формирования исследовательской компетентности у будущих менеджеров.

Ключевые слова: компетентность, профессиональная компетентность, исследовательская компетентность.

Ориентация на повышение качества высшего образования в России вызвана, прежде всего, необходимостью подготовки кадров, способных эффективно выполнять свои профессиональные обязанности. Современное общество требует не только применения сформированных в процессе обучения в вузе знаний и умений, но и их творческого развития, пополнения, качественного преобразования. В этой связи особое место занимает подготовка будущих специалистов к получению новой, необходимой для вы-

полнения профессиональных задач информации, которая зачастую формируется в ходе собственных умозаключений, выводов, творческого поиска. Способность осуществлять исследование проблемной ситуации и находить грамотное решение для современного специалиста является залогом его профессиональной успешности и карьерного роста. Для будущих менеджеров особенно актуальна исследовательская подготовка. Формирование у будущих специалистов исследовательских умений и навыков способно обеспечить им в условиях структурного и качественного усложнения профессиональной деятельности квалификационный рост и профессиональную мобильность.

Рассматривая основополагающее для нашего исследования понятие «подготовка», мы в ходе анализа пришли к заключению, что в отличие от большинства педагогических понятий существенного расхождения в его трактовках среди исследователей нет. Чаще всего «подготовка» понимается как процесс, в ходе которого формируются необходимые для выполнения профессиональной деятельности знания, умения, качества личности, установки. Единодушие просматривается и в понимании результата подготовки. Большинство исследователей результатом подготовки называют «готовность». При этом трактуется профессиональная готовность поразному, например, как уровень освоения содержания профессиональной деятельности; система качеств личности, характеризующих ее всестороннее гармоническое развитие, подготовленность к выполнению и выполнение важнейших социальных функций, проявляющихся в активно-положительном отношении к профессиональной деятельности; субъективное состояние личности, считающей себя способной и подготовленной к выполнению определенной профессиональной деятельности и стремящейся ее выполнить; целостность, включающая мотивационный, ориентационный, волевой и оценочный компоненты, и др.

Мы будем придерживаться традиционной точки зрения на «подготовку» и «готовность», согласно которой первое понятие представляет собой процесс формирования необходимых для профессиональной деятельности свойств специалиста, а второе – результат этого процесса. Данная позиция представляется нам привлекательной, поскольку, обладая универсальностью и методологической полнотой, имеет возможности для реализации и в условиях гуманитарного, и в условиях современного профессионально-технического образования, и, кроме того, в теоретическом плане согласуется с получившим широкое распространение компетентностным подходом, согласно которому показателем готовности является компетентность специалиста.

В словаре «Профессиональное образование» **компетентность** трактуется как мера соответствия знаний, умений и опыта лиц определенного социально-профессионального статуса реальному уровню сложности выпол-

няемых ими задач и решаемых проблем; область полномочий управляющего органа, должностного лица; круг вопросов, по которым они обладают правом принятия решения [1, с. 130–131].

Отметим, что в понимании профессиональной компетентности мы не разделяем достаточно распространенную в научной литературе точку зрения о том, что она представляет собой высшее проявление подготовленности специалиста к осуществлению профессиональной деятельности, которому предшествуют уровни элементарной готовности, функциональной грамотности и профессиональной квалификации. Во-первых, при таком подходе отсутствует содержательная однородность уровневых компонентов, которая должна проявляться при построении иерархических конструкций. Как следствие, при ориентации на данную точку зрения существенным образом затрудняется установление связи между указанными уровнями, определение показателя, изменение которого характеризует продвижение специалиста на более высокую ступень подготовки. Во-вторых, поскольку компетентность представляет собой самостоятельную академическую цель, то ее обеспечение должно осуществляться на каждом этапе непрерывного образования: как в системе общеобразовательной подготовки, так и при формировании специалиста. Таким образом, свойство универсальности позволяет описать результаты образовательного процесса любой ступени через соответствующий уровень и содержание компетентности без выделения более низких стадий – элементарной готовности, функциональной грамотности или профессиональной квалификации. Подтверждение данной позиции встречается в научных работах: в этом плане показательна, в частности, точка зрения Г.К. Селевко [4, с. 143] о том, что компетентность может проявляться на разных уровнях – от «полной некомпетентности», т.е. неспособности справиться с появляющимися проблемами и требованиями, до «высокой компетентности», конкурентоспособности и талантливости.

Исходя из вышеизложенного, **профессиональная компетентность** трактуется нами, как гибкая, динамически развивающаяся совокупность необходимых для осуществления определенного вида деятельности знаний, умений и качеств личности специалиста.

Анализ исследований по проблеме профессиональной компетентности позволил нам выделить ряд обобщенных сущностных характеристик данного феномена, а именно, профессиональная компетентность: 1) по сути, 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 деятельностной и социально-коммуникативной природы; 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.

Отметим, что каждый вид профессиональной деятельности характеризуется определенной компетентностью. Более того, по нашему мнению, общая профессиональная компетентность предполагает формирование частных видов компетентности, соответствующих выполняемым квалификационным процедурам. Для предмета нашего исследования интерес представляет исследовательская компетентность как результат подготовки будущих менеджеров к соответствующему виду деятельности.

В понимании исследовательской компетентности среди ученых нет единодушия. Так, например, Н.Л. Солянкина ограничивает исследовательскую компетентность владением научными методами изучения явлений, фактов для выработки новых знаний о закономерностях, структуре и содержании, технологии деятельности [5, с. 68]. При этом характеристикой данного вида компетентности, по мнению автора, является умение, обеспечивающее выделение проблемы, постановку цели исследования, формулировку гипотезы, определение объекта и предмета исследования, подбор методов и т.д. Возможно, продуктивный для оценки исследовательской компетентности в условиях системы повышения квалификации данный подход оказывается весьма ограниченным при осуществлении подготовки к исследовательской деятельности студентов, поскольку ориентация только лишь на практическую сторону низводит процесс формирования специалиста высшей технической квалификации к тренировочному обучению отдельным операциям.

Е.С. Городцова, рассматривая процедуры подготовки студентов, в структуру исследовательской компетентности включает потребность к осуществлению учебной исследовательской деятельности, способность выполнить данную деятельность и решимость приступить к этой деятельности [2, с. 124]. Теоретически ориентированная на продуктивные преобразования в мотивационно-потребностной, исполнительской и волевой сферах личности будущего специалиста данная позиция, при внешней содержательной полноте, на наш взгляд, достаточно сложна для практической реализации, что делает процесс подготовки студентов слабоуправляемым, а данный подход недостаточно эффективным.

Более приближенной к практике и согласованной с возможностями современного образования нам представляется точка зрения Е.В. Набиевой, которая отводит научно-исследовательской компетентности роль ведущего качества личности современного учителя и определяет ее как совокупность конкретных знаний и умений, основанных на положительной мотивации к научно-исследовательской деятельности, позволяющую ему заниматься научно-исследовательской деятельностью и организовывать педагогический процесс с учетом результатов своих исследований [3, с. 19]. На наш

взгляд, универсализация данной позиции, необходимость которой продиктована различием предметов исследований, т.е. спецификой исследовательской деятельности учителя, в работе Е.В. Набиевой и менеджера – в рамках нашей проблемы, возможна при определении родового понятия, уточненного в предметном ракурсе. При этом, с одной стороны, сохраняется методологическая связь терминологии, а с другой, раскрывается глубина содержания понятия и нивелируется теоретико-множественный характер его наполнения.

Выбрав в качестве основного понятие профессиональной компетентности, под **исследовательской компетентностью** мы будем понимать вид профессиональной компетентности, обеспечивающей эффективное осуществление профессионально-исследовательской деятельности.

Как показало наше исследование, содержательное наполнение исследовательской деятельности специалиста определяется различными факторами (его профилем, сферой деятельности; опытом осуществления исследований, арсеналом средств и методов; условиями исследовательского задания и др.). Поэтому процесс подготовки к исследовательской деятельности будущих менеджеров должен быть направлен на формирование исследовательской компетентности. При этом под формированием исследовательской компетентности будущих специалистов будем понимать процесс систематизированного накопления в ее содержании позитивных количественных и качественных изменений.

Реализация данного процесса, по мнению современных исследователей, должна осуществляться с учетом следующих принципов подготовки: научности, системности, связи теории с практикой, непрерывности образовательного процесса, гуманизма, модульности и др. Не отрицая значимости указанных принципов, тем не менее, считаем необходимым их дополнить специфическими принципами, отражающими, во-первых, исследовательскую направленность формируемой компетентности, а во-вторых, характерные особенности деятельности будущих специалистов. К ним, в частности, мы относим принципы профессиональной направленности содержания исследовательской подготовки, непрерывности и преемственности исследовательской деятельности, ориентации на профессионально-личностные ценности, активности и самостоятельности субъектов исследовательской деятельности, обратной связи.

Таким образом, понятийный аппарат проблемы формирования исследовательской компетентности у будущих менеджеров, разрабатываемый в русле идей компетентностного подхода, определяет связи между самостоятельными понятиями «компетентность», «профессиональная компетентность», «исследовательская компетентность» и «формирование исследовательской компетентности будущих специалистов», характеризует степень проработанности проблемы в теории педагогики и отражает возможности для ее решения.

Библиографический список

1. Вишнякова, С.М. Профессиональное образование. Словарь. Ключевые понятия, термины, актуальная лексика / С.М. Вишнякова. – М.: НМЦ СПО, 1999 – 538 с.

2. Городцова, Е.С. Организация исследовательской работы студентов и исследовательская компетентность / Е.С. Городцова // Вестник института психологии и педагогики. – 2003. – Вып. 1. – С. 121–128.

3. Набиева, Е.В. Научно-исследовательская компетентность учителя: методология, теория, практика формирования: автореф. дис. … д-ра пед. наук / Е.В. Набиева. – Челябинск, 2005. – 31 с.

4. Селевко, Г.К. Компетентности и их классификация / Г.К. Селевко // Народное образование. – 2004. – № 4. – С. 138–143.

5. Солянкина, Н.Л. Система повышения квалификации: один из подходов к оценке профессиональной компетентности педагога / Н.Л. Солянкина // Подготовка учителей к использованию современных средств оценивания результатов обучения учащихся: Материалы всероссийского Интернет семинара-совещания (10–13 октября 2004 г.). – Томск: Центр учебно-методической литературы ТГПУ, 2004. – С. 65–70.

К содержанию

УДК517.9

ОБ УПРАВЛЯЕМОСТИ ОДНОЙ МОДЕЛИ СОБОЛЕВСКОГО ТИПА

О.А. Рузакова, Е.А. Золотарёва

Получены необходимые и достаточные условия управляемости начально-конечной задачи для дифференциального уравнения первого порядка в банаховом пространстве с вырожденным оператором при производной, с относительно *p*-ограниченным оператором в правой части.

Ключевые слова: относительно *p*-ограниченные операторы, начально-конечная задача, управляемость.

Уравнение Баренблатта-Желтова-Кочиной:

$$(\lambda - \Delta)v_t = \alpha\Delta v + f, \qquad (1)$$

моделирует динамику давления жидкости, фильтрующейся в трещинновато-пористой среде [1]. Здесь α и λ – вещественные параметры, характеризующие среду; параметр $\alpha \in R_+$, а параметр λ может принимать и отрицательные значения, которые не противоречат физическому смыслу задачи [2], функция $f = f(x)$ играет роль внешней нагрузки. Кроме того, уравнение (1) описывает течение жидкостей второго порядка [3], процесс теплопроводности с «двумя температурами» [4], процесс влагопереноса в почве [5].

В подходящих функциональных пространствах уравнение (1) редуцируется к начально-конечной задаче:

$$P_{in}(x(0)-x_0)=0, \quad P_{fin}(x(\tau)-x_\tau)=0 \tag{2}$$

для линейного уравнения соболевского типа:

$$L\dot{x}(t)=Mx(t)+Bu(t), \tag{3}$$

где X, Y – банаховы пространства, оператор $L\in \boldsymbol{L}(X;Y)$ (т.е. линеен и непрерывен), оператор $M\in Cl(X;Y)$ (т.е. линеен, замкнут и плотно определен), оператор $B\in \boldsymbol{L}(U;Y)$, функция управления $u(\cdot):[0,\tau)\subset R_+\to U$, U – банахово пространство, $\tau\in \mathrm{R}_+$, $x_0, x_\tau\in X$.

Задача (2) для линейных уравнений соболевского типа впервые появилась в работах Г.А. Свиридюка и С.А. Загребиной [6], в дальнейшем данная задача была названа «начально-конечной» и в настоящее время активно развивается теория многоточечных начально-конечных задач для уравнений соболевского типа, см. например, [7]. Нас будет интересовать вопрос ε-управляемости начально-конечной задачи (2) для уравнения (3) (и как следствие, для уравнения (1)), т.е. возможность приведения траектории решения в наперед заданную точку [8].

Приведем необходимые вспомогательные результаты, взятые из [9]–[10]. Введем в рассмотрение L-резольвентное множество $\rho^L(M)=\{\mu\in\mathbf{C}:(\mu L-M)^{-1}\in\mathbf{L}(X;Y)\}$ и L-спектр $\sigma^L(M)=\mathbf{C}\setminus\rho^L(M)$ оператора M. Пусть оператор M (L,p)-ограничен (терминология и результаты см. [10]) и относительный спектр оператора M $\sigma^L(M)=\sigma^L_{in}(M)\cup\sigma^L_{fin}(M)$, причем $\sigma^L_{in}(M)\cap\sigma^L_{fin}(M)=\varnothing$.

Операторы:

$$P=\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma R^L_\mu(M)d\mu, \qquad Q=\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma L^L_\mu(M)d\mu \quad -$$

проекторы, $P\in\boldsymbol{L}(X)$, $Q\in\boldsymbol{L}(Y)$. Здесь $\Gamma\subset\mathbf{C}$ – замкнутый контур, ограничивающий область, содержащую $\sigma^L(M)$; $R^L_\mu(M)=(\mu L-M)^{-1}L$ – правая, а $L^L_\mu(M)=L(\mu L-M)^{-1}$ левая L-резольвенты оператора M.

Положим $X^0(Y^0)=\ker P(\ker Q)$, $X^1(Y^1)=\mathrm{im}P(\mathrm{im}Q)$ и через $L_k(M_k)$ обозначим сужение оператора $L(M)$ на $X^k(\mathrm{dom}M\cap X^k), k=0,1.$ Из существования проекторов следует, что $X=X^0\oplus X^1$, $Y=Y^0\oplus Y^1$.

Аналогично построим проекторы:

$$P_{in}=\frac{1}{2\pi i}\int_\gamma R^L_\mu(M)d\mu, \quad P_{fin}=P-P_{in},$$

где контур $\gamma\subset\mathbf{C}$ ограничивает область, содержащую $\sigma^L_{in}(M)$.

Теорема 1. *Пусть* $\sigma^L(M)=\sigma^L_{in}(M)\cup\sigma^L_{fin}(M)$, *причем* $\sigma^L_{in}(M)$ *содержится в ограниченной области* $\Omega\subset\mathbf{C}$ *с кусочно гладкой границей* $\partial\Omega$ *и* $\partial\Omega\cap\sigma^L(M)=\varnothing$, *оператор* M (L,p)*-ограничен. Тогда:*

(i) *существуют проекторы* $P_{in}\in\boldsymbol{L}(X)$ *и* $Q_{in}\in\boldsymbol{L}(Y)$ *такие, что операторы* $L\in\boldsymbol{L}(\ker P_{in};\ker Q_{in})\cap\boldsymbol{L}(\mathrm{im}P_{in};\mathrm{im}Q_{in})$, $M\in\boldsymbol{L}(\ker P_{in};\ker Q_{in})\cap\boldsymbol{L}(\mathrm{im}P_{in};\mathrm{im}Q_{in})$;

(ii) $L_0\in\boldsymbol{L}(X^0,Y^0)$, $\quad L_{in(fin)}\in\boldsymbol{L}(X^1_{in(fin)},Y^1_{in(fin)})$;

(iii) $M_0\in Cl(X^0,Y^0)$, $\quad M_{in(fin)}\in\boldsymbol{L}(X^1_{in(fin)},Y^1_{in(fin)})$;

(iv) *существуют операторы* $L^{-1}_{in(fin)}\in\boldsymbol{L}(Y^1_{in(fin)},X^1_{in(fin)})$ *и* $M_0^{-1}\in\boldsymbol{L}(Y^0,X^0)$.

Теорема 2. *Пусть* $\sigma^L(M)=\sigma^L_{in}(M)\cup\sigma^L_{fin}(M)$, *причем* $\sigma^L_{in}(M)$ *содержится в ограниченной области* $\Omega\subset\mathbf{C}$ *с кусочно гладкой границей* $\partial\Omega$ *и* $\partial\Omega\cap\sigma^L(M)=\varnothing$, *оператор* M (L,p)*-ограничен. Тогда для любых* $x_0,x_\tau\in X$ *и функции* $u\in C^{p+1}((0,\tau);U)$ *существует единственное решение задачи* (2),(3), *которое к тому же имеет вид:*

$$x(t)=-\sum_{q=0}^{p}H^qM_0^{-1}(I-Q)Bu^{(q)}(t)+X^t_{in}x_0+\int_0^t X^{t-s}_{in}L^{-1}_{in}Q_{in}Bu(s)ds-$$

$$-X^{t-\tau}_{fin}x_0+\int_\tau^t X^{t-s}_{fin}L^{-1}_{fin}Q_{fin}Bu(s)ds.$$

Перейдем к исследованию ε-управляемости начально-конечной задачи (2) для уравнения (3).

Определение 1. Система (2),(3) называется ε-управляемой из любой точки в любую за время T, если для любых точек $x_0,x_\tau,\tilde{x}\in X$ и для любого $\varepsilon>0$ существует управление $u\in C^{p+1}((0,\tau);U)$ такое, что решение задачи (2),(3) удовлетворяет условию $\|x(T,x_0,x_\tau,u(t))-\tilde{x}\|\le\varepsilon$.

Действуя на уравнение (3) последовательно проекторами $I-Q,Q_{in},Q_{fin}$ и применяя теорему 1, сведем его к эквивалентной системе из трех независимых уравнений:

$$H\dot{x}^0(t)=x^0(t)+M_0^{-1}(I-Q)Bu(t), \tag{4}$$

$$\dot{x}^1_{in}(t)=S_{in}x^1_{in}(t)+L^1_{in}Q_{in}Bu(t),\qquad P_{in}(x(0)-x_0)=0, \tag{5}$$

$$\dot{x}^1_{fin}(t)=S_{fin}x^1_{fin}(t)+L^1_{fin}Q_{fin}Bu(t),\qquad P_{fin}(x(\tau)-x_\tau)=0. \tag{6}$$

Используя результаты и методы, изложенные в [11]-[13], получим, что имеет место теорема:

Теорема 3. *Пусть* $\sigma^L(M)=\sigma^L_{in}(M)\cup\sigma^L_{fin}(M)$, *причем* $\sigma^L_{in}(M)$ *содержится в ограниченной области* $\Omega\subset\mathbf{C}$ *с кусочно гладкой границей* $\partial\Omega$ *и* $\partial\Omega\cap\sigma^L(M)=\varnothing$, *оператор* M (L,p)*-ограничен. Тогда*

(i) *система* (4) ε*-управляема тогда и только тогда:*

$$\mathrm{span}\{\mathrm{im}H^q M_0^{-1}(I-Q)B, \quad 0 \le q \le p\} = \mathrm{dom}M_0;$$

(ii) *система* (5) ε*-управляема тогда и только тогда:*

$$\overline{\mathrm{span}}\{\mathrm{im}\mathrm{S}_{in}^k \mathrm{L}_{in}^{-1} Q_{in} B, \quad k \in N_0\} = X_{in};$$

(iii) *система* (6) ε*-управляема тогда и только тогда*:

$$\overline{\mathrm{span}}\{\mathrm{im}\mathrm{S}_{fin}^k \mathrm{L}_{fin}^{-1} Q_{fin} B, \quad k \in N_0\} = X_{fin}.$$

Пусть $\Omega \subset R^n$ – ограниченная область с границей $\partial\Omega$ класса C^∞. Рассмотрим уравнение Баренблатта-Желтова-Кочиной:

$$(\lambda - \Delta)v_t(x,t) = \alpha\Delta v(x,t) + u(x,t). \tag{7}$$

Для того, чтобы редуцировать уравнение (7) к уравнению (3) возьмем пространства $X = \{v \in W_2^2(\Omega) : v(x) = 0, x \in \partial\Omega\}$, $Y = U = L_2(\Omega)$, операторы $L = \lambda - \Delta$, $M = \alpha\Delta$, $domM = \{v \in L_2(\Omega\} : v(x) = 0, x \in \partial\Omega\}$, $B = I$. В случае $\lambda \notin \sigma(\Delta)$ оператор L непрерывно обратим и рассматриваемый случай тривиален, поэтому считаем, что $\lambda \in \sigma(\Delta)$. Пусть $\{\varphi_k : k \in N\}$ – множество собственных значений задачи Дирихле для уравнения Лапласа, занумерованных по невозрастанию собственных значений $\{\lambda_k : k \in N\}$ с учетом их кратности, а $\langle \cdot, \cdot \rangle$ – скалярное произведение в $L_2(\Omega)$. В работе [14] показано, что если $\alpha, \lambda \in R \setminus \{0\}$, то оператор M $(L,0)$-ограничен. L-спектр оператора M имеет вид:

$$\sigma^L(M) = \left\{ \mu_k = \frac{\alpha\lambda_k}{\lambda - \lambda_k}, \quad \mathrm{k} \in \mathrm{N} \setminus \{\mathrm{l} : \lambda_l = \lambda\} \right\}.$$

Понятно, что для такого множества можно подобрать контур $\gamma \in \mathrm{C}$, который бы удовлетворял условиям теоремы 1. Построим проекторы:

$$P_{in} = \sum_{\mu_k \in \sigma_{in}^L} \langle \cdot, \varphi_k \rangle \varphi_k, \qquad P_{fin} = \sum_{\mu_k \in \sigma_{fin}^L} \langle \cdot, \varphi_k \rangle \varphi_k,$$

Фиксируем $\tau \in R_+$ и в цилиндре $\Omega \times (0,\tau)$ рассмотрим уравнение (7), удовлетворяющее краевому условию:

$$v(x,t) = 0, \qquad (x,t) \in \Omega \times (0,\tau), \tag{8}$$

и условиям начально-конечной задачи:

$$P_{in}(x(0) - x_0) = 0, \quad P_{fin}(x(\tau) - x_\tau) = 0. \tag{9}$$

Для рассматриваемой системы имеют место равенства:

$$X^0 = span\{\varphi_k : \lambda_k = \lambda\},\ X^{in} = \overline{span}\{\varphi_k : \mu_k \in \sigma_{in}^L\},\ X^{fin} = \overline{span}\{\varphi_k : \mu_k \in \sigma_{fin}^L\},$$

$$M_0^{-1} = \frac{1}{\alpha\lambda} \sum_{\lambda_k = \lambda} \langle \cdot, \varphi_k \rangle \varphi_k,$$

$$S_{in}^l L_{in}^{-1} = \alpha^l \sum_{\mu_k \in \sigma_{in}^L} \frac{\lambda_k^l \langle \cdot, \varphi_k \rangle \varphi_k}{(\lambda - \lambda_k)^{l+1}}, \qquad S_{fin}^l L_{fin}^{-1} = \alpha^l \sum_{\mu_k \in \sigma_{fin}^L} \frac{\lambda_k^l \langle \cdot, \varphi_k \rangle \varphi_k}{(\lambda - \lambda_k)^{l+1}}, \quad l \in N_0.$$

Поэтому справедлива

Теорема 4. С*истема* (7)–(9) ε*-управляема.*

Библиографический список

1. Баренблатт, Г.И. Об основных представлениях теории фильтрации в трещиноватых средах / Г.И. Баренблатт, Ю.П. Желтов, И.Н. Кочина // Прикл. математика и механика. 1960. – Т. 24, № 5. – С. 58–73.

2. Руткас, А.Г. Задача Коши для уравнения Коши для уравнения $Ax'(t)+Bx(t)=f(t)$ / А.Г. Руткас // Дифференц. уравнения. – 1975. – Т. 11, № 11. – С. 1996–2010.

3. Ting, T.W. Certain Non-Steady Flows of Second-Order Fluids / T.W. Ting // Arch. Rat. Mech. Anal. – 1963. – V. 14, no. 1. – Pp. 28–57.

4. Chen, P.J. On a Theory of Heat Conduction Involving Two Temperatures / P.J. Chen, M.E. Gurtin // Z. Angew. Math. Phys. – 1968. – V. 19. – Pp. 614–627.

5. Hallaire, M. On a Theory of Moisture-Transfer / M. Hallaire // Inst. Rech. Agronom. – 1964. – No. 3. – Pp. 60–72.

6. Свиридюк, Г.А. Задача Шоуолтера-Сидорова как феномен уравнений соболевского типа / Г.А. Свиридюк, С.А. Загребина // Известия Иркутского государственного университета. Серия: Математика. – 2010. – Т. 3, № 1. – С. 51–72.

7. Загребина, С.А. Многоточечная начально-конечная задача для линейной модели Хоффа / С.А. Загребина // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – Вып. 11. – № 5 (264). – С. 4–12.

8. Шолохович, Ф.А. Об управляемости линейных динамических систем / Ф.А. Шолохович // Известия УрГУ. – 1998. – № 10. Вып. 1. – С. 103–126.

9. Sviridyuk, G.A. Linear Sobolev Type Equations and Degenerate Semigroups of Operators / G.A. Sviridyuk, V.E. Fedorov. – Utrecht; Boston; Tokyo; Keln: VSP, – 2003. – 216 p.

10. Загребина, С.А. Начально-конечные задачи для неклассических моделей математической физики / С.А. Загребина // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6. № 2. – С. 5–24.

11. Федоров, В.Е. Одномерная управляемость в гильбертовых пространствах линейных уравнений соболевского типа / В.Е. Федоров, О.А. Рузакова // Дифференц. уравнения. – 2002. – Т. 38, № 8. – С. 1137–1139.

12. Федоров, В.Е. Управляемость линейных уравнений соболевского типа с относительно *p*-радиальными операторами / В.Е. Федоров, О.А. Рузакова // Изв. вузов. Математика. – 2002. – № 7. – С. 54–57.

13. Федоров, В.Е. Одномерная и двумерная управляемость уравнений соболевского типа в банаховых пространствах / В.Е. Федоров, О.А. Рузакова // Мат. заметки. – 2003. – Т. 74, № 4. – С. 618–628.

14. Загребина С.А. Линейные уравнения соболевского типа с относительно *p*-ограниченными операторами и аддитивным белым шумом / С.А. Загребина, Е.А. Солдатова // Известия Иркутского государственного университета. Серия: Математика. – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 20–34.

К содержанию

УДК 532.525

МОДИФИЦИРОВАННАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ «ЗАМОРОЖЕННОЙ» ГАЗОВЗВЕСИ

Н.Л. Клиначева

Проведен анализ инвариантности относительно преобразования Галилея широко применяемой математической модели «замороженной» газовзвеси. Показано, что уравнения этой модели не являются инвариантными относительно преобразования Галилея (G. Galilei), что приводит к появлению в уравнении энергии фиктивного источникового члена. Дополнительный рост энтропии ведет к нарушению второго закона термодинамики. В данной работе предложена модификация модели «замороженной» газовзвеси, приводящая к её инвариантности относительно преобразования Галилея. Проведены расчёты и сделаны сравнения с неинвариантной моделью.

Ключевые слова: математическая модель, инвариантность, многокомпонентная смесь

Перспективное использование взрывных процессов в ряде отраслей современной техники тесно связано с решением вопросов обеспечения мер безопасности, защиты инженерных сооружений и технологического оборудования от действия ударных волн (УВ). В связи с этим важное прикладное значение представляет изучение проблемы локализации механических эффектов взрыва и ослабления УВ с помощью математического моделирования данных физических процессов [1]. Поэтому с особой остротой встает проблема как разработки математических моделей многокомпонентных гетерогенных сред [2], основанных на гипотезе взаимопроникающих взаимодействующих континуумов [3], так и анализа уже сущест-

вующих математических моделей [4, 5]. Развитие современной вычислительной техники позволило значительно усложнить математические модели физических процессов, используемых в науке и технике. В связи с этим повысился статус математического моделирования как источника получения информации о процессах. Более того, для быстропротекающих процессов есть такие проблемы, когда математическое моделирование является единственным средством предварительного изучения явлений [6, 7].

Для верификации расчетов, с одной стороны, используют известные экспериментальные данные, а с другой стороны, при анализе проведенных измерений используют математические модели. Очень важно, чтобы условия проведения расчетов и экспериментов совпадали, а математическая модель была инвариантна относительно преобразования Галилея.

В работах [4, 5] проведен анализ математической модели «замороженной» газовзвеси [8], которая активно используется при анализе затухания УВ в гетерогенных средах. Оказалось, что неинвариантность относительно преобразования Галилея уравнений из [8] приводит к появлению дополнительного источника энергии, связанного с движением системы координат. Этот источник энергии не имеет физической природы и приводит к нарушению второго закона термодинамики.

В настоящей работе предложена модификация изложенной в [8] математической модели «замороженной» газовзвеси, проведены расчёты затухания УВ в системе защитных решёток и приведено сравнение с результатами из [8].

Постановка задачи. При решении задачи ослабления УВ с помощью аэровзвеси, как правило, предполагается, что частицы твёрдого компонента неподвижны и несжимаемы. Это означает, что вместо газовзвеси фактически рассматривается заполненная газом недеформируемая решётка. Твердые частицы имитируют ее узлы, а связи между узлами решетки не оказывают влияния на газодинамическое течение, т.е. используется модель «замороженной» газовзвеси, представленная в работах [5, 6] при изучении ослабления УВ. Поскольку частицы неподвижны и несжимаемы, то их объёмная концентрация α и, следовательно, объёмная концентрация газа $1-\alpha$ постоянны.

Для определения эффекта ослабления УВ с помощью решётки в [8] рассмотрена двухкомпонентная среда. Поведение газа (величины без индексов) в смеси описывается уравнениями:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \tag{1}$$

$$(1-\alpha)\rho\frac{du}{dt} + \frac{\partial P}{\partial x} = -F, \tag{2}$$

$$\rho\frac{dE}{dt} + \frac{\partial Pu}{\partial x} = -\frac{Q}{(1-\alpha)}, \tag{3}$$

где ρ – плотность, u– скорость, e и E– удельная внутренняя и удельная полная энергия, F – сила компонентного взаимодействия, Q – интенсивность теплообмена. Уравнения (1)-(3) дополняются выражением для полной энергии:

$$E = e + \frac{1}{2}u^2, \tag{4}$$

и уравнением состояния:

$$P = (\gamma - 1)\rho e. \tag{5}$$

с γ =1.4. Материалы решётки (индекс g) описывается уравнениями:

$$\rho_g = const, \qquad u_g = 0, \qquad P_g = P, \qquad \alpha\rho_g\frac{\partial e_g}{\partial t} = Q. \tag{6}$$

Субстанциональная производная определяется уравнением

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u\frac{\partial}{\partial x}.$$

Начальные данные задачи формулируются аналогично [8]. При t=0 смесь воздух-железо находится в области $x_1 \le x \le x_2$ в нормальных условиях P_0=0,1 Мпа, ρ_0=1,21 кг/м^3, ρ_g=7800 кг/м^3, u_g=0, T=300°К.

Граница x=x_1 является контактной границей между чистым газом и смесью с α>0. В момент t=0 на эту контактную границу вышла УВ, на фронте которой давление P_+=2 МПа. Все остальные величины на фронте находятся из условий Гюгонио ρ_+=5,631 кг/м^3, e_+=0,88794 МДж/кг, u_+=1,110333 км/с, E_+=0,70516 МДж/кг. Таким образом, на поверхности x=x_1 образовался произвольный разрыв (слева – газ, справа – смесь). При t>0 он распадается с образованием УВ, прошедшей в смесь. и отражённой ударной волны.

В области $0 \le x \le x_2$ в момент t=0 задана волна разрежения с линейным профилем скорости

$$u = u_+\left(\frac{x}{x_1}\right).$$

Остальные величины определяются уравнениями

$$C = C_+ - \frac{\gamma - 1}{2}u_+\left(1 - \frac{x}{x_1}\right),$$

$$\rho = \rho_+\left(\frac{C}{C_+}\right)^{\frac{2}{\gamma-1}}, \qquad e = e_+\left(\frac{C}{C_+}\right)^2, \qquad P = (\gamma - 1)\rho e.$$

При t≥0 на правой границе x=x_2 задано условие u=0, на левой границе при x=0 условие свободного протекания газа.

Анализ модели [8]. Следуя [2], выпишем уравнение производства энтропии в модели (1)-(3). Для этого из уравнения энергии (3) исключим с помощью уравнения движения (2) кинетическую энергию, а производную $\frac{\partial u}{\partial x}$ заменим производной $\frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dt}$ с помощью уравнения (1). В результате получим:

$$\frac{\partial e}{\partial t} + P\frac{dV}{dt} = \frac{1}{\rho(1-\alpha)}\left(uF - Q + \alpha u\frac{\partial P}{\partial x}\right), \qquad (7)$$

где $V=1/\rho$. Сравним уравнение (7), которое является следствием уравнений (1)-(3), с уравнением для удельной внутренней энергии газа:

$$\frac{de}{dt} + P\frac{dV}{dt} = T\frac{dS}{dt}, \qquad (8)$$

где T – температура, S – энтропия. Из (7) и (8) следует, что энтропия газа при его движении между частицами решётки изменяется согласно уравнению:

$$T\frac{dS}{dt} = -\frac{Q}{\rho(1-\alpha)} + \frac{u}{\rho(1-\alpha)}\left(F + \alpha\frac{\partial P}{\partial x}\right), \qquad (9)$$

Если решётка отсутствует, то $\alpha=0$, $F=0$, $Q=0$ и энтропия остаётся постоянной вдоль траекторий частиц газа. Однако, если $\alpha>0$, то газ дополнительно разогревается из-за работы $\frac{u}{\rho(1-\alpha)}\left(F + \alpha\frac{\partial P}{\partial x}\right)$ причём этот член таков, что при $\alpha \to 1$ $\frac{dS}{dt} \to \infty$, т.е. газ испытывает тепловой взрыв. Из уравнения (9) также следует, что обмен импульсом и тепловой энергией в модели (1)–(3) абсолютно необратимы.

Проведем анализ инвариантности системы уравнений (1)-(3) относительно преобразования Галилея. С этой целью перейдем в новую систему координат, которая движется с постоянной скоростью D. При этом скорость и координата изменятся так:

$$u_H = u + D, \qquad x_H = x + Dt.$$

Производные по координате и времени определяются следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x_H}, \qquad \left(\frac{\partial}{\partial t}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_H + \left(\frac{\partial}{\partial x_H}\right)D.$$

После перехода в движущуюся систему координат значок H будем опускать. Функция F и Q не изменяются при переходе в новую систему координат.

Легко проверить, что уравнения (1) и (2) для газа инвариантны к преобразованию Галилея, уравнение (2) для решётки неинвариантно и должно быть заменено уравнением:

$$\frac{d_g u_g}{dt} = 0. \qquad (10)$$

Рассмотрим далее уравнение (3) для газа. В новой системе координат, движущейся с постоянной скоростью D, уравнение (3) имеет вид:

$$\rho\frac{dE}{dt} + \frac{\partial Pu}{\partial x} + \frac{Q}{(1-\alpha)} = \omega, \qquad (11)$$

где:

$$\omega = \frac{u - D}{(1 - \alpha)}\left(F + \alpha\frac{\partial P}{\partial x}\right). \quad (12)$$

Проделав с уравнением (11) преобразования, аналогичные преобразованиям в неподвижной системе координат, получим уравнение производства энтропии:

$$T\frac{dS}{dt} = -\frac{Q}{\rho(1 - \alpha)} + \frac{u - D}{\rho(1 - \alpha)}\left(F + \alpha\frac{\partial P}{\partial x}\right), \quad (13)$$

Из сравнения уравнений (9) и (13) видно, что вторые слагаемые в правых частях зависят от выбора системы координат, т.е. от D. Иными словами, уравнения энергии (3) не инвариантно к преобразованию Галилея. Если разделить энтропию на две части:

$$S = S_{PH} + S_G,$$

где S_{PH} – определяется «физикой» модели, а S_G определяется Галилеевой не инвариантностью, то мы получим дополнительное уравнение производства энтропии:

$$T\frac{dS_G}{dt} = \frac{u - D}{\rho(1 - \alpha)}\left(F + \alpha\frac{\partial P}{\partial x}\right), \quad (14)$$

возникшее исключительно из-за того, что авторы модели [8] пренебрегли фундаментальными принципами механики.

Модификация модели [8]. Обратим внимание, что поскольку в смеси α=const, то согласно [2] множители (1–α) перед производной скорости по времени в (2) и 1/(1–α) перед функцией теплообмена в (3) должны отсутствовать. Кроме того, в уравнении движения (2) действует сила межкомпонентного взаимодействия F, а в уравнении энергии (3) работа этой силы отсутствует, что является одной из причин неинвариантности уравнения энергии (3) к преобразованию Галилея. С учётом этих замечаний уравнения движения и энергии газа запишем в виде:

$$\rho\frac{du}{dt} + \frac{\partial P}{\partial x} = -F, \quad (15)$$

$$\rho\frac{dE}{dt} + \frac{\partial Pu}{\partial x} = -Q - Fu, \quad (16)$$

Проделав все необходимые преобразования при переходе в систему координат, движущуюся с постоянной скоростью D, получим, что модель смеси, в которой поведение газа определяется уравнениями (1), (15), (16), инвариантна к преобразованию Галилея, а её уравнение производства энтропии имеет вид:

$$T\frac{dS}{dt} = -\frac{Q}{\rho}. \quad (17)$$

Уравнение (17) согласуется со вторым законом термодинамики. Видим, что производство энтропии газовой фазы определяется только межфазным теплообменом.

К сожалению, принцип инвариантности к преобразованию Галилея не выполняется в ряде моделей многокомпонентных сред, публикуемых в журналах. Такие модели не способны прогнозировать результаты тех физических процессов, для моделирования которых они предназначены.

Сравнение двух моделей. Исследуем механическое воздействие УВ на стенку преграды в зависимости от концентрации конденсированного материала в решётках и размеров их узлов. Анализ механического воздействия УВ на стенку преграды проведем с помощью модели «замороженной» газовзвеси из [8] и модернизированной модели, в которой поведение газа определяется уравнениями (1), (4)–(6), (15), (16). Выражения для интенсивности «внешнего» силового и теплового взаимодействия газа с решеткой, задаются с учетом стесненности узлов [8], следующим образом:

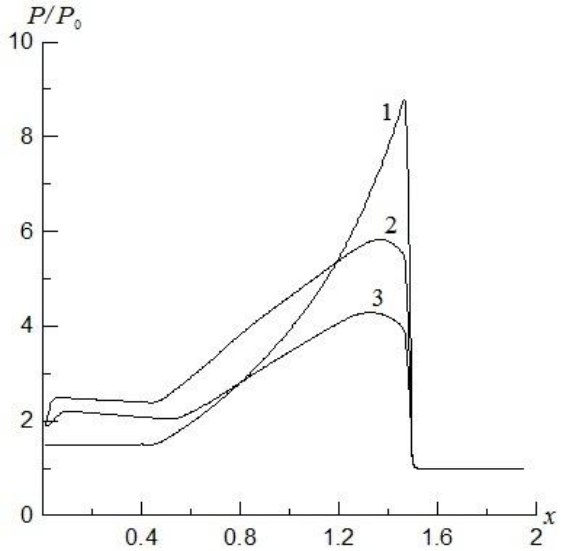


Рис. 1.

Поставленная задача решалась численно методом крупных частиц [9] по алгоритму [10]. Расчеты выполнялись для системы воздух-железо. Координаты границ выбирались, как и в [8] x_0=0, x_1=0,45 м, x_2=1,95 м. На рис.1 представлены профили давления в момент времени, когда УВ находится в точке x=1,5 м. Цифрой 1 обозначено распределение давления при отсутствии решётки, цифрой 2 – для математической модели «замороженной» газовзвеси работы [8], цифрой 3 – для модифицированной математической модели.

Сравнение зависимостей 2 и 3 показывает, что добавка работы сил межкомпонентного взаимодействия в уравнение энергии газовой фазы, приводит к более значительному затуханию УВ, чем в рамках математической модели «замороженной » газовзвеси работы [8].

На рис. 2 и рис. 3 представлены профили безразмерной энтропийной функции, когда УВ находится в точках x=1,0 м и x=1,5 м соответственно. Кривая 1 относится к математической модели «замороженной » газовзвеси работы [8], а кривая 2 – к модифицированной модели. Видно, что модифицированная математическая модель «замороженной» газовзвеси действительно описывает изоэнтропическое течение газовой фазы за УВ в отличие от модели «замороженной » газовзвеси работы [8].

Поскольку интенсивность УВ в расчетах, проведенных в рамках модели работы [8], падает значительно медленнее, чем в рамках модифицированной математической модели, то и импульс передаваемый на стенку будет больше. Это подтверждено на рис. 4, где представлены профили импульса, передаваемого стенке, в зависимости от диаметра частиц.

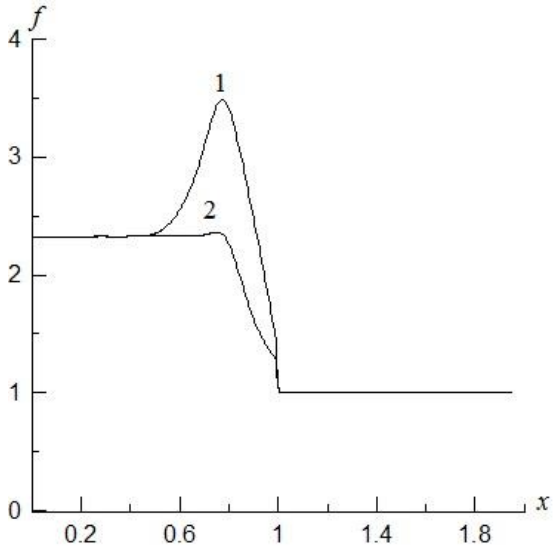


Рис.2

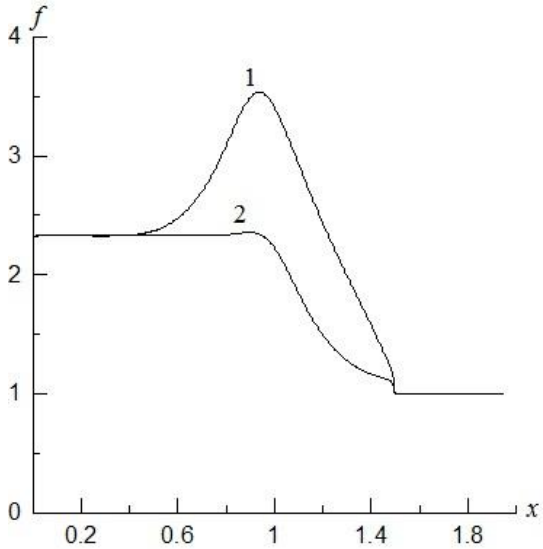


Рис.3

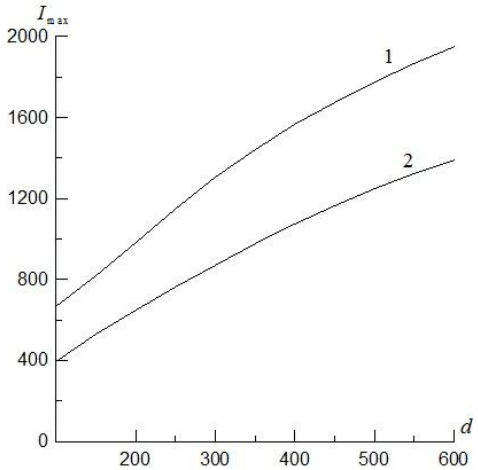


Рис. 4

Заключение 1. Проведенный в работе анализ показал, что предложенная в [8] модель смеси уравнения (1)–(6) не является инвариантной относительно преобразования Галилея и, следовательно, расчеты, проведенные методом крупных частиц, который использует эту модель не являются достоверными.

2. Предложенная в работе модифицированная математическая модель «замороженной» газовзвеси (уравнения (1), (4)–(6), (15), (16)) является инвариантной относительно преобразования Галилея.

3. Результаты взаимодействия ударной волны с решёткой, полученная по этим моделям, существенно различаются.

Библиографический список

1. Ковалев, Ю.М. Ослабление воздушных ударных волн системой решеток / Ю.М. Ковалев, А.Ю. Черемохов // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Математическое моделирование физических процессов». – 1997. – Вып. 3. – С. 39–43.

2. Куропатенко, В.Ф. Новые модели механики сплошных сред / В.Ф. Куропатенко // Инженерно-физический журнал. – 2011. – Т. 84. – № 1. – С. 74–92.

3. Рахматуллин, Х.А. Основы газодинамики взаимопроникающих движений сжимаемых сред / Х.А. Рахматулин // ПММ. – 1956. – Т. 20. – Вып. 27. – С. 184–195.

4. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности некоторых математических моделей многокомпонентных сред / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 6. – № 11(270). – С. 4–7.

5. 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.

6. Гришин, А.М. Экспериментальное исследование воздействия взрыва конденсированных ВВ на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Доклады Академии наук. – 1989. – Т. 308, № 5. – С. 1074–1078.

7. Гришин, А.М. Экспериментальное и теоретическое исследование взаимодействия взрыва на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Физика горения и взрыва. – 1989. – Т. 25, № 6. – С. 72–79.

8. Кругликов, Б.С. Ослабление воздушных ударных волн экранирующими решётками / Б.С. Кругликов, А.Г. Кутушев // ФГВ. – 1988. – № 1. – С. 115–117.

9. Белоцерковский, О.М., Метод крупных частиц в газовой динамике / О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов – М.: Наука, 1982.

10. Ивандаев А.И., Численное исследование нестационарных волновых течений газовзвесей с выделением границ двухфазных областей и контактных разрывов в несущем газе / А.И. Ивандаев, А.Г. Кутушев // Численные методы в механике сплошных сред. – 1983. – Т. 14, № 6. – С. 47–60.

К содержанию

УДК 532.529

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВИДА СИЛЫ МЕЖФАЗНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ГАЗОВЗВЕСИ, ИНВАРИАНТНОЙ ОТНОСИТЕЛЬНО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ГАЛИЛЕЯ

Ю.М. Ковалев

В данной работе проведен анализ инвариантности относительно преобразования Галилея известной математической модели, описывающей течение двухфазной гетерогенной среды: газ – твердые частицы. Было показано, что, несмотря на инвариантность уравнений сохранения, входящих в состав математической модели двухфазной гетерогенной среды: газ – твердые частицы, получающееся уравнение сохранения полной энергии смеси не является достоверным. В работе подробно исследованы и устранены причины данного несоответствия. Через анализ инвариантности относительно преобразования Галилея полученной математической модели двухфазной гетерогенной среды: газ – твердые частицы, была определена функциональная зависимость силы межфазного взаимодействия.

Ключевые слова: математическая модель, инвариантность, многокомпонентная смесь**.**

Введение

С течениями гетерогенных сред очень часто приходится сталкиваться в различных областях науки и техники. Правильное применение математических моделей многокомпонентных многофазных сред позволяет прогнозировать многие техногенные катастрофы и находить верные средства по их предотвращению. Перспективное использование взрывных процессов в ряде отраслей современной техники тесно связано с решением вопросов обеспечения эффективных мер безопасности, защиты инженерных сооружений и технологического оборудования от действия ударных волн (УВ). Показано, что перспективными средствами защиты могут быть перемычки, разрушающиеся при взаимодействии с УВ и образующие экранирующие слои или завесы из пены или аэровзвесей [1].

В связи с этим важное прикладное значение представляет изучение проблемы локализации механических эффектов взрыва и ослабления УВ с помощью математического моделирования данных физических процессов. Поэтому с особой остротой встает проблема разработка математических моделей многокомпонентных гетерогенных сред [2], адекватных тем физическим процессам, которые они пытаются описывать. Более того, для быстропротекающих процессов есть такие проблемы, когда математическое моделирование является единственным средством предварительного изучения явлений [3, 4]. Для верификации расчетов, содной стороны, ис-

пользуют известные экспериментальные данные, а с другой стороны, при анализе проведенных измерений используют математические модели. Очень важно, чтобы условия проведения расчетов и экспериментов совпадали, а математическая модель была адекватна изучаемому физическому процессу [5, 6].

В настоящей статье с помощью анализа инвариантности относительно преобразования Галилея математической модели аэровзвеси [7, 8], применяемой для математического моделирования перехода конвективного горения унитарного твердого топлива во взрыв, попытаемся определить дефекты данной математической модели [9, 10] и найти способы их устранения.

1. Математическая модель газовзвеси

Рассмотрим одномерный плоский случай математической модели течения газа с твердыми частицами (аэровзвесь), которая описывается системой уравнений сохранения [8], и проведем оценку ее на инвариантности относительно преобразования Галилея.

Система уравнений сохранения двухфазнойаэровзвеси [8] без химических превращений имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial x} = 0, \qquad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial x} = 0, \qquad \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n v_2}{\partial x} = 0, \tag{1.1}$$

$$\rho_1 \frac{d_1 v_1}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} - nR, \qquad \rho_2 \frac{d_2 v_2}{dt} = nR, \tag{1.2}$$

Разделим силу взаимодействия между фазами R на две части [11]: на составляющую из-за воздействия макроскопического поля давлений – $\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x}$, которая не связана со скоростной неравновесностью между фазами, и составляющуюf, которая связана с несовпадением скоростей:

$$nR = -\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x} + nf.$$

Подставляя полученное выражение в равенства (1.2) и преобразовывая левые части этих равенств к дивергентному виду, получим:

$$\frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1^2}{\partial x} = -\alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x} - nf \ , \tag{1.3}$$

$$\frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2^2}{\partial x} = -\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x} + nf, \tag{1.4}$$

К системе уравнений (1.1), (1.3) и (1.4) добавляются уравнения сохранения внутренней энергии и уравнения состояния:

$$\rho_1 \frac{d_1 e_1}{dt} = \frac{p\alpha_1}{(\overset{\circ}{\rho_1})} \frac{d_1 \overset{\circ}{\rho_1}}{dt} + nf(v_1 - v_2) - nq, \tag{1.5}$$

$$\rho_2 \frac{d_2 e_2}{dt} = \frac{p\alpha_2}{(\overset{\circ}{\rho_2})} \frac{d_2 \overset{\circ}{\rho_2}}{dt} + nq, \tag{1.6}$$

$$p = p_1(\overset{\circ}{\rho_1}, T_1) = p_2(\overset{\circ}{\rho_2}, T_2), \quad e_1 = e_1(\overset{\circ}{\rho_1}, T_1), \quad e_2 = e_2(\overset{\circ}{\rho_2}, T_2),$$

$$\rho_1 = \overset{\circ}{\rho_1}\alpha_1, \qquad \rho_2 = \overset{\circ}{\rho_2}\alpha_2, \ \ \alpha_1 + \alpha_2 = 1, \quad E_i = e_i + \frac{v_i^2}{2} (i = 1, 2).$$

Здесь индексы 1, 2 относятся соответственно к газу и частицам; $\overset{\circ}{\rho_i}, \alpha_i$ (i= 1, 2) – истинные плотности и объемные содержания фаз; $\rho_i, v_i, T_i, e_i, E_i$ – парциальная плотность, скорость, температура, внутренняя и полная энергия i-ой фазы; p – давление, n – число частиц в единице объема смеси. Уравнения (1.1) – уравнения неразрывности газа и частиц и уравнение сохранения числа частиц в единице объема смеси; (1.3) и (1.4) – уравнения импульса газа и частиц; (1.5) – уравнения сохранения внутренней энергии газа и частиц.

Запишем исходную систему уравнений в новой системе координат, движущейся с постоянной скоростьюD. Скорости в новой системе координат будут равны:

$$v_{1\text{н}} = v_1 + D, \tag{1.7}$$

$$v_{2\text{н}} = v_2 + D, \tag{1.8}$$

Координата будет определяться из уравнения:

$$x_\text{н} = x + Dt. \tag{1.9}$$

Производные:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x_\text{н}}, \tag{1.10}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial}{\partial x_\text{н}}\right) D. \tag{1.11}$$

Таким образом, первое из уравнений (1.1) с учетом (1.7)–(1.11) принимает вид:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1}{\partial x_\text{н}} D + \frac{\partial \rho_1 (v_{1\text{н}} - D)}{\partial x_\text{н}} = 0$$

или

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1}{\partial x_\text{н}} D + \frac{\partial \rho_1 v_{1\text{н}}}{\partial x_\text{н}} - \frac{\partial \rho_1 D}{\partial x_\text{н}} = 0.$$

Получаем:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_{1\text{н}}}{\partial x_\text{н}} = 0. \tag{1.12}$$

Аналогично, второе и третье уравнения (1.1) с учетом (1.7)–(1.11) принимают следующий вид:

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_{2\text{н}}}{\partial x_\text{н}} = 0, \tag{1.13}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n v_{2\text{н}}}{\partial x_\text{н}} = 0. \tag{1.14}$$

Запишем уравнение (1.3) в новой системе координат:

$$\frac{\partial \rho_1 (v_{1\text{н}} - D)}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 (v_{1\text{н}} - D)}{\partial x_\text{н}} D + \frac{\partial \rho_1 (v_{1\text{н}} - D)^2}{\partial x_\text{н}} + \alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x_\text{н}} = -nf$$

или

$$\frac{\partial \rho_1 v_{1\text{н}}}{\partial t} - \frac{\partial \rho_1 D}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_{1\text{н}} D}{\partial x_\text{н}} - \frac{\partial \rho_1 D^2}{\partial x_\text{н}} + \frac{\partial \rho_1 v_{1\text{н}}^2}{\partial x_\text{н}} -$$
$$-2\frac{\partial \rho_1 v_{1\text{н}} D}{\partial x_\text{н}} + \frac{\partial \rho_1 D^2}{\partial x_\text{н}} + \alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x_\text{н}} = -nf.$$

Используя (1.12), получаем:

$$\frac{\partial \rho_1 v_{1\text{н}}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_{1\text{н}}^2}{\partial x_\text{н}} + \alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x_\text{н}} = -nf. \tag{1.15}$$

Аналогично исследуется на инвариантность и уравнение сохранения импульса конденсированной фазы (1.4). В результате получается следующее уравнение:

$$\frac{\partial \rho_2 v_{2\text{н}}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_{2\text{н}}^2}{\partial x_\text{н}} + \alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x_\text{н}} = nf. \tag{1.16}$$

Проведенный анализ инвариантности относительно преобразования Галилея показал, уравнения неразрывности (1.1) и уравнения сохранения импульса (1.3) и (1.4) являются инвариантными и совпадают по форме с уравнениями (1.12)–(1.16).

Получим уравнения сохранения кинетической энергии газовой и конденсированной фаз и проведем их анализ на инвариантность относительно преобразования Галилея.

Умножая уравнение сохранения импульса газовой фазы (1.3) на v_1, а уравнение сохранения импульса конденсированной фазы (1.4) на v_2, получим уравнения сохранения кинетической энергии газа и частиц соответственно:

$$v_1\left[\frac{\partial\rho_1 v_1}{\partial t}+\frac{\partial\rho_1 v_1^2}{\partial x}+\alpha_1\frac{\partial p}{\partial x}\right]=-fv_1,$$

$$v_2\left[\frac{\partial\rho_2 v_2}{\partial t}+\frac{\partial\rho_2 v_2^2}{\partial x}+\alpha_2\frac{\partial p}{\partial x}\right]=fv_2,$$

которые после простых преобразований принимают следующий вид:

$$\frac{\partial\rho_1\frac{{v_1}^2}{2}}{\partial t}+\frac{\partial\rho_1 v_1\frac{v_1^2}{2}}{\partial x}+\alpha_1 v_1\frac{\partial p}{\partial x}=-fv_1, \tag{1.17}$$

$$\frac{\partial\rho_2\frac{{v_2}^2}{2}}{\partial t}+\frac{\partial\rho_2 v_2\frac{v_2^2}{2}}{\partial x}+\alpha_2 v_2\frac{\partial p}{\partial x}=fv_2, \tag{1.18}$$

Проведем анализ инвариантности относительно преобразования Галилея уравнений сохранения кинетической энергии газа и частиц (1.17) и (1.18) соответственно. С этой целью переходим в новую систему координат в соответствии с соотношениями (1.7)–(1.11). В новой системе координат уравнение сохранения кинетической энергии газа имеет следующий вид:

$$\frac{1}{2}\frac{\partial\rho_1(v_{1\text{н}}-D)^2}{2\partial t}+\frac{1}{2}D\frac{\partial\rho_1(v_{1\text{н}}-D)^2}{\partial x_\text{н}}+\frac{1}{2}\frac{\partial\rho_1(v_{1\text{н}}-D)(v_{1\text{н}}-D)^2}{\partial x_\text{н}}+$$
$$+\alpha_1(v_{1\text{н}}-D)\frac{\partial p}{\partial x_\text{н}}=-f(v_{1\text{н}}-D)$$

После проведения необходимых преобразований, получим:

$$\frac{\partial\rho_1\frac{{v_{1\text{н}}}^2}{2}}{\partial t}+\frac{\partial\rho_1 v_{1\text{н}}\frac{v_{1\text{н}}^2}{2}}{\partial x_\text{н}}-D\left(\frac{\partial\rho_1 v_{1\text{н}}}{\partial t}+\frac{\partial\rho_1 v_{1\text{н}}v_{1\text{н}}}{\partial x_\text{н}}\right)+$$
$$+\frac{1}{2}D^2\left(\frac{\partial\rho_1}{\partial t}+\frac{\partial\rho_1 v_{1\text{н}}}{\partial x_\text{н}}\right)+\alpha_1 v_{1\text{н}}\frac{\partial p}{\partial x_\text{н}}-\alpha_1 D\frac{\partial\rho}{\partial x}=-fv_{1\text{н}}+fD$$

Здесь четвертый член в левой части уравнения равен нулю в соответствии с уравнением (1.1), а третий в соответствии с уравнением (1.3) равен:

$$\alpha_1 D\frac{\partial p}{\partial x_\text{н}}+fD.$$

Таким образом, в новой системе координат уравнение сохранения кинетической энергии газа записывается в виде:

$$\frac{\partial\rho_1\frac{{v_{1\text{н}}}^2}{2}}{\partial t}+\frac{\partial\rho_1 v_{1\text{н}}\frac{v_{1\text{н}}^2}{2}}{\partial x_\text{н}}+\alpha_1 v_{1\text{н}}\frac{\partial p}{\partial x_\text{н}}=-fv_{1\text{н}} \tag{1.19}$$

Уравнение (17) полностью совпадает с уравнением (19), следовательно, уравнение сохранения кинетической энергии газа (17) инвариантно относительно преобразования Галилея. Аналогично показывается инвариантность относительно преобразования Галилея уравнения сохранения кинетической энергии частиц (1.18).

Преобразуем уравнения сохранения внутренней энергии газовой (1.5) и конденсированной (1.6) фаз и проведем их анализ на инвариантность относительно преобразования Галилея.

Приведем к дивергентному виду левые части уравнений (1.5) и (1.6), получим:

$$\frac{\partial \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 e_1 v_1}{\partial x} = \frac{p\alpha_1}{(\overset{\circ}{\rho_1})}\frac{d_1\overset{\circ}{\rho_1}}{dt} + nf(v_1 - v_2) - nq, \tag{1.20}$$

$$\frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 v_2}{\partial x} = \frac{p\alpha_2}{(\overset{\circ}{\rho_2})}\frac{d_2\overset{\circ}{\rho_2}}{dt} + nq, \tag{1.21}$$

Из уравнений неразрывности газовой и конденсированной фаз (1.1) легко получить следующие равенства:

$$\alpha_1 \frac{d_1\overset{\circ}{\rho_1}}{dt} = -\overset{\circ}{\rho_1}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 v_1}{\partial x}\right),$$

$$\alpha_2 \frac{d_2\overset{\circ}{\rho_2}}{dt} = -\overset{\circ}{\rho_2}\left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 v_2}{\partial x}\right)$$

Подставляя данные выражения в уравнения (1.20) и (1.21), получим:

$$\frac{\partial \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 e_1 v_1}{\partial x} = -p\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 v_1}{\partial x}\right) + nf(v_1 - v_2) - nq, \tag{1.22}$$

$$\frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 v_2}{\partial x} = -p\left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 v_2}{\partial x}\right) + nq, \tag{1.23}$$

очевидно, что уравнения сохранения внутренней энергии газовой (1.5) и конденсированной (1.6) фаз, преобразованные к виду (1.22) и (1.23), инвариантны относительно преобразования Галилея.

Суммируя левые и правые части соответственно уравнений (1.17), (1.18), (1.22), (1.23), получим уравнение полной энергии смеси:

$$\frac{\partial(\rho_1 E_1 + \rho_2 E_2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[\rho_1 v_1 E_1 + \rho_2 v_2 E_2 + (\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2)p] = 0, \tag{1.24}$$

которое совпадает с уравнением полной энергии смеси, полученным в работах [7, 8].

2. Определение функциональной зависимости силы межфазного взаимодействия

При проведении анализа инвариантности относительнопреобразования Галилея законов сохранения, описывающих поведение газовзвесей, предполагалось, что выражение для силы межфазного взаимодействия является инвариантным. Это возможно в том случае, когда силы межфазного взаимодействия являются функциями разности скоростей f_1(сила Стокса) и функциями разности ускорений f_2 (сила присоединенных масс) [7, 8]. Явный учет выражения для силы присоединенных масс, проведенный в работе [7, 8], приводит к следующим уравнениям сохранения импульса газовой и конденсированной фаз [7, 8]:

$$\frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1^2}{\partial x} + \alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x} = -n f_1 \ , \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2^2}{\partial x} + \frac{3}{2}\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x} = n f_1. \tag{2.2}$$

Из уравнений (2.1) и (2.2) следует, что уравнения сохранения кинетической энергии газовой и конденсированных фаз имеют следующий вид:

$$\frac{\partial \rho_1 \frac{{v_1}^2}{2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1 \frac{v_1^2}{2}}{\partial x} + \alpha_1 v_1 \frac{\partial p}{\partial x} = -n f_1 v_1, \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial \rho_2 \frac{{v_2}^2}{2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2 \frac{v_2^2}{2}}{\partial x} + \frac{3}{2}\alpha_2 v_2 \frac{\partial p}{\partial x} = n f_1 v_2. \tag{2.4}$$

Легко показать, что уравнения (2.1)–(2.4) являются инвариантными относительно преобразования Галилея.

Рассмотрим уравнение сохранения полной энергии смеси (1.24) и проведем его анализ на инвариантность относительно преобразования Галилея, используя уравнения сохранения (1.1),(2.1)–(2.4). Используя формулы перехода к новой системе координат (1.7)–(1.11), получим:

$$\frac{\partial\left(\rho_1\left(e_1 + \frac{(v_{1н} - D)^2}{2}\right) + \rho_2\left(e_2 + \frac{(v_{2н} - D)^2}{2}\right)\right)}{\partial t} +$$
$$+ \frac{\partial\left(\rho_1\left(e_1 + \frac{(v_{1н} - D)^2}{2}\right) + \rho_2\left(e_2 + \frac{(v_{2н} - D)^2}{2}\right)\right)}{\partial x_н} D +$$
$$+ \frac{\partial}{\partial x}\left[\rho_1 (v_{1н} - D)\left(e_1 + \frac{(v_{1н} - D)^2}{2}\right) + \rho_2 (v_{2н} - D)\left(e_2 + \frac{(v_{2н} - D)^2}{2}\right)\right.$$
$$\left. + (\alpha_1 (v_{1н} - D) + \alpha_2 (v_{2н} - D))p\right] = 0.$$

После простых алгебраических преобразований получаем:

$$\frac{\partial(\rho_1 E_{1н} + \rho_2 E_{2н})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[\rho_1 v_{1н} E_{1н} + \rho_2 v_{2н} E_{2н} + (\alpha_1 v_{1н} + \alpha_2 v_{2н})p] + \frac{D}{2}\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x_н} = 0 \qquad (2.5)$$

В новой системе координат в уравнении полной энергии смеси (2.5) появился дополнительный член:

$$\frac{D}{2}\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x_н},$$

который приводит к неинвариантности относительно преобразования Галилея уравнение полной энергии смеси. Появление дополнительного члена связано с явным учетом силы присоединенных масс. Следовательно, для того чтобы не нарушалась инвариантность законов сохранения, описывающих поведение газовзвесей, сила межфазного взаимодействия должна быть только функцией разности скоростей фаз $f = f_1(v_1 - v_2)$.

Автор выражает свою благодарность профессору В.Ф.Куропатенко за полезные обсуждения и интерес к работе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант №13 – 01 – 00072.

Библиографический список

1. Ковалев, Ю.М. Ослабление воздушных ударных волн системой решеток / Ю.М Ковалев, А.Ю Черемохов // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Математическое моделирование физических процессов». – 1997. – Вып. 3. – С. 39–43.

2. Куропатенко, В.Ф. Новые модели механики сплошных сред / В.Ф. Куропатенко // Инженерно- физический журнал. – 2011. – Т. 84, № 1. – С. 74–92.

3. Гришин, А.М. Экспериментальное исследование воздействия взрыва конденсированных ВВ на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Доклады Академии наук. – 1989. – Т.308, № 5. – С. 1074–1078.

4. Гришин, А.М. Экспериментальное и теоретическое исследование взаимодействия взрыва на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Физика горения и взрыва. – 1989. – Т. 25, № 6. – С. 72–79.

5. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности некоторых математических моделей многокомпонентных сред / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Вестник ЮУрГУ, Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 6. – № 11(270). – С. 4–7.

6. 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.

7. Вайнштейн, П.Б. Нестационарные задачи горения аэровзвесей унитарного топлива / П.Б. Вайнштейн, Р.И. Нигматулин, В.В. Попов, Х.А. Рахматулин // Известия АН СССР, Серия «Механика жидкости и газа». – 1981. – Вып. 3. – С. 39–43.

8. Ивандаев, А.И. Газовая динамика многофазных сред. Ударные и детонационные волны в газовзвесях / А.И. Ивандаев, А.Г. Кутушев, Р.И. Нигматулин // Итоги науки и техники. Сер. Механика жидкости и газа. – М.: ВИНИТИ. – 1981. – Т. 16. – С. 209–287.

9. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности относительно преобразования Галилея двухфазных математических моделей гетерогенных сред / Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 1. – С. 30–35.

10. Ковалев, Ю.М. Математический анализ уравнения сохранения двухфазных смесей / Ю.М. Ковалев, Е.А. Ковалева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2014. – Т. 7, № 2. – С. 29–37.

11. Нигматулин, Р.И. Основы механики гетерогенных сред / Р.И. Нигматулин. – М.: Наука, 1978. – 336 с.

К содержанию

УДК 532.529

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГАЗОВЗВЕСИ С ХИМИЧЕСКИМИ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ, ИНВАРИАНТНАЯ ОТНОСИТЕЛЬНО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ГАЛИЛЕЯ

Ю.М. Ковалев, Е.Е. Пигасов

В данной работе предложена математическая модель, описывающая переход горения во взрыв твердого унитарного топлива в двухфазной гетерогенной среде: газ-твердые частицы, инвариантная относительно преобразования Галилея. Проведенный анализ существующих математических моделей, описывающих переход горения во взрыв твердого унитарного топлива в двухфазной гетерогенной среде: газ-твердые частицы, показал, что они не являются инвариантными относительно преобразования Галилея. Были подробно изучены причины, приводящие законы сохранения к не инвариантности относительно преобразования Галилея, которые были устранены в математической модели перехода горения во взрыв твердого унитарного топлива в двухфазной гетерогенной среде: газ-твердые частицы, предложенной в работе.

Ключевые слова: математическая модель, инвариантность, многокомпонентная смесь, гетерогенная среда.

Введение

Отсутствие в природе чистых веществ требует активного развития математических моделей гетерогенных сред, достоверно описывающих изучаемые процессы. Данные математические модели находят широкое применение в различных отраслях науки и техники.

Перспективное использование взрывных процессов в ряде отраслей современной техники тесно связано с решением вопросов обеспечения мер безопасности, защиты инженерных сооружений и технологического оборудования от действия ударных волн (УВ). В связи с этим важное прикладное значение представляет изучение проблемы локализации механических эффектов взрыва и ослабления УВ с помощью математического моделирования данных физических процессов.

В настоящее время на практике ослабление УВ в газе осуществляется путем применения различных экранирующих систем в виде сплошных, перфорированных и разрушающихся перемычек. Один из основных недостатков сплошных и перфорированных перемычек состоит в их весьма большой материалоемкости и соответственно большой величине объемного содержания α твердого конденсированного вещества ($\alpha \approx 1 \div 0{,}1$). Указанный недостаток в меньшей степени относится к перемычкам, разрушающимся при взаимодействии с УВ и образующим экранирующие слои или завесы из пены или аэровзвесей [1], . Поэтому с особой остротой встает проблема разработка математических моделей многокомпонентных гетерогенных сред [2], адекватных тем физическим процессам, которые они пытаются описывать. Более того, для быстропротекающих процессов есть такие проблемы, когда математическое моделирование является единственным средством предварительного изучения явлений [3, 4]. Для верификации расчетов, с одной стороны, используют известные экспериментальные данные, а с другой стороны, при анализе проведенных измерений используют математические модели. Очень важно, чтобы условия проведения расчетов и экспериментов совпадали, а математическая модель была адекватна изучаемому физическому процессу [5, 6].

Анализ инвариантности относительно преобразования Галилея математических моделей аэровзвеси [7, 8], активно применяемых для математического моделирования перехода конвективного горения унитарного твердого топлива во взрыв, показал, что они не являются инвариантными относительно преобразования Галилея [9, 10]. Поэтому в данной работе был проведен анализ причин, приводящих к не инвариантности относительно преобразования Галилея, и предложен подход к построению математической модели перехода конвективного горения унитарного твердого топлива во взрыв, инвариантной относительно преобразования Галилея.

3. Математическая модель газовзвеси

Рассмотрим одномерный плоский случай математической модели течения газа с твердыми частицами (аэровзвесь), которая описывается системой уравнений сохранения [11], и проведем оценку ее на инвариантность относительно преобразования Галилея.

Система уравнений сохранения двухфазной аэровзвеси [11] без химических превращений имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial x} = 0, \qquad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial x} = 0, \qquad \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n v_2}{\partial x} = 0, \tag{1.1}$$

$$\rho_1 \frac{d_1 v_1}{dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} - nR, \qquad \rho_2 \frac{d_2 v_2}{dt} = nR, \tag{1.2}$$

$$\rho_1 \frac{d_1 e_1}{dt} = \frac{p\alpha_1}{(\overset{\circ}{\rho_1})} \frac{d_1 \overset{\circ}{\rho_1}}{dt} + nR(v_1 - v_2) - nq, \tag{1.3}$$

$$\rho_2 \frac{d_2 e_2}{dt} = \frac{p\alpha_2}{(\overset{\circ}{\rho_2})} \frac{d_2 \overset{\circ}{\rho_2}}{dt} + nq \tag{1.4}$$

$$p = p_1(\overset{\circ}{\rho_1}, T_1) = p_2(\overset{\circ}{\rho_2}, T_2), \quad e_1 = e_1(\overset{\circ}{\rho_1}, T_1), \quad e_2 = e_2(\overset{\circ}{\rho_2}, T_2),$$

$$\rho_1 = \overset{\circ}{\rho_1}\alpha_1, \qquad \rho_2 = \overset{\circ}{\rho_2}\alpha_2, \quad \alpha_1 + \alpha_2 = 1, \quad E_i = e_i + \frac{v_i^2}{2} (i = 1, 2).$$

Здесь индексы 1, 2 относятся соответственно к газу и частицам; $\overset{\circ}{\rho}_i, \alpha_i$ $(i = 1, 2)$ – истинные плотности и объемные содержания фаз; $\rho_i, v_i, T_i, e_i, E_i$ – парциальная плотность, скорость, температура, внутренняя и полная энергия i-ой фазы; p – давление, n – число частиц в единице объема смеси. Уравнения (1) – уравнения неразрывности газа и частиц и уравнение сохранения числа частиц в единице объема смеси; (2) – уравнения импульса газа и частиц; (3) и (4) – уравнения сохранения внутренней энергии газа и частиц.

Получим уравнения сохранения кинетической энергии газовой и конденсированной фаз.

Умножая уравнение сохранения импульса газовой фазы на v_1, а уравнение сохранения импульса конденсированной фазы на v_2, получим уравнения сохранения кинетической энергии газа и частиц соответственно:

$$v_1 \left[\frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1^2}{\partial x}\right] = -v_1 \frac{\partial p}{\partial x} - nRv_1,$$

$$v_2 \left[\frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2^2}{\partial x}\right] = nRv_2,$$

которые после простых преобразований принимают следующий вид:

$$\frac{\partial \rho_1 \frac{{v_1}^2}{2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1 \frac{v_1^2}{2}}{\partial x} = -v_1 \frac{\partial p}{\partial x} - nRv_1, \tag{1.5}$$

$$\frac{\partial \rho_2 \frac{{v_2}^2}{2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2 \frac{v_2^2}{2}}{\partial x} = nRv_2. \tag{1.6}$$

Проведем анализ инвариантности относительно преобразования Галилея уравнений сохранения (1.1), (1.2), (1.5) и (1.6).

Запишем уравнения (1.1), (1.2), (1.5) и (1.6) в новой системе координат, движущейся с постоянной скоростью D. Скорости в новой системе координат будут равны:

$$v_{1н} = v_1 + D, \tag{1.7}$$

$$v_{2н} = v_2 + D. \tag{1.8}$$

Координата будет определяться из уравнения:

$$x_н = x + Dt. \tag{1.9}$$

Производные:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x_н}, \tag{1.10}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial}{\partial x_н}\right) D. \tag{1.11}$$

Легко показать [9, 10], что уравнения (1.1), (1.2), (1.5) и (1.6) инвариантны относительно преобразования Галилея.

Преобразуем левые части уравнений сохранения внутренней энергии газа и частиц. С учетом равенств (1.1) они могут быть представлены в виде:

$$\frac{\partial \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 e_1 v_1}{\partial x} = \frac{p\alpha_1}{(\overset{\circ}{\rho_1})} \frac{d_1 \overset{\circ}{\rho_1}}{dt} + nR(v_1 - v_2) - nq, \tag{1.12}$$

$$\frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 v_2}{\partial x} = \frac{p\alpha_2}{(\overset{\circ}{\rho_2})} \frac{d_2 \overset{\circ}{\rho_2}}{dt} + nq. \tag{1.13}$$

Из уравнений неразрывности газовой и конденсированной фаз (1.1) легко получить следующие равенства:

$$\alpha_1 \frac{d_1 \overset{\circ}{\rho_1}}{dt} = -\overset{\circ}{\rho_1}\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 v_1}{\partial x}\right),$$

$$\alpha_2 \frac{d_2 \overset{\circ}{\rho_2}}{dt} = -\overset{\circ}{\rho_2}\left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 v_2}{\partial x}\right).$$

Подставляя данные выражения в уравнения (1.12) и (1.13) соответственно, получим:

$$\frac{\partial \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 e_1 v_1}{\partial x} = -p\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 v_1}{\partial x}\right) + nR(v_1 - v_2) - nq, \tag{1.14}$$

$$\frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 v_2}{\partial x} = -p\left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 v_2}{\partial x}\right) + nq. \tag{1.15}$$

Очевидно, что уравнения сохранения внутренней энергии газовой (1.3) и конденсированной (1.4) фаз, преобразованные к виду (1.14) и (1.15), инвариантны относительно преобразования Галилея.

Получим уравнение сохранения полной энергии смеси. Для этого суммируем левые и правые части уравнений (1.5), (1.6), (1.14), (1.15). В результате получим:

$$\frac{\partial(\rho_1 E_1+\rho_2 E_2)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}[\rho_1 v_1 E_1+\rho_2 v_2 E_2+(\alpha_1 v_1+\alpha_2 v_2)p]=-\alpha_2(v_1-v_2)\frac{\partial p}{\partial x}, \qquad (1.16)$$

которое не совпадает с уравнением сохранения полной энергии смеси, полученным в работе [7,11]. Для того, чтобы убрать это несоответствие, необходимо разделить силу взаимодействия между фазами R на две части [12]: на составляющую из-за воздействия макроскопического поля давлений – $\alpha_2\frac{\partial p}{\partial x}$, которая не связана со скоростной неравновесностью между фазами, и составляющую f, которая связана с несовпадением скоростей:

$$nR=-\alpha_2\frac{\partial p}{\partial x}+nf.$$

Подставляя полученное выражение в равенства (1.2) и преобразовывая левые части этих равенств к дивергентному виду, получим:

$$\frac{\partial\rho_1 v_1}{\partial t}+\frac{\partial\rho_1 v_1^2}{\partial x}=-\alpha_1\frac{\partial p}{\partial x}-nf\ , \qquad (1.17)$$

$$\frac{\partial\rho_2 v_2}{\partial t}+\frac{\partial\rho_2 v_2^2}{\partial x}=-\alpha_2\frac{\partial p}{\partial x}+nf, \qquad (1.18)$$

К системе уравнений (1.1), (1.17) и (1.18) добавляются уравнения сохранения внутренней и кинетической энергии:

$$\frac{\partial\rho_1 e_1}{\partial t}+\frac{\partial\rho_1 e_1 v_1}{\partial x}=-p(\frac{\partial\alpha_1}{\partial t}+\frac{\partial\alpha_1 v_1}{\partial x})+nf(v_1-v_2)-nq, \qquad (1.19)$$

$$\frac{\partial\rho_2 e_2}{\partial t}+\frac{\partial\rho_2 e_2 v_2}{\partial x}=-p(\frac{\partial\alpha_2}{\partial t}+\frac{\partial\alpha_2 v_2}{\partial x})+nq, \qquad (1.20)$$

$$\frac{\partial\rho_1\frac{{v_1}^2}{2}}{\partial t}+\frac{\partial\rho_1 v_1\frac{v_1^2}{2}}{\partial x}=-\alpha_1 v_1\frac{\partial p}{\partial x}-nf v_1, \qquad (1.21)$$

$$\frac{\partial\rho_2\frac{{v_2}^2}{2}}{\partial t}+\frac{\partial\rho_2 v_2\frac{v_2^2}{2}}{\partial x}=-\alpha_2 v_2\frac{\partial p}{\partial x}+nf v_2. \qquad (1.22)$$

В этом случае уравнение сохранения полной энергии смеси будет иметь вид, совпадающий с предлагаемым в работе в [7, 11]:

$$\frac{\partial(\rho_1 E_1+\rho_2 E_2)}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}[\rho_1 v_1 E_1+\rho_2 v_2 E_2+(\alpha_1 v_1+\alpha_2 v_2)p]=0. \qquad (1.23)$$

Легко показать, что уравнения (1.17)–(1.23) инвариантны относительно преобразования относительно Галилея [9, 10].

4. Математическая модель газовзвеси с химическими превраще-

ниями

В результате проведенного анализа была уточнена математическая модель, описывающая поведение газовзвесей. Полагая далее возможность химического превращения в конденсированной фазе, запишем законы сохранения в следующем виде [11]:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial x} = nJ, \qquad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial x} = -nJ, \qquad \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n v_2}{\partial x} = \psi, \tag{2.1}$$

$$\rho_1 \frac{d_1 v_1}{dt} = -\alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x} - nf + nJ(v_* - v_1)\ , \tag{2.2}$$

$$\rho_2 \frac{d_2 v_2}{dt} = -\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x} + nf - nJ(v_* - v_2), \tag{2.3}$$

$$\begin{gathered} \rho_1 \frac{d_1 e_1}{dt} = \frac{p\alpha_1}{(\overset{\circ}{\rho_1})} \frac{d_1 \overset{\circ}{\rho_1}}{dt} + nf(v_1 - v_2) - \\ -nq + nJ \frac{(v_* - v_1)^2}{2} + nJ(i_* - i_1), \end{gathered} \tag{2.4}$$

$$\rho_2 \frac{d_2 e_2}{dt} = \frac{p\alpha_2}{(\overset{\circ}{\rho_2})} \frac{d_2 \overset{\circ}{\rho_2}}{dt} + nq - nJ \frac{(v_* - v_2)^2}{2} - nJ(i_* - i_2). \tag{2.5}$$

Здесь J характеризует интенсивность химического превращения, i_* – энтальпия. С помощью уравнений (2.1) приведем правые части уравнений сохранения импульса газа (2.2) и частиц (2.3) к дивергентному виду. В результате простых преобразований получим законы сохранения импульса газа и частиц в виде:

$$\frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1^2}{\partial x} = -\alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x} - nf + nJ v_*\ , \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2^2}{\partial x} = -\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x} + nf - nJ v_*. \tag{2.7}$$

С помощью уравнений (2.1) и уравнений сохранения импульса газа (2.6) и частиц (2.7) очень просто получаются уравнения сохранения кинетической энергии газа и частиц в виде:

$$\frac{\partial \rho_1 \frac{{v_1}^2}{2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1 \frac{v_1^2}{2}}{\partial x} = -\alpha_1 v_1 \frac{\partial p}{\partial x} - nf v_1 + nJ v_* v_1 - nJ \frac{v_1^2}{2}, \tag{2.8}$$

$$\frac{\partial \rho_2 \frac{{v_2}^2}{2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2 \frac{v_2^2}{2}}{\partial x} = -\alpha_2 v_2 \frac{\partial p}{\partial x} + nf v_2 - nJ v_* v_2 + nJ \frac{v_2^2}{2}. \tag{2.9}$$

С помощью уравнений (2.1) приведем правые части уравнений сохранения внутренней энергии газа (2.4) и частиц (2.5) к дивергентному виду. В результате простых преобразований получим законы сохранения импульса газа и частиц в виде:

$$\frac{\partial \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 e_1 v_1}{\partial x} = -p\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 v_1}{\partial x}\right) - nq + \\ +nf(v_1 - v_2) + nJ\frac{(v_* - v_1)^2}{2} + nJi_*, \tag{2.10}$$

$$\frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 v_2}{\partial x} = -p\left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 v_2}{\partial x}\right) + \\ +nq - nJ\frac{(v_* - v_2)^2}{2} + nJi_*. \tag{2.11}$$

Не представляет труда показать, что система уравнений (2.1), (2.6)–(2.11) инвариантна относительно преобразования Галилея [9]. Суммируя левые и правые части уравнений сохранения кинетической энергии газа (2.8) и частиц (2.9) с левыми и правыми частями уравнений сохранения внутренней энергии газа (2.10) и частиц (2.11) соответственно получим уравнение сохранения полной энергии смеси (1.23).

Замыкая систему уравнений (2.1), (2.6), (2.7), (2.10) и (2.11) уравнениями состояния газа и частиц:

$$e_1 = c_p(T_1 - T_0) - \frac{p}{\overset{\circ}{\rho}_1}, \quad p = \frac{\overset{\circ}{\rho}_1 R_1 T_1}{1 - \beta \overset{\circ}{\rho}_1}, \tag{2.12}$$

$$e_2 = c_2(T_2 - T_0) + Q^{\circ} - \frac{p}{\overset{\circ}{\rho}_2}, \quad i_i = e_i + \frac{p}{\overset{\circ}{\rho}_i}, \tag{2.13}$$

а так же соотношениями, описывающими интенсивность силового, теплового и химического взаимодействия между фазами:

$$f = \pi d^2 \overset{\circ}{\rho}_1 C_d (v_1 - v_2)|v_1 - v_2|/8, \tag{2.14}$$

$$q = \pi d \lambda_1 Nu(T_1 - T_2), \qquad J = \pi d^2 \overset{\circ}{\rho}_2 u_s \left(\frac{p_2}{p_0}\right)^{\varphi}, \tag{2.15}$$

получаем замкнутую математическую модель для описания перехода горения газовзвеси во взрыв, инвариантную относительно преобразования Галилея. Здесь $T_i -$ температура; Q° – теплота химической реакции при $T_2 = T_0, p = p_0$; p – давление, β – ковольюм; c_pи c_2 – теплоемкости фаз; λ_1 – теплопроводность газовой фазы; R_1 – универсальная газовая постоянная; C_d и Nu – коэффициент трения и число Нуссельта, определяемые числами Рейнольдса (Re) и Прандтля (Pr) относительного движения фаз; d – диаметр частиц, u_s и φ – эмпирические константы, характеризующие скорость горения топлива.

Авторы выражают свою благодарность профессору В.Ф.Куропатенко за полезные обсуждения и интерес к работе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 13 – 01 – 00072.

Библиографический список

1. Ковалев, Ю.М. Ослабление воздушных ударных волн системой решеток / Ю.М Ковалев, А.Ю Черемохов // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Математическое моделирование физических процессов». – 1997. – Вып. 3. – С. 39–43.

2. Куропатенко, В.Ф. Новые модели механики сплошных сред / В.Ф. Куропатенко // Инженерно-физический журнал. – 2011. – Т. 84, № 1. – С. 74–92.

3. Гришин, А.М. Экспериментальное исследование воздействия взрыва конденсированных ВВ на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Доклады Академии наук. – 1989. – Т. 308, № 5. – С. 1074–1078.

4. Гришин, А.М. Экспериментальное и теоретическое исследование взаимодействия взрыва на фронт верхового лесного пожара / А.М. Гришин, Ю.М. Ковалев // Физика горения и взрыва. – 1989. – Т. 25, № 6. – С. 72–79.

5. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности некоторых математических моделей многокомпонентных сред / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 6. – № 11(270). – С. 4–7.

6. 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.

7. Вайнштейн, П.Б. Нестационарные задачи горения аэровзвесей унитарного топлива / П.Б. Вайнштейн, Р.И. Нигматулин, В.В. Попов, Х.А. Рахматулин // Известия АН СССР, Серия «Механика жидкости и газа». – 1981. – Вып. 3. – С. 39–43.

8. Baer, M.F. Two-Phase Mixture Theory for the Deflagration-to-Detonation Transition (DDT) in Reactive Granular Materials / M.F. Baer, J. Nunziato // Int. J. Multiphase Flow. – 1986. – Vol. 12. – pp. 861–889.

9. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности относительно преобразования Галилея двухфазных математических моделей гетерогенных сред / Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 1. – С. 30–35.

10. Ковалев, Ю.М. Математический анализ уравнения сохранения двухфазных смесей / Ю.М. Ковалев, Е.А. Ковалева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2014. – Т. 7, № 2. – С. 29–37.

11. Ивандаев, А.И. Газовая динамика многофазных сред. Ударные и детонационные волны в газовзвесях / А.И. Ивандаев, А.Г. Кутушев, Р.И. Нигматулин // Итоги науки и техники. Сер. Механика жидкости и газа. – М.: ВИНИТИ. – 1981. – Т. 16. – С. 209–287.

12. Нигматулин, Р.И. Основы механики гетерогенных сред / Р.И. Нигматулин. – М.: Наука, 1978. – 336 с.

К содержанию

УДК 533.6.011.1

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА АВТОМОДЕЛЬНОСТИ В ЗАДАЧЕ О ДИНАМИЧЕСКОМ СЖАТИИ ХОЛОДНОГО ГАЗОВОГО ШАРА

В.Ф. Куропатенко, Е.С. Шестаковская, М.Н. Якимова

Рассмотрено решение задачи о динамическом сжатии холодного газового шара, находящегося в сферическом сосуде с непроницаемой стенкой. Под действием зависящего от времени наружного давления стенка движется с отрицательной скоростью. В отличие от решений Я.М. Каждана, К.В. Брушлинского [1] и Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшица [2] коэффициент автомодельности определяется с помощью закона сохранения массы. Такой метод позволяет для каждого заданного показателя адиабаты найти единственный показатель автомодельности.

Ключевые слова: автомодельная сферическая ударная волна, показатель автомодельности, законы сохранения, идеальный газ.

Автомодельная задача о динамическом сжатии холодного газового шара относится к классу задач, из постановки которых нельзя определить группу подобия. Показатель автомодельности, который и задает группу подобия, определяется в процессе решения задачи, что в этом случае и составляет основную трудность.

Некоторые результаты, относящиеся к этой задаче, рассмотрены в книге К.П.Станюковича [3]. Так же задача о схождении волны при γ=1,4 приведена в работе Г. Гудерлея [4].

1. Переход к автомодельным переменным

В качестве исходных возьмём уравнение неразрывности, уравнение движения и следствие из трёх законов сохранения – сохранение энтропии вдоль траектории:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+u\frac{\partial\rho}{\partial r}+\rho\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{2\rho u}{r}=0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial r}=0, \tag{2}$$

$$\frac{\partial s}{\partial t}+u\frac{\partial s}{\partial r}=0. \tag{3}$$

Уравнение состояния идеального газа возьмём в виде:

$$P=f(s)\rho^{\gamma} \tag{4}$$

Уравнения (1)–(4) – описывают одномерные адиабатические течения идеального газа со сферической симметрией. Из (1)–(4) следует уравнение:

$$\frac{\partial P}{\partial t}+u\frac{\partial P}{\partial r}-\frac{\gamma P}{\rho}\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}+u\frac{\partial\rho}{\partial r}\right)=0. \tag{5}$$

Из (1) и (5) следует уравнение:

$$\frac{\partial P}{\partial t}+u\frac{\partial P}{\partial r}-\gamma P\left(\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{2u}{r}\right)=0. \tag{6}$$

Система уравнений (1), (2), (6) содержит P, ρ, u. Перейдём к переменным t и ξ, где:

$$\xi=\frac{r}{b(a-t)^{n}}. \tag{7}$$

Запишем уравнения перехода от переменных t, r к переменным t, ξ для произвольной функции f(t, r) переходящей в функцию f(t, ξ, (t, r)).

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_r=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_\xi+\left(\frac{\partial f}{\partial \xi}\right)_t\left(\frac{\partial \xi}{\partial t}\right)_r, \tag{8}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_t=\left(\frac{\partial f}{\partial \xi}\right)_t\cdot\left(\frac{\partial \xi}{\partial r}\right)_r. \tag{9}$$

Производные ξ (7) по t и r имеют вид:

$$\frac{\partial\xi}{\partial r}=\frac{n\xi}{a-t},\qquad \frac{\partial\xi}{\partial r}=\frac{1}{b(a-t)^{n}}. \tag{10}$$

Уравнения (1), (2), (6) в переменных t, ξ принимают вид:

$$\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}\right)_\xi+\left(\frac{\partial\rho}{\partial\xi}\right)\frac{n\xi}{a-t}+u\frac{\partial\rho}{\partial\xi}\frac{1}{b(a-t)^n}+\rho\frac{\partial u}{\partial\xi}\frac{1}{b(a-t)^n}+\frac{2\rho u}{\xi b(a-t)^n}=0, \tag{11}$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_\xi+\left(\frac{\partial u}{\partial\xi}\right)_t\frac{n\xi}{a-t}+u\left(\frac{\partial u}{\partial\xi}\right)_t\frac{1}{b(a-t)^n}+\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial P}{\partial\xi}\right)_t\frac{1}{b(a-t)^n}=0, \tag{12}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_\xi+\left(\frac{\partial P}{\partial\xi}\right)_t\frac{n\xi}{a-t}+\left(\frac{\partial P}{\partial\xi}\right)_t\cdot\frac{u}{b(a-t)^n}+\frac{\gamma P}{b(a-t)^n}\left(\left(\frac{\partial u}{\partial\xi}\right)_t+\frac{2u}{\xi}\right)=0. \tag{13}$$

Будем искать решение системы (11)-(13) в виде:

$$P=\alpha_p(t)\Pi(\xi),\ \ \rho=\alpha_\rho(t)\delta(\xi),\ \ u=\alpha_u(t)M(\xi). \tag{14}$$

Используя соображения размерностей, будем считать, что:

$$\alpha_p=\alpha_\rho\alpha_u^2. \tag{15}$$

2. Постановка задачи о сжатии газового шара. В момент t_0 в области $0\le r\le r_0$ находится холодный идеальный газ с параметрами $\rho_0=\text{const},\ P_0=0,\ E_0=0,\ u_0=0.$ В точке $t=t_0,\ r=r_0$ задана скорость $u_1<0$ и следовательно в ней находится сильный разрыв. При $t>t_0$ из этой точки в газ станет распространяться ударная волна со скоростью $D<0$. Законы сохранения на фронте сильной ударной волны в идеальном газе имеют вид:

$$\rho_+=\frac{\gamma+1}{\gamma-1}\rho_0, \tag{16}$$

$$D=\frac{\gamma+1}{2}u_+, \tag{17}$$

$$P_+=\frac{\gamma+1}{2}\rho_0u_+^2. \tag{18}$$

Будем считать, что на ударной волне $\xi=1$. Следовательно, $\delta(\xi),M(\xi),\Pi(\xi)$ на ударной волне постоянны.

Из (16) видно, что на сильной ударной волне $\rho_+=\text{const}$. В соответствии с (14) $\rho=\alpha_\rho(t)\delta(\xi)$. Если потребовать, чтобы $M(\xi)$, $\Pi(\xi)$, $\delta(\xi)$ были бы инвариантны относительно начальных данных задачи ρ_0 и u_1, то следует принять:

$$\alpha_\rho=\rho_0,\quad \delta_1=\frac{\gamma+1}{\gamma-1}. \tag{19}$$

В точке $t=t_0,\ r=r_0,\ \xi=1$ из (7) следует:

$$b = \frac{r_0}{\left(a - t_0\right)^n}. \tag{20}$$

Подставив значение b в (7), получим выражение для безразмерной координаты ξ:

$$\xi = \frac{r}{r_0}\left(\frac{a - t_0}{a - t}\right)^n. \tag{21}$$

Уравнение (21) при $\xi = 1$ определяет траекторию фронта ударной волны:

$$r = r_0\left(\frac{a - t}{a - t_0}\right)^n. \tag{22}$$

В момент фокусировки ударной волны t_f её координата становится равной нулю. Из (22) при $r = 0$ и $t = t_f$ следует при $n > 0$:

$$a = t_f.$$

Таким образом:

$$\xi = \frac{r}{r_0}\left(\frac{t_f - t_0}{t_f - t}\right)^n, \tag{23}$$

3. Скорость ударной волны и время фокусировки. Скорость ударной волны определяется дифференцированием (22)

$$D = -\frac{r_0 n}{t_f - t_0}\left(\frac{t_f - t}{t_f - t_0}\right)^{n-1}. \tag{24}$$

Из (24) и (17) следует зависимость u_+ от t:

$$u_+ = -\frac{2r_0 n}{\left(\gamma + 1\right)\left(t_f - t_0\right)} \cdot \left(\frac{t_f - t}{t_f - t_0}\right)^{n-1}. \tag{25}$$

При $t=t_0$ из (24) и (25) следуют выражения для D_1 и u_1:

$$D_1 = -\frac{r_0 n}{t_f - t_0}, \quad u_1 = -\frac{2r_0 n}{\left(\gamma + 1\right)\left(t_f - t_0\right)}. \tag{26}$$

Запишем (24) и (25) с помощью (26) в виде:

$$D = D_1\left(\frac{t_f - t}{t_f - t_0}\right)^{n-1}, \tag{27}$$

$$u_+ = \frac{2}{\gamma + 1} D_1\left(\frac{t_f - t}{t_f - t_0}\right)^{n-1}. \tag{28}$$

Подставим выражение скорости (28) на фронте ударной волны в уравнение (14). Из условия независимости M(ξ) от начальных параметров задачи r_0, t_0, u_1, D_1 следует:

$$M = \frac{2}{\gamma + 1}, \tag{29}$$

$$\alpha_u = D_1 \left(\frac{t_f - t}{t_f - t_0} \right)^{n-1}. \tag{30}$$

Совершенно аналогично подставив u_+ (28) и $P = \alpha_p \cdot \Pi$ из (14) в (18), получим:

$$\alpha_p(t)\Pi_1 = \frac{2}{\gamma + 1} \rho_0 D_1^2 \left(\frac{t_f - t}{t_f - t_0} \right)^{2(n-1)}. \tag{31}$$

Из условия независимости Π_1 от начальных данных задачи следует:

$$\alpha_p(t) = \rho_0 D_1^2 \left(\frac{t_f - t}{t_f - t_0} \right)^{2(n-1)}, \tag{32}$$

$$\Pi_1 = \frac{2}{\gamma + 1}. \tag{33}$$

Значения δ_1, M_1, Π_1- это значения, заданные на границе области в точке ξ=1.

Из (27) выразим t_f через заданные значения r_0, t_0, u_1 è γ и показатель автомодельности n:

$$t_f = t_0 - \frac{2 r_0 n}{(\gamma + 1) u_1}. \tag{34}$$

Значение n пока не известно.

4. Уравнения для безразмерных величин. В результате преобразований система уравнений (11)-(13) сводится к следующим выражениям для M', Π', δ':

$$M' = \frac{(n-1)\xi\left(\delta M(M-\xi) - 2\Pi\right) - 2\gamma M \Pi n}{n\xi\left(\gamma\Pi - (M-\xi)^2 \delta\right)}. \tag{35}$$

$$\Pi' = \frac{\delta\Pi\left[(n-1)\xi\left(2(M-\xi) - \gamma M\right) + 2\gamma M(M-\xi)n\right]}{n\xi\left(\gamma\Pi - (M-\xi)^2 \delta\right)}, \tag{36}$$

$$\delta' = \frac{\delta\left[2M\delta n\left(M-\xi\right)^2 - \left(n-1\right)\xi\left(\delta M\left(M-\xi\right) - 2\Pi\right)\right]}{n\xi\left(M-\xi\right)\left(\gamma\Pi - \left(M-\xi\right)^2\delta\right)}. \tag{37}$$

Функции $\delta(\xi)$, $\Pi(\xi)$, $M(\xi)$ находятся путём интегрирования уравнений (35)–(37) в области $1<\xi<\infty$. Начальные условия при $\delta=1$ таковы:

$$\text{ï ðè } \xi=1 \quad \Pi_1 = \frac{2}{\gamma+1}, \quad \delta_1 = \frac{\gamma+1}{\gamma-1}, \quad M_1 = \frac{2}{\gamma+1}, \tag{38}$$

$$M_1' = \frac{2}{\gamma+1}\left(\frac{3(1-n)}{n} - \frac{4\gamma}{\gamma+1}\right), \quad \Pi_1 = \frac{2}{\gamma^2-1}\left(\frac{1-n}{n}2\cdot(2\gamma-1) - \frac{4\gamma(\gamma-1)}{\gamma+1}\right), \tag{39}$$

$$\delta_1' = \frac{\gamma+1}{(\gamma-1)}\left(\frac{1-n}{n}\frac{6}{\gamma-1} - \frac{4}{\gamma+1}\right). \tag{40}$$

В результате интегрирования уравнений (35)–(37) определяются зависимости $M(\xi)$, $\Pi(\xi)$, $\delta(\xi)$. Для интегрирования системы (35)–(37) нужно задать значение n. Оно зависит от γ. Зависимость $n(\gamma)$ в явном виде отсутствует. Её нужно найти.

5. Определение коэффициента автомодельности

Объём газового шара в момент t_0 равен:

$$\theta_0 = \frac{4}{3}\pi r_0^3. \tag{41}$$

При $t > t_0$ масса газа в объёме θ_0 возрастает. В некоторый момент времени $t_* > t_0$ масса газа в объёме θ_0 равна:

$$m_À = \frac{4}{3}\pi\rho_0 r_{óâ}^3 + 4\pi\int_{r_{óâ}}^{r_0}\rho(r)r^2dr. \tag{42}$$

На ударной волне ξ=1 и из выражения для ξ (23) следует при $t = t_*$

$$r_{óâ} = r_0\left(\frac{t_f - t_*}{t_f - t_0}\right)^n, \quad dr = r_0\left(\frac{t_f - t_*}{t_f - t_0}\right)^n d\xi. \tag{43}$$

После перехода к переменным t и ξ и подстановки (14), (19), (23) и (43) в (42) получим:

$$m_A = 4\pi\rho_0\left(\frac{t_f - t_*}{t_f - t_0}\right)^{3n} r_0^3\left(\frac{1}{3} + \int_1^{\xi_*}\delta\xi^2 d\xi\right). \tag{44}$$

На поверхности с $r = r_0$ величина ξ_* связана с t_* уравнением, следующим из (23):

$$\xi_* = \left(\frac{t_f - t_*}{t_f - t_0}\right)^{-n}. \qquad (45)$$

Таким образом, выражение m_A приобретает вид:

$$m_A = 4\pi r_0^3 \rho_0 \xi_*^{-3}\left(\frac{1}{3} + \int_1^{\xi_*} \delta\xi^2 d\xi\right). \qquad (46)$$

С другой стороны, масса m_A должна быть равна сумме начальной массы и массы, которая за время $t_* - t_0$ втечёт в объём θ_0:

$$m_B = \frac{4}{3}\pi r_0^3 \rho_0 - \int_{t_0}^{t_*} 4\pi r_0^2 \rho u dt, \qquad (47)$$

где u<0. При $r = r_0$ из (23) следует:

$$\xi = \left(\frac{t_f - t}{t_f - t_0}\right)^{-n}, \qquad dt = (t_f - t_0)\xi^{-\left(\frac{n+1}{n}\right)}\frac{1}{n}d\xi. \qquad (48)$$

После подстановки (14), (34) и (48) в (47) получаем:

$$m_B = 4\pi r_0^3 \rho_0\left(\frac{1}{3} + \int_1^{\xi_*} \delta M \xi^{-2} d\xi\right). \qquad (49)$$

Зависимости $\delta(\xi)$ è $M(\xi)$ определяются уравнениями (35)–(37). Величина t_* задаётся произвольно в промежутке $(t_0, t_{\hat{o}})$. Величины ρ_0, r_0, t_0, γ è u_1 заданы при постановке задачи. Значение ξ_* (45) преобразуем с помощью (34) к виду:

$$\xi_* = \left(1 + \frac{(\gamma+1)u_1}{2r_0 n}(t_* - t_0)\right)^{-n}. \qquad (50)$$

Таким образом, чтобы найти n, нужно решить уравнение:

$$Y(n) = m_A(n, t_*) - m_B(n, t_*) = 0. \qquad (51)$$

При вычислении интегралов в выражениях m_A (46) и m_B (49) используются производные M', δ', Π' (35)–(37). При этом может оказаться две возможности:

1) на промежутке $1 \le \xi \le \xi_*$ знаменатель в ноль не обращается;

2) знаменатель в (35)–(37) обращается в ноль при некотором значении ξ.

В первом случае значение n является корнем уравнения (51). Если значение n, при котором вычисляются m_A и m_B, является лишь приближенным значением корня, то $Y \neq 0$. Итерации ведутся до тех пор, пока станет $Y = 0$.

Во втором случае одновременно со знаменателем в (35)–(37) должны обращаться в ноль и числители, т.к. производные M', δ', Π' конечны. Если n задано приближенно, то в точке, где знаменатель обращается в ноль, в качестве $Y(n)$ берется сумма числителей в (35)–(37). Итерации по n ведутся до тех пор, пока станет $Y = 0$.

Результаты расчета приведены в таблице:

Таблица

γ	1,2	1,4	1,667	1,87	2	2,5	2,75	3
n	0,757142	0,717175	0,688838	0,674154	0,667046	0,644039	0,635949	0,629393

Работа выполнена при поддержке РФФИ. Грант 13-01-00072.

Библиографический список

1. Брушлинский, К.В. Об автомодельных решениях некоторых задач газовой динамики / К.В. Брушлинский, Я.М. Каждан // Успехи математических наук. – 1963. – Т. 18, Вып. 2. – С. 3–23.

2. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Изд-во Наука, 1986. – 736 с.

3. Станюкович, К.П. Неустановившиеся движения сплошной среды / К.П. Станюкович. – М.: Гостехиздат, 1971. – 856 с.

4. Guderley, G. Starke kugelige und zylindrische Verdichtungsstösse in der Nähe des Kugelmittelpunktes bzw. der Zylinderachse / G. Guderley // Luftfahrtforschuhg 19. – 1942. – № 9.

К содержанию

УДК 536.46

АНАЛИЗ И УТОЧНЕНИЕ МЕТОДИК РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ЗАЖИГАНИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЕЩЕСТВ ЛУЧИСТОЙ ЭНЕРГИЕЙ

В.К. Рябинин

Рассматриваются возможности уточнения решения обратной кинетической задачи в случае зажигания химически активного непрозрачного К-вещества (пороха, ВВ, ТРТ) лучистой энергией.

Ключевые слова: горение, зажигание, тепловое излучение, обратная кинетическая задача.

Зависимость скорости тепловыделения в химически активном веществе от температуры T и глубины превращения η определяется комбинацией закона действующих масс и закона Аррениуса:

$$QW(T,\eta) = Qz\varphi(\eta)\exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \qquad (1)$$

Предметом обратной кинетической задачи в теории зажигания является определение эффективных значений энергии активации E и предэкспоненциального множителя z или его произведения на тепловой эффект реакции Qz. Исходными данными являются результаты экспериментов, связывающие характерные времена зажигания с параметрами источника энергии зажигания.

В данной работе сделаны некоторые оценки, применительно к одному из классов задач теории зажигания. При зажигании К-вещества лучистой энергией экспериментально исследуется зависимость времени достижения устойчивого зажигания t_3 от плотности падающего лучистого теплового потока q_s или от суммарной энергии импульса этого потока, переданной зажигаемому телу.

Математически процесс зажигания непрозрачного вещества в случае простой реакции порядка m моделируется системой уравнений для температуры T и конверсии η, [1]:

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Q\rho(1-\eta)^m z_0 e^{-\frac{E}{RT}}, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = (1-\eta)^m z_0 e^{-\frac{E}{RT}}. \qquad (3)$$

с начальными и граничными условиями:

$$t=0, \quad 0 \le x < \infty; \quad T(x,0) = T_H; \quad \eta(x,0) = 0;$$

$$t > 0; \quad -\lambda \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0} = q_S > 0; \quad -\lambda \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x\to\infty} = 0.$$

Вывод точных соотношений, связывающих время зажигания с параметрами зажигающего потока, затруднен сильной нелинейностью слагаемого (1), входящего в систему уравнений теории зажигания. Имеются выражения, полученные на основе приближенных подходов.

Методы, основанные на квазистационарной теории зажигания. Квазистационарная теория зажигания лучистой энергией рассмотрена в [1], и с ее применением получена формула для оценки безразмерного времени зажигания:

$$\tau_3 = \frac{\pi}{8}\theta_H^2 = 0,393\theta_H^2. \tag{4}$$

Более точная формула получена аппроксимацией численных расчетов:

$$\tau_3 = \frac{1-0,2|\theta_H| + 0,36\theta_H^2}{1-0,8\beta}. \tag{5}$$

Несколько менее точная аппроксимирующая формула имеет вид:

$$\tau_3 = \frac{0,349\theta_H^2}{1-0,8\beta}. \tag{6}$$

Кроме того, получена формула для безразмерной величины теплового потока; она необходима для расчета заранее не известной масштабной температуры T_*, определяемой в ходе решения:

$$q_0 = \sqrt{2}. \tag{7}$$

Здесь $\theta_H = \frac{E}{RT_*^2}(T_H - T_*)$ – безразмерный температурный напор; T_H – начальная температура зажигаемого тела; c, λ, ρ – теплоемкость, теплопроводность и плотность зажигаемой среды; R – универсальная газовая постоянная; $t_3, \tau_3 = \frac{t_3}{t_a}$ – размерное и безразмерное время зажигания; $\beta = \frac{RT_*}{E} << 1$ – число Аррениуса; $t_a = \frac{c}{Qz}\frac{RT_*^2}{E}\exp\left(-\frac{E}{RT_*}\right)$ – адиабатический период индукции; q_S, $q_0 = \frac{q_S}{\lambda}\frac{E}{RT_*^2}\sqrt{\frac{\lambda}{\rho c}t_a}$ – размерный и безразмерный тепловой поток.

В [1] предложена следующая методика решения обратной кинетической задачи. Для определения зависимости размерного времени зажигания от размерного теплового потока (6) и (7) приводятся к размерной форме:

$$t_3 = \frac{0,349c}{(1-0,8\beta)Qz}\frac{E}{RT_*^2}(T_* - T_H)^2 \exp\left(\frac{E}{RT_*}\right). \tag{8}$$

$$q_S^2 = 2\rho\lambda Qz\frac{RT_*^2}{E}\exp\left(-\frac{E}{RT_*}\right). \qquad (9)$$

Выразим из (9) комплекс:

$$Qz\frac{RT_*^2}{E}\exp\left(-\frac{E}{RT_*}\right) = \frac{q_S^2}{2\rho\lambda}$$

и подставим его в (8)

$$t_3 = \frac{0,349c}{(1-0,8\beta)}(T_* - T_H)^2\frac{2\rho\lambda}{q_S^2},$$

что дает при $\beta = 0$ выражение для начального расчета масштабной температуры как функции от экспериментально определяемых q_s и t_3:

$$T_* = T_H + q_S\sqrt{\frac{t_3}{0,698\lambda\rho c}}. \qquad (10)$$

С другой стороны, логарифмирование (8) дает выражение:

$$\ln\frac{t_3}{\left(1-\frac{T_H}{T_*}\right)^2} = \ln\frac{0,349c}{(1-0,8\beta)Qz}\frac{E}{R} + \frac{E}{RT_*}, \qquad (11)$$

удобное для обработки экспериментальных данных. Аппроксимируя данные в соответствующих координатах прямой, получаем оценки энергии активации E и комплекса Qz.

Уточнение решения. Уточнить оценки можно, пересчитав значения масштабной температуры решением уравнения (9), например, в виде итерационного уравнения:

$$T_*^{\langle k+1\rangle} = \frac{E}{R}\left[2\ln T_*^{\langle k\rangle} - \ln\left(\frac{E}{R}\frac{q_S^2}{2\rho\lambda Qz}\right)\right]^{-1} \qquad (12)$$

с использованием в качестве начального приближения оценки $T_*^{\langle 0\rangle}$ из (10). Эта формула дает более надежные оценки, чем (10), поскольку в ней используются только данные для q_s и, соответственно, не влияют ошибки измерения времени зажигания. Уточненные оценки E и Qz получаем с помощью (11), но уже при $\beta = \frac{RT_*^{\langle k\rangle}}{E} \neq 0$.

На основе (5) можно предложить и более совершенные соотношения для уточнения оценок. Размерное выражение для расчета времени зажигания принимает вид:

$$t_3 = \left[\frac{RT_*^2}{E} - 0,2(T_* - T_H) + 0,36\frac{(T_* - T_H)^2}{\frac{RT_*^2}{E}}\right]\frac{c}{(1-0,8\beta)Qz}\exp\left(\frac{E}{RT_*}\right). \qquad (13)$$

Масштабную температуру получаем из решения уравнения:

$$T_*^4\left(\frac{R}{E}\right)^2 - T_*^3 0,2\frac{R}{E} + T_*^2\left(0,36 + 0,2\frac{RT_H}{E}\right) - 0,72T_*T_H + 0,36T_H^2 - \frac{q_S^2 t_3}{2c\rho\lambda}\left(1 - 0,8\frac{RT_*}{E}\right) = 0. \quad (14)$$

При использовании в качестве начального приближения оценки T_* из (10) при $\beta = 0$, численное решение данного уравнения не представляет проблем.

Уточненные оценки для E и Qz получаем из данных эксперимента с помощью соотношения:

$$\ln\left\{t_3\left(1 - 0,8\frac{RT_*}{E}\right)\left[\frac{RT_*^2}{E} - 0,2\left(T_* - T_H\right) + 0,36\frac{\left(T_* - T_H\right)^2}{\frac{RT_*^2}{E}}\right]^{-1}\right\} = \ln\frac{c}{Qz} + \frac{E}{RT_*}. \quad (15)$$

Методы, основанные на адиабатической теории зажигания. Адиабатическая теория зажигания также рассмотрена в [1], где с ее применением получена формула для расчета безразмерного времени зажигания:

$$\tau_3 = 1 + 2\beta + 0,5\left|\theta_H\right|, \quad (16)$$

и формула для безразмерной величины теплового потока:

$$q_0 = \sqrt{0,5\pi\left|\theta_H\right|}. \quad (17)$$

Близкая по форме к (16), но более точная формула получена аппроксимацией результатов численных расчетов:

$$\tau_3 = 1 + 5,5\beta + 0,53\left|\theta_H\right|. \quad (18)$$

Безразмерные параметры определяются так же, как и в квазистационарном случае, но в качестве опорной температуры используется температура прогрева T_n, определяемая в ходе решения; по физическому смыслу T_n отличается от масштабной температуры в предыдущей задаче.

Начальное приближение при β=0. По аналогии с рассмотренной выше методикой попробуем построить технологию решения обратной кинетической задачи на основе формул (16) и (17). Если пренебречь влиянием малого параметра β, из этих формул можно получить размерные соотношения:

$$t_3 = \left[1 + \frac{0,53E\left(T_n - T_H\right)}{RT_*^2}\right]\frac{RT_n^2}{E}\frac{c}{Qz}\exp\left(\frac{E}{RT_n}\right) \quad (19)$$

$$q_S^2 = \frac{\pi}{2}\rho\lambda Qz\left(T_n - T_H\right)\exp\left(-\frac{E}{RT_n}\right). \quad (20)$$

Выразим из (20) комплекс:

$$Qz\exp\left(-\frac{E}{RT_n}\right) = \frac{2q_S^2}{\pi\rho\lambda\left(T_n - T_H\right)},$$

и подставим его в (19):

$$t_3 = \left[1 + \frac{0,53E\left(T_n - T_H\right)}{RT_*^2}\right]\frac{RT_n^2}{E}\frac{c\pi\rho\lambda\left(T_n - T_H\right)}{2q_S^2}. \qquad (21)$$

Данное выражение не позволяет непосредственно получить необходимое решение, поэтому далее задачу решаем в два этапа.

Грубое начальное приближение. Отметим, что входящий в формулу (21) сомножитель:

$$1 + \frac{0,53E\left(T_n - T_H\right)}{RT_*^2} \approx 1 + \frac{\left|\theta_H\right|}{2} >> 1,$$

поэтому единицей в первом приближении можно пренебречь; это дает вместо (21) более простое выражение:

$$t_3 = 0,53\left(T_n - T_H\right)^2 \frac{c\pi\rho\lambda}{2q_S^2}, \qquad (22)$$

и выражение для приближенной оценки масштабной температуры, как функции от экспериментально определяемых q_S и t_3:

$$T_n^{\langle 0\rangle} = T_H + q_S\sqrt{\frac{3,774t_3}{\pi\lambda\rho c}}. \qquad (23)$$

Используя эту оценку, получаем из (19) (единицей в скобках пренебрегаем) соотношение для грубой оценки E и Qz на основе экспериментальных данных:

$$\ln\frac{t_3}{T_n^{\langle 0\rangle} - T_H} = \ln\frac{0,53c}{Qz} + \frac{E}{RT_n^{\langle 0\rangle}}. \qquad (24)$$

Уточнение результатов при $\beta = 0$. Разрешим соотношение (21) относительно T_n и получим алгебраическое уравнение 3-го порядка:

$$T_n^3\frac{R}{E} + T_n^2\left(0,53 - \frac{RT_H}{E}\right) - 1,06T_nT_H + 0,53T_H^2 - \frac{2q_S^2t_3}{c\pi\rho\lambda} = 0. \qquad (25)$$

Данное уравнение легко решить, используя в качестве начального приближения $T_n^{\langle 0\rangle}$.

Из полного соотношения (19) получаем выражение для обработки экспериментальных данных:

$$\ln\frac{t_3}{\frac{RT_n^2}{E} + 0,53\left(T_n - T_H\right)} = \ln\frac{c}{Qz} + \frac{E}{RT_n}, \qquad (26)$$

с помощью которого получаем на основе МНК уточненные оценки E и Qz.

Методика уточнения оценок для случая $\beta \neq 0$. Попытаемся получить методику уточнения решения с учетом $\beta = \frac{RT_n}{E} \neq 0$. Для этого запишем (18) в размерном виде не исключая слагаемое с β. Вместо (19) получим:

$$t_3 = \left[1 + 5,5\frac{RT_n}{E} + \frac{0,53E\left(T_n - T_H\right)}{RT_*^2}\right]\frac{RT_n^2}{E}\frac{c}{Qz}\exp\left(\frac{E}{RT_n}\right). \quad (27)$$

Для уточнения полученного выше из (23) начального приближения T_n, из (27) получим уравнение 4-го порядка:

$$T_n^4 5,5\left(\frac{R}{E}\right)^2 + T_n^3\frac{R}{E}\left(1 - 5,5\frac{RT_H}{E}\right) + T_n^2\left(0,53 - \frac{RT_H}{E}\right) - 1,06T_nT_H + 0,53T_H^2 - \frac{2q_S^2 t_3}{c\pi\rho\lambda} = 0. \quad (28)$$

Вместо соотношения (24) получаем более общее выражение для обработки экспериментальных данных:

$$\ln\frac{t_3}{\frac{RT_n^2}{E}\left(1 + 5,5\frac{RT_n}{E}\right) + 0,53\left(T_n - T_H\right)} = \ln\frac{c}{Qz} + \frac{E}{RT_n} \quad (29)$$

с помощью которого и получаем уточненные оценки E и Qz.

Таблица 1

Результаты решения модельной задачи

Оценки кинетических данных	E, Дж/моль	Qz, Дж/(кг·с)	$\varepsilon_{макс}$, %	$\varepsilon_{ср}$, %
Квазистационарная теория				
Начальное приближение, β=0 – (10), (11)	154397	$6,742\cdot10^{18}$	4,3	2,6
Уточнение при β=0 – (9), (11)	155421	$6,942\cdot10^{18}$	4,0	2,3
Уточнение β>0, вторая итерация – (9), (11)	154442	$7,134\cdot10^{18}$	3,7	2,0
Уточнение по формулам (14), (15)	155493	$1,098\cdot10^{19}$	1,4	0,6
Адиабатическая теория				
Первое приближение при β=0 – (23), (24)	154481	$2,405\cdot10^{18}$	13,5	12
Коррекция (1 вариант при β=0) – (25), (26)	154358	$6,048\cdot10^{18}$	1,4	0,6
Коррекция (2 вариант при β>0 – (28), (29)	155037	$8,116\cdot10^{18}$	1,8	0,6
Подстановка исходных данных в расчетные формулы				
Квазистационарная теория – (9), (8)	166290	$1,0\cdot10^{20}$	3,6	1,5
Адиабатическая теория – (20), (27)	166290	$1,0\cdot10^{20}$	5,2	2,6
Подстановка полученных оценок в численную модель				
Из квазистационарной методики	155493	$1,098\cdot10^{19}$	2,7	1,2
Из адиабатической методики	155037	$8,116\cdot10^{18}$	4,2	2,8

Оценка эффективности методик решения обратной задачи на модельных данных. Для сравнения эффективности данных методик было произведено решение тестовой задачи, с использованием зависимости времени зажигания от величины теплового потока, полученной численным решением системы (2), (3) для модельного непрозрачного К-вещества с кинети-

ческими параметрами: Qz =1.0·10^{20} Дж/(кг·с); E= 166290.2 Дж/моль; порядок реакции m=1; диапазон изменения теплового потока q_s= 20÷500 кВт/(м^{2}К).

Затем данная «экспериментальная зависимость» была обработана с помощью приведенных выше методик. После каждого этапа полученные оценки подставлялись в соответствующие аналитические зависимости расчета времени зажигания. Полученные значения времени зажигания сравнивались с исходными. В таблице приведены значения максимальной $\varepsilon_{макс}$ и средней $\varepsilon_{ср}$ относительных ошибок для этих пар зависимостей.

Из табл.1 видно, что обе методики на всех этапах дали довольно близкие оценки кинетических параметров, но при этом заметно отличающиеся от исходных величин, заложенных в численный расчет, (E – примерно на 7 % меньше; Qz – на порядок). Несмотря на это, качество восстановления зависимости времени зажигания оказалось вполне приемлемым, особенно на базе оценок, полученных с использованием уточняющих методик.

Далее в аналитические расчетные формулы были подставлены исходные значения E и Qz и также были рассчитаны зависимости для времени зажигания. Результаты их применения оказались даже несколько хуже, чем для полученных выше оценок.

И в заключение, были выполнены серии численных расчетов с подстановкой наиболее точных оценок E и Qz, полученных в квазистационарной и адиабатической методиках. Их результаты, показанные в табл. 1, демонстрируют тот же порядок точности, что и в предыдущем случае.

Таблица 2

Оценки кинетических данных	E, Дж/моль	Qz, Дж/(кг·с)	$\varepsilon_{макс}$, %	$\varepsilon_{ср}$, %
Квазистационарная теория				
Начальное прибл. при β=0 - (10), (11)	79020	8,378·10^{13}	46,3	17,8
Уточнение при β=0 – (9), (11)	82578	1,848·10^{14}	44,0	17,1
Уточнение β>0, 2-я итерация – (9), (11)	85480	3,513·10^{14}	42,3	16,7
Уточнение по формулам (14), (15)	80412	1.431·10^{14}	39,0	16,0
Адиабатическая теория				
Первое приближение при β=0 – (23), (24)	79291	1.101·10^{13}	70,8	29,7
Коррекция (1 вариант при β=0) – (25), (26)	79061	7,66·10^{13}	39,8	16,0
Коррекция (2 вариант при β>0 – (28), (29)	80172	1,278·10^{14}	45,1	17,5
Подстановка литературных данных [2]				
Квазистационарная теория – (9), (8)	174171	1,976·10^{23}	45,7	19,1
Адиабатическая теория – (20), (27)	174171	1,976·10^{23}	46,4	19,5

Пироксилин +1 % сажи, [2]

Оценка эффективности методик решения обратной задачи при обработке экспериментальных данных. На следующем этапе производилось сравнение эффективности рассматриваемых методик применительно к экспериментальным данным для гомогенных К-веществ (пироксилин, порох Н), заимствованным из литературных источников.

***Пироксилин +1 % сажи,* [2].** Как видно из табл.2, здесь максимальные ошибки расчета времени зажигания намного больше средних ошибок за счет заметного разброса экспериментальных данных. При этом квзистационарная и адиабатическая методики дают примерно одинаковые оценки энергии активации, которые очень сильно отличаются от литературных значений, т.е. оценки E отличаются более, чем в 2 раза, а Qz – на 9 порядков. Однако качество полученных результатов при расчете времени зажигания вполне сопоставимо; как на собственных оценках, так и на литературных данных, уровень ошибок примерно одинаков.

***Порох Н + 1 % сажи,* [3].** Здесь квазистационарная и адиабатическая методики снова дают близкие значения (табл. 3). При этом полученные оценки не очень сильно отличаются от литературных данных, т.е. оценки *E* отличаются на 4–5 %, а *Q*z – в 4–5 раз. Но при этом, рассчитанные по литературным данным времена зажигания, оказываются стабильно меньше исходных на ~30 %. Качество расчета по собственным оценкам хорошее.

Таблица 3

Порох Н + 1 % сажи, [3]

Оценки кинетических данных	E, Дж/моль	Qz, Дж/(кг·с)	$\varepsilon_{макс}$ %	$\varepsilon_{ср}$, %
Квазистационарная теория				
Начальное прибл. при β=0 – (10), (11)	143049	$8{,}759\cdot10^{18}$	7,8	2,7
Уточнение при β=0 – (9), (11)	143680	$1{,}037\cdot10^{19}$	7,3	2,5
Уточнение β>0, вторая итерация – (9), (11)	144236	$1{,}202\cdot10^{19}$	7,0	2,3
Уточнение по формулам (14), (15)	144259	$1{,}447\cdot10^{19}$	5,2	2,1
Адиабатическая теория				
1 приближение при β=0 – (23), (24)	143076	$1{,}907\cdot10^{18}$	19,4	13,8
Коррекция (1 вариант при β=0) – (25), (26)	143273	$8{,}125\cdot10^{18}$	5,1	2,0
Коррекция (2 вариант при β>0 – (28), (29)	143874	$1{,}08\cdot10^{19}$	5,2	2,1
Подстановка литературных данных, [3]				
Квазистационарная теория – (9), (8)	138164	$5{,}024\cdot10^{19}$	32,5	30,3
Адиабатическая теория – (20), (27)	138164	$5{,}024\cdot10^{19}$	34,1	32,0

Выводы. Полученные результаты подтверждают работоспособность квазистационарных и адиабатических методов теории зажигания. Предлагаемые методы уточнения оценок позволяют заметно улучшить качество конечных результатов.

Библиографический список

1. Вилюнов, В.Н. Теория зажигания конденсированных веществ / В.Н. Вилюнов. – Новосибирск: Наука, 1984. – 190 с.

2. Вилюнов, В.Н. Воспламенение пироксилина световым потоком высокой интенсивности / В.Н. Вилюнов, В.Т.Кузнецов, А.И Скорик // Горение и взрыв. – М.: Наука, 1977. – С. 278–281.

3. Михеев, В.Ф. Зажигание баллиститного пороха световым излучением / В.Ф. Михеев, А.А. Ковальский, С.С. Хлевной // ФГВ. – 1968. – Т. 4, № 1. – С. 3–9.

К содержанию

УДК 532.529.5

ГИПЕРБОЛИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В МЕХАНИКЕ ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕД

В.С. Суров

В рамках многоскоростной модели гетерогенной среды с газодинамическим ядром численно исследована динамика акустических латентных волн в воздушном тумане.

Ключевые слова: многоскоростная многокомпонентная среда, гиперболические системы уравнений, латентные волны, численное моделирование.

В гетерогенных средах помимо известных из однофазной газодинамики волн вида ударных (сжатия), в которых уровень давления растет, разрежения, в которых давление, напротив, уменьшается, существуют так называемые латентные волны, характеризуемые измененными значениями объемных долей отдельных компонентов в смеси и их локальных скоростей при неизменном профиле давления. Отслеживать латентные волны затруднительно, поскольку гетерогенные среды могут быть оптически непрозрачными, а традиционным способом, – по изменению давления, – зафиксировать их невозможно. При падении латентной волны на упругую преграду, например, в запыленном газе деформация преграды происходит за счет передачи аккумулированного в волне количества движения, связанного с дисперсной фракцией. Очевидно, что динамическое действие латентной волны на преграду зависит от ее ориентации по отношению к потоку в волне и это принципиально отличает ее от газодинамической волны.

Эффективным инструментом исследования латентных волн является компьютерное моделирование. В настоящей работе численно исследуется динамика «коротких» латентных волн в газожидкостной смеси при их

взаимодействии с жесткими преградами, а также друг с другом. Моделирование проводилось в рамках гиперболической модели с газодинамическим ядром из [1]. В этой модели введено в рассмотрение такое состояние среды как смесь в целом, характеризуемое осредненными значениями величин, уравнения для которых совпадают с газодинамическими. К этим соотношениям добавляются уравнения, выражающие законы сохранения, но только для тех компонентов смеси, в которых локальные скорости перемещения возмущений не превышают скорость движения волны в смеси в целом. При этом считалось, что остальные волны поглощаются средой, формируя волну в смеси в целом. Давление полагалось общим для всех фракций смеси. Для газожидкостных смесей модель с газодинамическим ядром удовлетворительно описывает волновые процессы, наблюдаемые в экспериментах (см. [2]).

Существование латентных волн подтверждается, например, опытами Тиндаля [3], а также наблюдениями автора статьи. В этих опытах отмечалось появление «эха» при распространении звукового сигнала в тумане, что связано с расщеплением исходного импульса на «быстрый» и «медленный». Последний представляет собой латентную волну с измененным уровнем концентрации дисперсной фракции в смеси. Отметим также, что если для воспроизведения опытов Тиндаля вместо модели из [1] привлечь другие модели, то получим результаты, противоречащие эксперименту. Так в случае применения модели Baer'a–Nunziato [4] или Saurel'a–Abgrall'a [5], скорости «расщепленной» волны оказываются равными 340 и 1500 м/с, что существенно выше экспериментальных значений. Аналогичные результаты получаются при использовании модели В.Ф. Куропатенко [6], а также модели из работы [7]. Заметим, что впервые эффект расщепления импульса в многокомпонентных средах на волны, распространяющиеся с различными скоростями, был теоретически предсказан в работе [8].

Модель среды и результаты численного эксперимента. В работе использовалась модель *n*-компонентной гетерогенной среды с газодинамическим ядром из [1], уравнения которой для бинарной смеси, состоящей из идеального газа с показателем адиабаты γ и несжимаемой фракции, принимают вид:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+u\frac{\partial\rho}{\partial x}+\rho\frac{\partial u}{\partial x}=0,\quad \frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x}=0,$$

$$\frac{\partial p}{\partial t}+u\frac{\partial p}{\partial x}-c^2\left(\frac{\partial\rho}{\partial t}+u\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)=0, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial\alpha_s}{\partial t}+u_s\frac{\partial\alpha_s}{\partial x}+\alpha_s\frac{\partial u_s}{\partial x}=0,\quad \frac{\partial u_s}{\partial t}+u_s\frac{\partial u_s}{\partial x}+\frac{c_s^2}{\alpha_s}\frac{\partial\alpha_s}{\partial x}+\frac{1}{\rho_s}\frac{\partial p}{\partial x}=\frac{\lambda_s(u-u_s)}{\alpha_s\rho_s},$$

где p – давление, t – время, u – скорость смеси, x – пространственная переменная, α_s – объемная доля дисперсной фракции в смеси, λ_s – коэффициент сопротивления, u_s – скорость дисперсной фракции, $\rho = \alpha_s \rho_s + (1-\alpha_s)\rho_g^0$ – плотность смеси, ρ_s – плотность несжимаемой компоненты.

Газодинамическая скорость звука и скорость перемещения латентной волны определяются в соответствии с формулами (см. [1]):

$$c = \sqrt{\frac{\gamma\, p}{(1-\alpha_s)\rho}}, \quad c_s = \sqrt{\frac{p}{\rho_s}}. \tag{2}$$

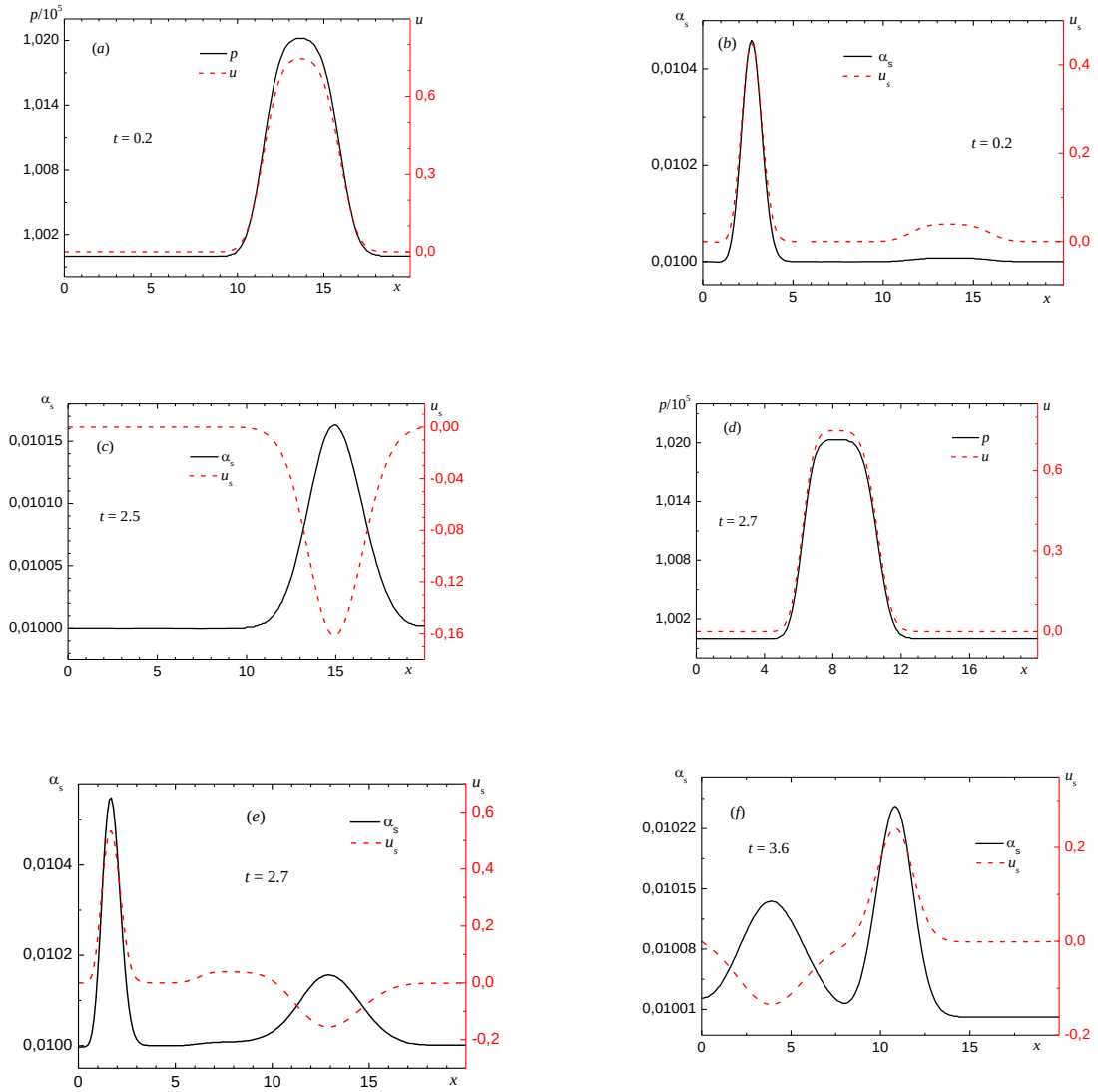


Рис. 1. Эволюция газодинамических и латентных волн, генерируемых левой подвижной стенкой при $\lambda_s = 0$ в моменты времени t = 0,3, 2,5, 2,7 и 3,6 с (*a*–*f*)

Наглядную картину динамики латентных волн дают расчеты для коротких импульсов. Для численного интегрирования (1) применялся узловой

метод характеристик (УМХ), описание которого имеется в [9]. С использованием УМХ рассчитана задача о распространении «короткого» акустического импульса давления по смеси, генерируемого смещающейся с постоянной скоростью до момента времени T левой непроницаемой для смеси границы:

$$x_0(t) = \begin{cases} At, & если \quad t \le T, \\ AT, & если \quad t > T, \end{cases} \tag{3}$$

где A = 0,05 м, T = 0,084 с. Плотность жидкой фракции ρ_s = 1000 кг/м^3, показатель адиабаты газа $\gamma = 1{,}4$, его плотность в невозмущенном состоянии $\rho^0_{g(0)} = 1{,}19$ кг/м^3. Коэффициент сопротивления λ_s принимался равным нулю и 10 кг/(м^3 с). Параметры невозмущенной смеси следующие: $p_{(0)} = 0{,}1$ МПа, $u_{(0)} = u_{s(0)} = 0$, $\alpha_{s(0)} = 0{,}05$. В расчетах использовалась равномерная сетка с шагом Δx = 0,1 м.

На рис. 1*a–f* представлены результаты вычислений, полученные к моментам времени t = 0,3, 2,5, 2,7 и 3,6 с при λ_s = 0. На правой границе расчетной области ставилось «мягкое» граничное условие свободного истечения, поэтому газодинамический импульс повышенного давления, перемещающийся со скоростью рассчитываемой по первой формуле (2), беспрепятственно выходит за пределы расчетной области. Момент выхода этой волны приведен на рис. 1*a–b*. Латентная волна, движущаяся с более низкой скоростью, определяемой второй формулой (2), трансформируется в треугольного вида импульс (рис. 1*b*). При подходе латентной волны к правой границе, граничное условие на которой было изменено на тип «непроницаемая» стенка, поэтому по ее достижению импульс отражается, что видно из рис. 1*c*. В момент времени t = 2,5 с левая граница вновь приводилась в движение по закону (3). Характеристики сформировавшихся газодинамической и латентной волн к моменту t = 2,7 с представлены на рис. 1*d–e*. Как и ранее, газодинамическая волна «выпускалась» за пределы расчетной области путем смены типа граничного условия на правой границе. В дальнейшем происходит взаимодействие двух латентных волн друг с другом, заключительная фаза которого к моменту t = 3,6 с приведена на рис. 1*f*, когда эти две волны расходятся в противоположных направлениях.

На рис. 2*a–d* представлены результаты вычислений, полученные к моментам времени t = 0,3, 1,6 и 2,5 с при λ_s = 10 кг/(м^3 с). Параметры среды те же, что и в первой задаче. Как и ранее импульс генерировался приведением в движение по закону (3) левой непроницаемой для смеси границы (рис. 2*a–c*). Граничное условие на правой границе, как и ранее, моделировало условие свободного истечения, но после выхода газодинамической волны за пределы расчетной области заменялось на «жесткую» стенку, так что латентная волна отражалась этой границы (рис. 2*d*). Из рис. 2*a–d* видно, при учете сил сопротивления латентный импульс становится асиммет-

ричным. Кроме того, из данных на рис. 1–2 следует, что латентная волна с течением времени «размывается» – ее нижнее основание увеличивается, амплитуда же, напротив, уменьшается но все это происходит на фоне неизменного профиля давления.

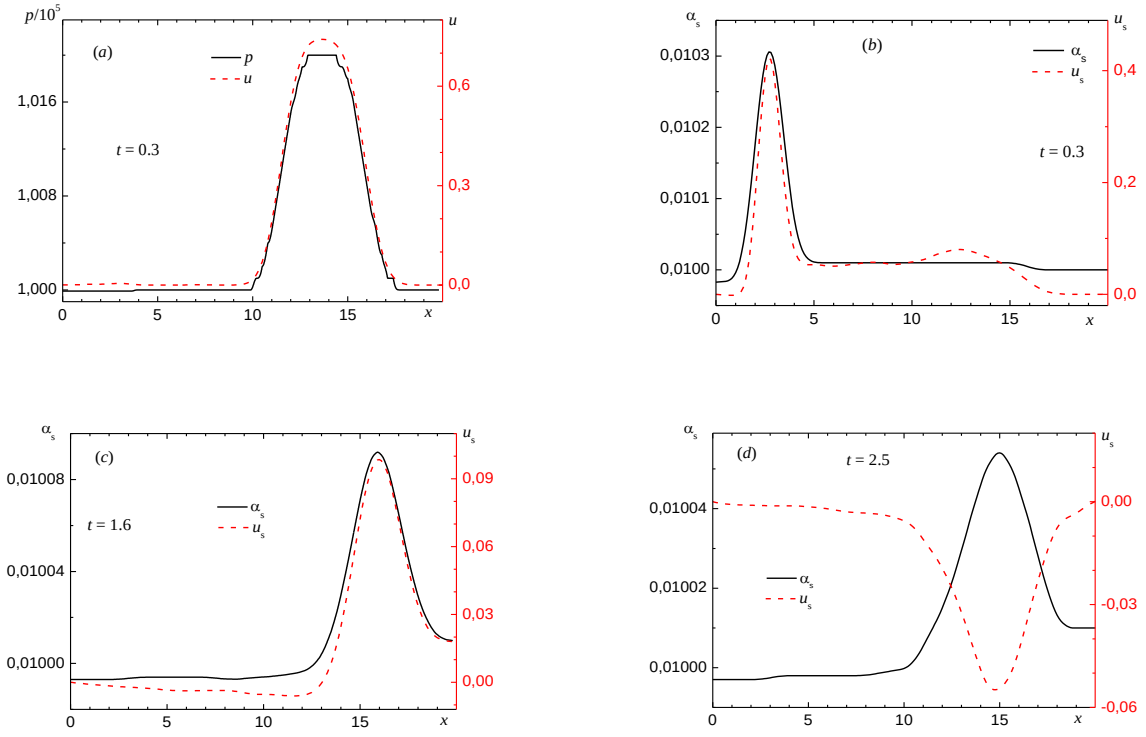


Рис. 2. Эволюция газодинамического и латентного скачка, генерируемых левой подвижной стенкой при λ_s = 10 кг/(м^3 с) к моментам времени t = 0,3, 1,6 и 2.5 с (*a–d*)

Заключение. В рамках многоскоростной модели гетерогенной среды с газодинамическим ядром численно исследована динамика латентных волн в газожидкостной смеси – их отражение от твердых границ, взаимодействие друг с другом. Показано, что расщепление звукового сигнала на газодинамический и латентный импульс объясняет возникновение «эха» в туманных средах, наблюдаемое в экспериментах Тиндаля.

Библиографический список

1. Суров, В.С. Гиперболическая модель многоскоростной гетерогенной среды / В.С. Суров // Инженерно-физический журн. – 2012. – Т. 85. – № 3. – С. 495–502.

2. Суров, В.С. Гиперболические модели в механике гетерогенных сред / В.С. Суров // Журн. Вычисл. Математ. и Матем. Физики. – 2014. – Т. 54. – № 1. – С. 139–149.

3. Стрэтт, Дж.В. Теория звука. Т. 2. / Дж.В. Стрэтт (Лорд Рэлей). – Москва: ГИТТЛ. – 1944.

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. – Pp. 861–889.

5. Zein, A. Modeling phase transition for compressible two-phase flows applied to metastable liquids / A. Zein, M. Hantke, G. Warnecke // J. Comput. Phys. – 2010. – V. 229. – Pp. 2964–2998.

6. Куропатенко, В.Ф. Модель многокомпонентной среды / В.Ф. Куропатенко // Докл. РАН. – 2005. – Т. 403. – № 6. – С. 761–763.

7. Yeom, G.-S. A modified HLLC-type Riemann solver for the compressible six-equation two-fluid model / G.-S. Yeom, K.-S. Chang // Computers & Fluids. – 2013. – V. 76. – Pp. 86–104.

8. Клейман, Я.З. О распространении волн слабого разрыва в многокомпонентной среде / Я.З. Клейман // Акуст. журн. – 1958. – Т. 4. – № 3. – С. 253–262.

9. Суров, В.С. Узловой метод характеристик для расчета течений многоскоростной гетерогенной среды / В.С. Суров // Инженерно-физический журн. – 2013. – Т. 86. – № 5. – С. 1088–1096.

К содержанию

УДК 004.439

РАЗРАБОТКА ЯЗЫКА РАЗМЕТКИ

А.К. Демидов

Предлагается язык разметки, обеспечивающий основные возможности форматирования и взаимодействие с CSS и JavaScript.

Ключевые слова: язык разметки.

Языки разметки. Информация, вводимая пользователем в CMS или на форуме, кроме текстовой части, может включать элементы форматирования (текст выделен жирным или мелким шрифтом), логическую структуру (текст является заголовком или элементом списка) и связи с другой информацией (фото или ссылка на другой сайт). Единственным способом внедрения этой информации во вводимый текст является язык разметки – набор символов или последовательностей, вставляемых в текст для передачи информации о его формате или строении. Язык разметки не определяет способ визуального отображения документа, что позволяет менять его отображение в зависимости от конкретного устройства вывода (монитор компьютера, мобильный телефон или принтер).

Несмотря на стремление разработчиков языков разметки упростить работу по добавлению разметки в текст, все языки требуют от пользователя запоминания необходимых синтаксических конструкций, ключевых слов и последовательностей. Однако при создании сложных документов могут потребоваться десятки различных элементов языка разметки и любые ошибки в использовании синтаксических конструкций или неправильная вложенность тегов могут привести некорректному форматированию текста. Чтобы пользователю не приходилось запоминать все ключевые слова и конструкции, на многих сайтах используют специальный редактор, позволяющий выделить часть текста и указать нужный вид форматирования этой части текста с помощью панели инструментов – все необходимые элементы языка разметки будут добавлены в текст и обеспечена их правильная вложенность. Главным недостатком такого редактора является то, что результат форматирования можно увидеть или только по специальному запросу на предпросмотр или после сохранения изменений на сайте. Для пользователя предпочтительнее использование WYSIWYG-редакторов, позволяющих изменять разметку, манипулируя визуальным отображением документа. Подобные редакторы существуют для HTML-разметки, но могут быть реализованы для других языков разметки. Если в тексте присутствуют элементы, форматирование которых производится автоматически (например, листинги с нумерацией строк, подсветка синтаксиса в программе, математические формулы), то для изменения таких элементов в WYSIWYG-редакторе должны быть предусмотрены специализированные мини-редакторы, на лету изменяющие форматирование элемента в соответствии с введенной информацией. Аналогичные проблемы возникают при использовании виджетов JQuery, формируемым на основе стандартных HTML-элементов. Редактор может быть использован для непосредственного ввода информации на сайте. Если же информация загружается из внешних источников, то при подготовке этой информации для загрузки снова возникает проблема её редактирования. При ориентировании только на WYSIWYG в каждое приложение, в котором будет готовиться информация, потребуется добавить инструменты для её редактирования и просмотра. Использование языков разметки минимизирует затраты на разработку приложений, но усложняет работу пользователям. Уровень знаний и квалификация пользователей должны быть тем выше, чем сложнее язык разметки и чем больше в нём правил и ограничений. Выделяют следующие основные разновидности языков разметки.

HTML (XML). Наиболее часто используемый язык, так как является стандартным для web-документов. Существует множество программ для WYSIWYG редактирования. Текстовые редакторы и офисные приложения могут экспортировать документы в этот формат, хотя при этом часто получается излишне перегруженный тегами и атрибутами документ. Прямое редактирование осложняется как наличием многочисленных тегов (более 100), требующих при использовании определенного порядка и вложенно-

сти, так и большой чувствительностью результата отображения к ошибкам разметки, которые трудно обнаруживать. При использовании языка HTML для загрузки информации необходима проверка текста на корректность (ошибка может привести к искажению отображения не только этой информации, но и всей страницы) и безопасности (внедрение в текст JavaScript дает возможность получить доступ к привилегиям и данным других пользователей, в т.ч. администратора). Основой для HTML является язык XML, поэтому все рассмотренные проблемы относятся к XML и к другим основанным на XML языкам разметки (DocBook, TEI, MathML и т.п.). Примером документа является:

<h1>Заголовок</h1>
Выделение текста курсивом и жирным
Ссылка

BB-коды. Были придуманы с целью предоставить более простой, безопасный и ограниченный по сравнению с HTML способ форматирования сообщений. BB-коды были созданы на основе HTML-тегов путем замены <> на [], и имеют те же ограничения по по применению, что и соответствующие HTML-теги. Преобразование текста в HTML производится специальной программой, проверяющей корректность использования тегов. Неверные теги и теги, для которых не нашлось соответствия, не преобразуются, и это упрощает поиск ошибок. Меньшее количество тегов (обычно не более 10–20) снижает требования к знаниям пользователя, но сужает возможности по форматированию информации. Также среди тегов отсутствуют теги для выделения логической структуры текста (например, нет тегов для заголовков). Близость к HTML позволяет использовать WYSIWYG-редактор, который после редактирования преобразует HTML-текст в текст с использованием BB-кодов. Чаще всего BB-коды используются на форумах, но зачастую каждый движок форума использует свой набор тегов. Наиболее распространены только 10 тегов. Примером документа является:

[center][size=5]Заголовок[/size][/center]
Выделение текста [i]курсивом[/i] и [b]жирным[/b]
[url=http://link.to/info.html]Ссылка[/url]

HAML в первую очередь используется как язык для описания шаблонов страниц, но может рассматриваться и как язык разметки полностью эквивалентный HTML/XML. Но наглядность структуры документа за счет обязательных отступов, отсутствие закрывающихся тегов значительно уменьшает вероятность ошибки по сравнению с HTML. Все теги HTML полностью доступны в HAML, но WYSYWYG-редакторов при этом не существует, поэтому работа с документами требует высокой квалификации пользователей. Примерами документа являются:

%h1 Заголовок %p Выделение текста %i курсивом	%strong жирным %a{:href=>"http://link.to/info.html"} Ссылка

TeX (LaTeX) используются в основном для форматирования научных статей, включают в себя специальные средства для выделения структуры документов, математических тестов, создания оглавлений и индексов. Сложность языка и требования к квалификации пользователя выше, чем у языка HTML. Аналогичный синтаксис имеет язык разметки Texinfo, используемый для генерации документов в проекте GNU (изменены названия тегов и вместо символа \ используется символ @). На научных форумах часто имеется возможность вставлять формулы в формате TeX, а для форматирования остальной части текста используются BB-коды или Wiki-разметка. Примером документа является:

\section{Заголовок}

Выделение текста \empf{курсивом} и \textbf{жирным}

\href{http://link.to/info.html}{Ссылка}

Wiki-разметка и др. При разработке языков Wiki-разметки, Texile, MarkDown, reStructuredText их авторы ставили цель упростить форматирование текста, повысить наглядность, некоторым образом приблизить к WYSIWYG без применения графических редакторов. Wiki-разметка, предложенная авторами MediaWiki и используемая, например, в Википедии, покрывает лишь небольшую часть необходимого форматирования текста, а для остальных элементов форматирования предлагается либо напрямую использовать теги HTML, либо вводятся HTML-подобные теги. Это можно рассматривать как неудачу в поставленной цели. Упущения в элементах форматирования породили большое количество несовместимых между собой вариантов языков Wiki-разметки, созданных для конкретных движков сайтов. В 2006–2008 годах была сделана попытка выработать стандарт для Wiki-разметки [1], который повысил наглядность языка разметки, но некоторые важные виды форматирования документов также были упущены. Кроме недостаточных возможностей, можно отметить необоснованные ограничения по использованию некоторых элементов форматирования внутри заголовков или ссылок и по строгой вложенности элементов, заимствованные из HTML. Язык Textile имеет те же проблемы, что и Wiki-разметка, хотя для расширенного форматирования абзацев и заголовков можно не прибегать к HTML. Наиболее близкий к результату отображения имеет документ с разметкой reStructuredText, а также его упрощенной разновидности MarkDown, но это достигается за счет большей работы пользователя (особенно при создании таблиц). Возможности форматирования при этом немногим больше чем в Wiki-разметке, в которой этот недостаток компенсируется использованием HTML. Примером документа является:

= Заголовок =
Выделение текста "курсивом" и '''жирным'''
[http://link.to/info.html Ссылка]

Требования, предъявляемые к языку разметки. Для создания сайтов с возможностью размещения новостей, статей, учебных материалов, тестов, с поддержкой форума или комментирования необходимы следующие элементы форматирования:

– определение логической структуры документа: заголовки разделов и подразделов, оглавление, блоки с дополнительной информацией;

– информационные единицы: абзацы текста, списки, таблицы, рисунки, пояснения, сноски, исходные тексты программ, формулы, цитаты;

– отступы и выравнивание для абзацев и таблиц;

– связи с другими данными: внешние ссылки, внутренние ссылки и якоря;

– выделение текста: курсивный и жирный шрифт, подчеркивание, вычеркивание, цвет и размер шрифта;

– разделители: горизонтальная линия, разрывы строк, страниц.

Для обеспечения взаимодействия с CSS и JavaScript необходимо иметь возможность указать класс и идентификатор элемента. Для ввода спецсимволов и смайлов можно использовать HTML-коды этих символов (&имя; или &#номер;) или похожие на них последовательности символов, например, `...` `(c)` `:-)`. Ввод элементов форматирования должен занимать минимальное время у пользователя, а внешний вид элементов форматирования – указывать на результат отображения форматированного текста. В этом случае наиболее простым вариантом для тегов форматирования является последовательности из 1, 2 или 3 повторений какого-либо символа. При этом последовательности из трех повторений используются только для определения информационных элементов, а последовательности из двух повторений – внутри информационных элементов. Одиночные символы используют либо когда эти символы практически не встречаются в обычном тексте, либо в начале строки, так как строка обычно начинается со слова, а не со знака пунктуации. Исключение составляют символы `-` `"` `'` `(` `$` и `.` как часть `...` За основу такого языка разметки можно взять Creole и DokuWiki [2].

Синтаксис предлагаемого языка разметки. Информационные элементы, занимающие несколько строк (абзацы, таблицы, списки) и не имеющие специального завершающего тега, разделяют одной или более пустой строкой. В остальных случаях пустая строка необязательна. Открывающие и завершающие теги блочных элементов обязательно должны начинаться с первой позиции, иначе они рассматриваются как обычные символы. Исключение: тег `[[[` в списках и таблицах. Для каждого тега можно указать класс элемента и/или идентификатор, добавив сразу после открывающего тега элемента форматирования #*идентификатор* или `.`*класс*. Идентификатор и

имя класса могут содержать только латинские буквы, цифры, символы _ и − и должны начинаться с буквы. Можно указать несколько классов у одного элемента форматирования, разделяя их символом . (точка).

Логическая структура документа. Заголовки разделов и подразделов начинаются с одного и более символов = в зависимости от уровня подраздела (не более 6). Между тегом и заголовком желательно, но не обязательно ставить пробел. Если в следующей строке указано такое же количество символов =, то строка рассматривается как продолжение заголовка в предыдущей строке. Для каждого подраздела автоматически создается якорь с именем подраздела.

Оглавление помещается в документ с помощью тега @@@. Оглавление создается на основе заголовков подразделов. После тега указывают число от 1 до 6 – ограничение на уровень заголовков, помещаемых в оглавление. Для вставки блока используются теги [[[и]]]. После открывающего тега можно указать ширину блока в пикселах или процентах и размещение блока с помощью символов > (справа) или < (слева) или ! (по центру, без обтекания). По умолчанию ширина блока равна 100 %, а размещение блока идет по центру. Допускается несколько уровней вложенности блоков. Для замечаний к тексту (ответов к задаче, подсказок к решению), выводимых только по запросу, используются тег +++. После отрывающего тега указывается метка, используемая в качестве имени кнопки для раскрытия дополнительной информации. Закрывающий тег не имеет метки.

Информационные единицы. Абзацами считаются последовательности строк, которые оканчиваются пустой строкой или открывающим/закрывающим тегом информационного элемента. В начале абзаца можно указать тег выравнивания текущего абзаца и указать умолчание для выравнивания следующих абзацев. Для задания выравнивания используются символы % (выравнивание влево с сохранением разбиения на строки, заданного пользователем), < (выравнивание влево), < (выравнивание вправо), : (выравнивание по ширине), ! (выравнивание по центру). С помощью двойного повторения тега выравнивания указывается выравнивание для последующих абзацев. По умолчанию с этой же целью применяется тег %. После тегов < и : указывают число от 0 до 9 – отступ для первой строки абзаца в символах. По умолчанию отступ для первой строки равен 0. Между тегом выравнивания и текстом желательно, но не обязательно ставить пробел. При установке умолчания для абзаца указание класса задает класс для следующих абзацев без тега выравнивания, но указание идентификатора относится только к текущему абзацу. Класс и идентификатор для абзаца можно указывать без тега выравнивания. Для списков используется теги * (обычный список) и # (нумерованный список). После тега обязательно должен быть пробел или указание класса и/или идентификатора. Количество про-

белов перед тегом определяет уровень вложенности списков, при этом учитывается относительное количество пробелов, а не абсолютное. На одном уровне должны быть одинаковые теги. Текст одного элемента списка может занимать несколько строк, текст выравнивается влево, а для разделения на строки используется явный тег \\). Для определения таблиц используется тег |. Первая строка таблицы является опциональной и должна начинаться с тега |, после него указывают класс и идентификатор, выравнивание и ширину таблицы в пикселах или процентах, а затем заголовок таблицы. Далее может следовать строка, содержащая ширину столбцов в пикселах или процентах и тег выравнивания (!, <, >) для тех ячеек, где выравнивание не указано явно. По умолчанию к ячейкам применяется выравнивание влево. Далее следуют строки таблицы. Ячейки таблицы разделяются символом |. Количество символов | в строках должно быть одинаковым. Если ячейка должна быть объединена с предыдущей ячейкой в строке, то символы | записываются без пропусков. Для объединения ячеек в нескольких строках в ячейке записывается последовательность символов :::. Заголовки строк и столбцов выделяются тегом =. Для выравнивания содержимого ячейки используются пробелы. Пробелы после текста означают выравнивание влево, пробелы перед тестом – вправо, пробелы до и после текста – по центру. Если пробелов нет, используется выравнивание, указанное в строке описание ширины столбцов. Для цитирования (в том числе на форуме) используется тег """. Автор и источник цитаты может быть указан после открывающегося или после закрывающего тега. Для выделения цитат внутри текста используется тег "". Исходный код может быть добавлен с помощью тега '''. В исходном коде не обрабатываются любые теги и HTML-коды. После открывающего тега можно указать имя языка программирования, если необходимо выделение резервированных слов, и заголовок. Для формул используются теги ` (формула AsciiMath), $$ (строчная формула TeX), $$$ (блочная формула TeX). В формулах не обрабатываются любые теги и HTML-коды. Преобразование формул происходит на стороне клиента с помощью MathJax. С помощью тега ++ можно добавить сноску. При этом сначала указывается имя сноски, а после символа | – сама сноска. При повторном использовании сноски достаточно указать её имя. Для определения ссылок используются теги [[и]]. Между тегами сначала указывается ссылка, а после символа | – текст. Если текст не указывается, то в качестве текста используется ссылка. Внешние ссылки обязательно должны начинаться с названия протокола, например, http://. Внутристраничные ссылки начинаются с символа @. Для создания якоря используется символы @@. Перед ссылкой можно указать её разновидность и символ :. Такая упрощенная ссылка будет преобразована в правильную форму. Внешние ссылки, не

имеющие текста, можно не заключать в скобки, они будут распознаны автоматически в тексте по протоколу. Для вставки картинок используется теги `{{` и `}}`. Между тегами сначала указывается ссылка на картинку, а после символа `|` – альтернативный текст для картинки. После открывающего тега можно указать выравнивание картинки (`!`, <, >) и размеры картинки в пикселах или процентах, разделяя их символом `x`. Если символ `x` не указан, единственный размер интерпретируется как ширина картинки. По умолчанию картинка вставляется в строку, без обтекания. Указывается только один из размеров.

Выделение текста. Для выделения текста используются теги `**` (жирный), `//` (курсивный), `--` (вычеркнутый), `__` (подчеркнутый), `''` (равноширинный). Теги действуют как переключатели, первое появление включает режим, второе — выключает. Вложенность тегов не важна. Действие всех тегов завершается в конце абзаца, списка или таблицы. Для изменения размера, цвета или гарнитуры шрифта используются теги `((` и `))`. После тега `((` можно написать класс и/или идентификатор. Далее можно указать имя гарнитуры, имя или номер цвета, размер шрифта в точках, процентах или с помощью имени (xxs, xs, s, m, l, xl, xxl). Теги `((` и `))` можно использовать как для постоянного переключения, так и для временного. В случае временного переключения после параметров указывается символ `|`, после него указывается выделяемый текст. Равноширинный текст используется автоматически для одиночных символов и HTML-кодов в апострофах.

Разделители и отступы. Для разделения текста горизонтальной линией используется тег `---`, после него можно указать класс, идентификатор, выравнивание и ширину линии. Для принудительного разделения текста на страницы используется тег `\\\`. Тег `:::` применяют для установки отступа слева. После него указывают отступ в символах. По умолчанию отступ устанавливается равным 0.

Прочие теги. Для внутренних комментариев в тексте используются теги `{{{` и `}}}`. Пользователь, имеющий соответствующие права, может использовать эти теги для определения JavaScript и CSS. Экранирующий символ ~ используется в том случае, когда тег включен в обычную последовательность символов. Для вывода самого символа ~ используется последовательность символов `~~`. Для определения неразрывных пробелов нужно указать символ ~ перед пробелом. Пример документа:

= Заголовок

Выделение текста //курсивом// и **жирным**

[[http://link.to/info.html|Ссылка]]

Реализация обработчика языка разметки. При преобразовании текста с использованием разметки для просмотра в браузере необходимо сначала найти все теги и последовательности, разделяющие абзацы в этом

тексте, а затем выполнить их замену на некоторые последовательности HTML-тегов, зависящие от предыдущих обработанных тегов. Как показано в [3], использование регулярных выражений для поиска тегов в тексте, доступные во всех современных языках программирования, приводит к экспоненциальному росту времени обработки для сложных регулярных выражений. Это связано с тем, что практически все реализации регулярных выражений используют бэктрекинг вместо недетермированных конечных автоматов. Наиболее эффективным вариантом с точки зрения производительности для создания обработчика языка разметки является использование генераторов лексических анализаторов (Flex для C/C+, JLex для Java, PHPLex для PHP), которые по набору правил создают конечный автомат. Дополнительная информация по разработке предлагаемого языка разметки содержится в [4].

Библиографический список

1. Creole 1.0. A common wiki markup. – URL: http://www.wikicreole.org/.
2. URL: http://www.dokuwiki.org/wiki:syntax.
3. Cox, R. Regular Expression Matching Can Be Simple And Fast. – URL: http://swtch.com/~rsc/regexp/regexp1.html.
4. URL: http://ipc.susu.ac.ru/24719.html.

К содержанию

УДК 681.51.011+519.87

УПРАВЛЕНИЕ МАНИПУЛЯЦИОННЫМИ МЕХАНИЗМАМИ ПРИ СУЩЕСТВЕННОМ ВЛИЯНИИ ВОЗМУЩАЮЩИХ МОМЕНТОВ

А.А. Брагина

Разработан алгоритм управления движением манипуляционного робота (МР) при существенном влиянии возмущающих моментов. Синтез закона управления, обеспечивающего асимптотически устойчивое движение рабочего органа в точку программной траектории, проведен методом функций Ляпунова на основе полной нелинейной математической модели манипулятора сэлектроприводами, полученной в форме уравнений Лагранжа-Максвелла.

Ключевые слова: нелинейная динамическая модель, синтез управлений, функции Ляпунова.

В робототехнике при управлении роботом-манипулятором возможны воздействия различных внешних возмущений как в зоне его рабочего органа, так и вне ее, что особенно важно учитывать при работе в экстремальных средах.

К основным причинам ухудшения качества управления роботом относятся непредсказуемые изменения моментов нагрузки на выходных валах приводов, воздействие сил вязкого и сухого трения, усиление дестабилизирующего взаимовлияния подсистем. Так как не представляется возможным построение точной математической модели внешних возмущений, используются способы их оценки, реализуемые с помощью различных вычислительных устройств и датчиков косвенных переменных, называемых наблюдателями силы [3–4]. Они осуществляют вычисление величины внешних возмущений по математической модели манипулятора и информации о положениях и скоростях его степеней подвижности. На вход модели подаются значения составляющих вектора координат и управляющие воздействия на приводы. В результате решения задачи динамики выдается оценка силы взаимодействия манипулятора с внешней средой. Одним из типов наблюдателей являются устройства, использующие полную математическую модель манипулятора вместе с системой приводов.

В работе прямым методом Ляпунова решена задача движения МР из произвольной точки $x_0 \in X_0 \subset R^n$ в точку программной траектории x°. Полная нелинейная модель динамики получена для трехзвенного МР с электроприводами, с распределенными массами звеньев, рабочим органом которого является тело вращения, представляющее собой шлифовальный круг. Обобщенные координаты манипулятора η_λ, η_μ λ, μ =1,2,3 определяются углами поворота его звеньев. Обобщенными координатами электроприводов являются заряды $q_{a\lambda}$, $q_{b\lambda}$, λ=1,2,3, протекающие через поперечные сечения обмоток якоря и возбуждения соответствующих электродвигателей. Модель динамики МР с рабочим органом построена в форме уравнений Лагранжа-Максвелла [1–2]^

$$\begin{cases} \left(L_{a\lambda\mu} - L_b^{\upsilon\gamma} M_{\gamma\lambda} M_{\upsilon\mu}\right)\dot{I}_{a\mu} + L_b^{\nu\gamma}\left(n_\gamma - 2M_{\gamma\mu} I_{a\mu}\right)\dfrac{\partial M_{\nu\lambda}}{\partial \eta_\beta}\dot{\eta}_\beta = \\ = -R_{\lambda\mu} I_{a\mu} + U_\lambda^\circ \\ \vartheta_{\lambda\mu}\ddot{\eta}_\mu + \theta_{\lambda,\mu\nu}\dot{\eta}_\mu\dot{\eta}_\nu + L_b^{\nu\gamma}(n_\gamma - M_{\gamma\mu} I_{a\mu})\dfrac{\partial M_{\nu\beta}}{\partial \eta_\lambda} I_{a\beta} + \\ +p(\dfrac{\partial \psi_\lambda}{\partial \eta_\mu} - \dfrac{\partial \psi_\mu}{\partial \eta_\lambda})\dot{\eta}_\mu = -B_{\lambda\mu}\dot{\eta}_\mu - \dfrac{\partial W_p(\eta)}{\partial \eta_\lambda} - M_\lambda^{\text{ñò}} - M_\lambda^{\text{ð}} - M_\lambda^{\text{ñë}} \end{cases} \quad (1)$$

λ, μ, ν =1,2,3,

с учетом возмущающих моментов: $M_\lambda^{\text{ñò}}$ – момента сухого трения в элементах механической передачи, $M_\lambda^{\text{ð}}$ – момента, действующего на подающее

рабочий орган звено, $M_{\lambda}^{\text{ñë}}$ – момента, обусловленного силовыми воздействиями случайного характера.

Здесь $\vartheta_{\lambda\mu}$ – тензор инерции манипулятора, $I_{a\lambda} = \dot{q}_{a\lambda}$, $I_{b\lambda} = \dot{q}_{b\lambda}, \dot{\eta}_{\lambda}$ – обобщенные скорости системы, $L_{a\lambda\mu}$, $L_{b\lambda\mu}$ – тензоры индуктивности, $M_{\lambda\mu}$ – тензор взаимной индуктивности обмоток якоря и возбуждения электродвигателей приводов, $I_{a\beta}$ – циклическая скорость, $\theta_{\lambda,\mu\nu}$ – символ Кристоффеля первого рода метрического тензора $\vartheta_{\lambda\mu}$, тензор $L_{b}^{\lambda\mu}$: $L_{b}^{\lambda\mu} L_{b\mu\nu} = \delta_{\nu}^{\lambda}$, δ_{ν}^{λ} – символ Кронекера, n_{γ} – первые интегралы системы, ψ_{λ} – функция, связывающая проекции вектора угловой скорости рабочего органа на оси связанной с ним подвижной системы координат с эйлеровыми углами, p – отнесенный к угловой скорости рабочего органа импульс. Обобщенные силы даются равенствами:

$$N_{\lambda} = -R_{\lambda\mu} I_{a\mu} + U_{\lambda}^{\circ}, \quad M_{\lambda} = -B_{\lambda\mu}\dot{\eta}_{\mu} - \frac{\partial W_{p}}{\partial \eta_{\lambda}}(\eta), \quad \lambda, \mu = 1,2,3,$$

где $R_{\lambda\mu}$, $B_{\lambda\mu}$ – тензоры, определяющие диссипацию электромагнитной и механической энергий системы, соответственно, $W_{p}(\eta)$ – потенциальная энергия манипулятора, $\dfrac{\partial W_{p}(\eta)}{\partial \eta_{\lambda}}$ – потенциальные силы, действующие на степень подвижности с номером λ, U_{λ}° – синтезируемое управление.

Нежелательные силовые явления не удается преодолеть, используя приводы только с линейной обратной связью по выходным переменным подсистем, тем более что коэффициенты усиления регулятора имеют конструктивные ограничения. Эффективное средство компенсации названных возмущающих факторов дают алгоритмы управления сигнального типа с релейной составляющей, обеспечивающие достаточную скорость адаптивных процессов. Поэтому алгоритмы целесообразно использовать для управления объектом при наличии возмущающих факторов с ограниченным диапазоном их изменения при большой скорости. Теоретической основой построения алгоритмов сигнального типа являются методы теории устойчивости и теории систем с переменной структурой.

Построим алгоритм управления методом функций Ляпунова. При синтезе управлений будем полагать, что скорость изменения возмущающего случайного момента $M_{\lambda}^{\text{ñë}}$ достаточно велика, но по величине он ограничен: $\left|M_{\lambda}^{\text{ñë}}\right| \le \bar{M}_{\lambda}$=const. Согласно подходу к синтезу управлений с использовани-

ем алгоритмов сигнального типа управление $U_\lambda = R_{\lambda\mu} I_{a\mu} - \alpha\left(J_\lambda + \delta_\lambda^\mu \frac{\Delta I_{a\mu}}{\rho}\right)$, полученное в [1], должно быть дополнено релейной составляющей $U_\lambda^{\tilde{n}\ddot{i}}$ и реализоваться в виде:

$$U_\lambda^\circ = U_\lambda + U_\lambda^{\tilde{n}\ddot{i}}, \qquad (2)$$

где λ, μ, ν=1,2,3; $U_\lambda \in R^s$, R^s – ограниченное замкнутое множество, выбираемое, исходя их ресурсов управления, ρ, α – положительные постоянные), $\Delta\eta_\lambda$, $\Delta I_{a\lambda}$ – возмущения, введенные как разность между текущими и программными значениями обобщенных координат и скоростей, $J_\lambda = \left(L_{a\lambda\mu} - L_b^{\nu\gamma} M_{\gamma\mu} M_{\nu\lambda}\right) I_{a\mu} - \left(L_{a\lambda\mu} - L_b^{\nu\gamma} M_{\gamma\mu}^\circ M_{\nu\lambda}^\circ\right) I_{a\mu}^\circ + L_b^{\nu\gamma} n_\gamma \frac{\partial M_{\nu\lambda}}{\partial \eta_\beta} \Delta\eta_\beta$ – интеграл возмущенного движения приведенной системы (1).

Построим управление:

$$U_\lambda^{\tilde{n}\ddot{i}} = -k_{\lambda\mu}^{\tilde{n}\ddot{i}} \left|\dot{\eta}_\mu\right| \mathrm{sign}\left\{J_\lambda + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu \Delta I_{a\mu}\right\}, \ \lambda, \mu = 1,2,3, \qquad (3)$$

где $k_{\lambda\mu}^{\tilde{n}\ddot{i}}$ – диагональная матрица, положительные элементы которой выбираются, исходя из ресурсов управления, величин возмущающих моментов и требований, предъявляемых к качеству управления.

Оценим устойчивость движения МР при управлении вида (2). Структуру функции Ляпунова V оставим прежней [1]:

$$V = \frac{1}{2}\vartheta_{\lambda\mu}\dot{\eta}_\lambda\dot{\eta}_\mu + \frac{1}{2}\left(L_{a\lambda\mu} - L_b^{\nu\gamma} M_{\gamma\lambda} M_{\nu\mu}\right)\Delta I_{a\lambda}\Delta I_{a\mu} + W_p(\Delta\eta) + \rho J_\lambda J_\lambda$$

$\lambda, \mu, \nu, \gamma$ =1,2,3.

Производная в силу системы (1) функции Ляпунова с учетом возмущающих моментов примет вид:

$$\dot{V} = -B_{\lambda\mu}\dot{\eta}_\lambda\dot{\eta}_\mu + \rho\left(U_\lambda^\circ - R_{\lambda\mu} I_{a\mu}\right)\left(J_\lambda + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu \Delta I_{a\mu}\right) - p\frac{\partial\psi_\lambda}{\partial\eta_\mu}\dot{\eta}_\mu\dot{\eta}_\lambda +$$
$$+ p\frac{\partial\psi_\mu}{\partial\eta_\lambda}\dot{\eta}_\lambda\dot{\eta}_\mu - k_{\lambda\mu}^{\tilde{n}\grave{o}}\dot{\eta}_\lambda \mathrm{sign}\left\{\dot{\eta}_\mu\right\} - M_\lambda^{\eth}\dot{\eta}_\lambda - M_\lambda^{\tilde{n}\ddot{e}}\dot{\eta}_\lambda, \qquad (4)$$

λ, μ, ν =1,2,3.

Подставив в (4) U_λ°, с учетом (3) и равенства нулю гироскопических слагаемых, получим выражение полной производной функции Ляпунова в силу системы (1):

$$\begin{aligned}\dot{V} = &-B_{\lambda\mu}\dot{\eta}_\lambda\dot{\eta}_\mu - \rho\alpha\left(\left(L_{à\lambda\mu} + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu\right)\Delta I_{a\mu} + I_{â\nu}\frac{\partial M_{\nu\beta}}{\partial\eta_\beta}\Delta\eta_\beta\right)^2 - \\ &-k_{\lambda\mu}^{ñò}\dot{\eta}_\lambda \operatorname{sign}\left\{\dot{\eta}_\mu\right\} - M_\lambda^{ñë}\dot{\eta}_\lambda - k_{\lambda\mu}^{ð}\dot{\eta}_\lambda\dot{\eta}_\mu - \\ &-\rho k_{\lambda\mu}^{ñï}\left|\left(L_{à\lambda\mu} + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu\right)\Delta I_{a\mu} + I_{â\nu}\frac{\partial M_{\nu\beta}}{\partial\eta_\beta}\Delta\eta_\beta\right|\left|\dot{\eta}_\mu\right|,\end{aligned} \tag{5}$$

λ, μ, ν =1,2,3.

В процессе работы при биениях шлифовального круга слагаемое, относящееся к подающему круг звену в выражении ($-M_\lambda^{ñë}\dot{\eta}_\lambda$), отрицательно при наличии контакта с рабочей поверхностью или равно нулю. Так как этот знак не определен для остальных звеньев МР, производная $\dot{V}$ отрицательна при выполнении неравенства:

$$\bar{M}_\lambda \le \rho k_{\lambda\mu}^{ñï}\left|\left(L_{à\lambda\mu} + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu\right)\Delta I_{a\mu} + I_{â\nu}\frac{\partial M_{\nu\beta}}{\partial\eta_\beta}\Delta\eta_\beta\right|,\ \lambda, \mu, \nu = 1,2,3. \tag{6}$$

При врезании рабочего органа скорости $\dot{\eta}_\lambda$ остальных звеньев манипулятора равны нулю или ничтожно малы, и отрицательность $\dot{V}$ гарантируется даже при обращении правой части неравенства (6) в нуль. Так как составляющая $U_\lambda^{ñï}$ (3) не учитывает характера взаимовлияния подсистем МР, которая может быть как стабилизирующей, так и дестабилизирующей, элементы $k_{\lambda\mu}^{ñï}$ следует выбирать, руководствуясь неравенством (6), исходя из условий получения требуемой точности с как можно меньшими их значениями.

Таким образом, в области существования функции Ляпунова V может быть выделено некоторое множество, являющееся предельным множеством исследуемой системы (1), где эта система диссипативна. Элементы множества определяются конкретными данными, полученными от устройства-наблюдателя, допустимыми ошибками по положению всех степеней подвижности манипулятора и параметрами систем управления приводами.

Результаты моделирования показывают, что построенный алгоритм управления обеспечивает величину отклонений составляющих вектора состояния системы от заданных значений в пределах, допустимых для качественной работы МР.

Библиографический список

1. Брагина, А.А. Обратная задача в управлении динамической системой / А.А. Брагина // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 40. – С. 159–163.

2. Ширяев, В.И. Об управлении манипуляционным роботом в условиях неопределенности / В.И. Ширяев, А.А. Брагина // Экстремальная робототехника- робототехника для работы в условиях опасной окружающей среды. Труды 7-го международного симпозиума. – СПб.: Изд-во «Политехника-сервис», 2013. – С.134–141.

3. Alcocer, A. Forceestimation and control in robot manipulators / A. Alcocer, A. Robertsson, A. Valera, R. Johansson // 7th Symposium on robot control (SYROCO"03). – Wroclaw, Poland. – 2003. – Pp. 31–36.

4. Попов, А.В. О способах оценки внешних возмущений при построении системы безопасности управления движением робота-манипулятора / А.В. Попов // Экстремальная робототехника. Сборник докладов международной научно-технической конференции. – СПб.: Изд-во «Политехника-сервис», 2011. – С.129–132.

К содержанию

УДК 621.791.9

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

А.В. Геренштейн, Е.А. Геренштейн

Основной целью работы является совершенствование метода расчета температурных полей в детали под действием поверхностных тепловых источников при условии, что теплофизические коэффициенты суть функции температуры.

Ключевые слова: теплофизические коэффициенты, устойчивость, теплопроводность, температура.

Определение температуры на поверхности и в глубине детали от действия наружного источника теплоты является ответственным этапом при разработке и установлении технологических параметров процессов восстановления деталей машин (наплавки, термообработки), а также при проектировании и изготовлении установок.

В работе [1] было замечено, что «учет зависимости коэффициентов теплофизических свойств металла и теплоотдачи от температуры приводит к линейным дифференциальным уравнениям процесса и к нелинейным граничным условиям, и ведет к невозможности получения расчетных уравнений процесса аналитическими методами». Учитывая вышесказанное и рекомендации по решению подобных задач [1, 2, 3], в настоящей работе задача определения температурного поля решена численным методом, при этом предложена и обоснована явная устойчивая численная схема для уравнения

теплопроводности, основанная на комбинации явной и неявной схемы с использованием линейных дифференциальных уравнений первого порядка.

В технической литературе отмечается, что для расчета температуры при сварке стальных деталей рекомендуется принимать теплофизические коэффициенты соответствующие средней температуре 400–500°, иногда 700–800° [1, 2, 3]. Целью данной работы является оценка таких рекомендаций. Для достижения цели выведены соответствующие расчетные формулы и разработана программа расчета на языке программирования C++ и проведены численные эксперименты.

Для стержня длины L уравнение одномерной теплопроводности с непостоянными коэффициентами записывается в виде [4]:

$$c\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(q\frac{\partial u}{\partial x}\right). \tag{1}$$

Здесь x – продольная координата, отсчитываемая от левого конца, t – время, $u=u(x,t)$ – температура. Будем считать удельную теплоемкость единицы объема c и коэффициент теплопроводности q функциями температуры, т. е. $c=c(u)$ и $q=q(u)$.

Краевые условия на концах стержня выглядят так:

$$-\left(q(u)\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Bigg|_{x=0}=\lambda_l(u(0,t))\big(\theta_l-u(0,t)\big)+Q_l, \tag{2}$$

$$\left(q(u)\frac{\partial u}{\partial x}\right)\Bigg|_{x=L}=\lambda_r(u(0,t))\big(\theta_r-u(0,t)\big)+Q_r, \tag{3}$$

где $\lambda_l(u)$ и $\lambda_r(u)$ – коэффициенты теплоотдачи соответственно на левом и правом конце стержня (известные функции температуры), θ_l и θ_r – температура внешней среды соответственно на левом и правом конце стержня, Q_l и Q_r – мощность теплоисточника, соответственно, на левом и правом конце стержня.

Кроме того, задано распределение температуры на стержне в начальный момент времени $t=0$:

$$u(x,0)=\varphi(x). \tag{4}$$

Записывая вместе уравнение (1), краевые условия (2), (3) и начальное условие (4), получим постановку третьей смешанной задачи одномерной теплопроводности с непостоянными коэффициентами, являющимися функциями температуры:

$$\begin{cases} c(u)\dfrac{\partial u}{\partial t}=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(q(u)\dfrac{\partial u}{\partial x}\right), \quad t>0, 0<x<L, \\ u(x,0)=\varphi(x), \\ -\left(q(u)\dfrac{\partial u}{\partial x}\right)\Bigg|_{x=0}=\lambda_l(u(0,t))\big(\theta_l-u(0,t)\big)+Q_l, \\ \left(q(u)\dfrac{\partial u}{\partial x}\right)\Bigg|_{x=L}=\lambda_r(u(0,t))\big(\theta_r-u(0,t)\big)+Q_r. \end{cases}$$

Введем в рассмотрение [4, 5, 6] функцию $G(u)=\int\limits_0^u q(\xi)d\xi$.

Для функции G получаем вместо (1) уравнение:

$$\frac{\partial G}{\partial t}=a^2(u)\frac{\partial^2 G}{\partial x^2}, \text{ где } a^2(u)=\frac{q(u)}{c(u)}.$$

Для расчета значений функции G можно воспользоваться разностной схемой [4, 7], где отношение приращения значения функции к шагу по времени в узле i заменяется производной по времени:

$$\frac{dG_i(t)}{dt}=a^2(u_i)\frac{G_{i-1}(t)-2G_i(t)+G_{i+1}(t)}{h^2}, \ t\in[0;\tau], \ i=2,\ldots,N-1.$$

Затем уравнение преобразуется к виду:

$$\frac{dG_i(t)}{dt}+\frac{2a^2(u_i)}{h^2}G_i(t)=\frac{a^2(u_i)}{h^2}\big(G_{i-1}(0)+G_{i+1}(0)\big).$$

Расчетная формула для значений функции G во внутренних узлах сетки запишется в виде [4]:

$$G_i(t)=G_i e^{-\frac{2a^2(u_i)}{h^2}t}+\left(1-e^{-\frac{2a^2(u_i)}{h^2}t}\right)\frac{G_{i-1}+G_{i+1}}{2}, \ i=2,\ldots,N-1.$$

Заведем фиктивные узлы с номерами 0 и $N+1$ и подберем значения G_0 и G_{N+1} в этих узлах так, чтобы обеспечить выполнение условий (2)–(3).

Перепишем краевое условие (2) в виде:

$$-\frac{\partial G}{\partial x}\Bigg|_{x=0}=\lambda_l(u(0,t))\big(\theta_l-u(0,t)\big)+Q_l.$$

Обозначим через G^{-1} функцию, обратную к функции G. В силу монотонности последней такая функция существует. Тогда $u(0,t)$ можно записать в виде:

$$u(0,t)=G^{-1}(G(u(0,t)))=G^{-1}(G(0,t))$$

и

$$-\left.\frac{\partial G}{\partial x}\right|_{x=0}=\lambda_l(G^{-1}(G(0,t)))\left(\theta_l-G^{-1}(G(0,t))\right)+Q_l.$$

Аппроксимируя производную $\left.\frac{\partial G}{\partial x}\right|_{x=0}$ разделенной разностью $\left.\frac{\partial G}{\partial x}\right|_{x=0}=\frac{G_1-G_0}{h}$, а значение $G(0,t)$ – полусуммой $G(0,t)=\frac{G_0+G_1}{2}$, получим, что краевое условие (2) запишется в виде:

$$-\frac{2G_1}{h}+\frac{2}{h}\cdot G\left(G^{-1}\left(\frac{G_0+G_1}{2}\right)\right)=\lambda_l\left(G^{-1}\left(\frac{G_0+G_1}{2}\right)\right)\left(\theta_i-G^{-1}\left(\frac{G_0+G_1}{2}\right)\right)+Q_l.$$

Обозначив $z=G^{-1}\left(\frac{G_0+G_1}{2}\right)$, получим уравнение относительно z:

$$\frac{2}{h}\cdot G(z)-\lambda_l(z)(\theta_l-z)=\frac{2G_1}{h}+Q_l.$$

На основе вышеприведенной теории разработано программное обеспечение расчета температурного поля. Ниже приведены исходные (геометрические, технологические и тепловые) параметры процесса для численных экспериментов (постоянные параметры): число элементарных участков (N = 100), шаг по времени (dt = 0,001 сек), длина стержня в метрах (L = 0,02), плотность мощности теплоисточника слева (Q_l = 10000 дж/сек/кв.м).

Библиографический список

1. Рыкалин, Н.Н. Расчеты тепловых процессов при сварке / Н.Н. Рыкалин. – М.: Машгиз, 1951. – 296 с.

2. Вержбицкий, В.М. Основы численных методов / В.М. Вержбицкий. – М.: Высшая школа, 2002. – 847 с.

3. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 616 с.

4. Геренштейн, А.В. Устойчивые явные схемы для уравнения теплопроводности / А.В. Геренштейн, Е.А. Геренштейн, Н. Машрабов // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2008. – Вып. 1. – № 15 (115). – С. 9–11.

5. Геренштейн, А.В. Явная разностная схема решения одномерного квазилинейного уравнения теплопроводности / А.В. Геренштейн, М.З. Хайрисламов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2013. – Т. 5. – № 1. – С. 12–17.

6. Хайрисламов, М.З. Явная схема решения третьей смешанной задачи для квазилинейного уравнения теплопроводности / М.З. Хайрисламов, А.В. Геренштейн // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2013. – Т. 5. – № 2. – С. 174–177.

7. Машрабов Н. Моделирование тепловых полей при наплавке, термической и механической обработке металлов / Н. Машрабов, А.В. Геренштейн, Е.А. Геренштейн // Инжиниринг, инновации, инвестиции: сборник научных трудов / Рос. союз науч. и инженер. обществ. орг., Междунар. акад. авторов науч. открытий и изобретений, Регион. отд-ние; ред. В.В. Ерофеев. – Челябинск, 2013. – С. 41–45.

К содержанию

УДК 517.958: 539.374: 621.791

АНАЛИЗ РАСПОЛОЖЕНИЯ ЛИНИЙ РАЗРЫВА НАПРЯЖЕНИЙ В ДИСКРЕТНО НЕОДНОРОДНОЙ РАСТЯГИВАЕМОЙ ПОЛОСЕ ПРИ ПЛОСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

В.Л. Дильман, А.Н. Дияб

В работе исследуются линии разрыва напряжений в окрестности особых точек напряженного состояния дискретно-неоднородной полосы, находящейся под растягивающей нагрузкой в условиях плоской деформации в критический момент нагружения. Дается обзор литературы по данному вопросу.

Ключевые слова: напряженное состояние, неоднородное соединение, макродефект, плоская деформация.

Введение. Своеобразие напряженного состояния дискретно неоднородной растягиваемой полосы в критический момент нагружения определяется существованием в поле напряжений линий разрыва напряжений [1–5]. Эти линии проходят через особые точки – точки выхода контактных линий на свободную границу. Причина появления разрывов – переопределенность граничной задачи в окрестности особой точки с какой-либо одной стороны от контактной границы. Как правило, линии разрыва расположены в более прочной части соединения (неоднородной полосы). В частности, это так, если контактная граница прямолинейна и ортогональна свободной границе, а также если более прочный участок в окрестности особой точки образует острый угол (рис. 1, угол FAD) [6, 7]. Понятно, что при исследовании критического состояния и прочности листовых конструкций необходимо учитывать это явление. То же относится и к стержневым конструкциям [2, 9–13] и тонкостенным цилиндрическим оболочкам [2–5, 14,

15], где также имеет место переопределенность граничной задачи. Задача заметно осложняется, если материал полосы неоднороден в менее прочной или (и) в более прочной части соединения [2–5, 16, 17].

Еще более важную роль наличие разрывов напряжений играет в случаях, когда в более прочной части или на границе между более и менее прочными зонами расположен дефект [2–5, 18–33]. В этом случае нетто-сечение образца может пересекать линию разрыва напряжений, что существенно сказывается на вычислительной схеме нахождения критической нагрузки и, в конечном счете, на величине этой нагрузки. В общем случае исследование напряженного состояния в целом в полосе и, в особенности, в окрестности контактной границы возможно лишь численными методами. Однако углы ω^+ и ω^- (см. рис. 1) поворота характеристик (линий скольжения) при переходе от свободной к контактной границе можно находить аналитическими методами. Эти методы основаны на решении задачи линейного сопряжения для напряжений на границе между пластическими средами с различными параметрами текучести. Идея метода решения задачи сопряжения для напряжений использует вычисление напряжений на контактной границе через их значения на свободной границе. Для этого применяются инварианты Римана вдоль характеристик. Это позволяет уравнения равновесия на контактной поверхности представить как систему трансцендентных (не дифференциальных) уравнений, решение которой может быть численным или приближенным аналитическим.

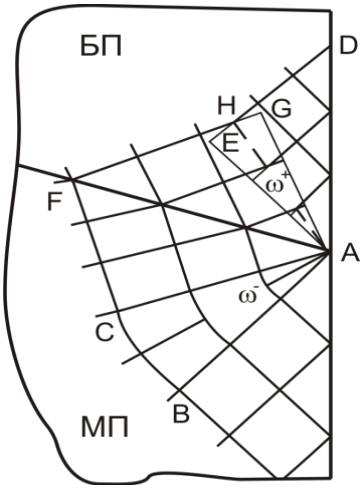


Рис. 1. Фрагмент неоднородного соединения
с наклонной контактной границей FA и характеристики системы уравнений
пластического равновесия (линии скольжения)

Задача линейного сопряжения для напряжений на границе между пластическими средами с различными параметрами текучести впервые была поставлена и в некоторых частных случаях решена в работах [1–5, 8], в которых рассматривался случай, когда контактная поверхность плоская и

расположена ортогонально направлению внешней нагрузки. В работах [1–5, 8] эта задача исследовалась при плоском деформированном состоянии. Осесимметричная задача линейного сопряжения для напряжений решалась для дискретно-неоднородного сплошного стержня в работах [9–13]. В работах [9, 12, 13] в качестве менее прочной части соединения рассматривалась неоднородная прослойка (вставка), что существенно увеличивало технические трудности исследования. В работах [1–5, 8–13] получены приближенные решения задачи сопряжения для напряжений в аналитической форме. В работах [6, 7] исследовался более сложный случай, когда контактная поверхность наклонена к направлению внешней нагрузки. В этих работах приближенные аналитические методы привели к очень громоздким аналитическим выражениям. В работах [6, 7] был предложен алгоритм решения задачи сопряжения, положенный в основу быстро сходящегося численного метода.

Касательные напряжения на контактной границе. Напряжённое состояние МП слоя при плоской деформации определяется системой уравнений гиперболического типа:

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0;$$

$$\frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} = 0;$$

$$\left(\sigma_x - \sigma_y\right)^2 + 4\tau_{xy}^2 = 4k^2.$$

Здесь k – пластическая постоянная (в зависимости от ситуации предел текучести, предел прочности, и т.д.). Уравнения равновесия на контактной границе имеют вид: $\sigma_{y'}^{+} = \sigma_{y'}^{-}$, $\tau_{x'y'}^{+} = \tau_{x'y'}^{-}$, где оси координат $\left(x', y'\right)$ направлены вдоль и ортогонально линии FA (рис. 1).

Пусть $k^{\pm}$ – пластические постоянные, соответствующие различным по прочности частям соединения, $K = k^{+}/k^{-}$. В безразмерных неизвестных уравнения равновесия (условия сопряжения) имеют вид:

$$K\tilde{\sigma}_{y'}^{+} = \tilde{\sigma}_{y'}^{-}, \qquad K\tilde{\tau}_{x'y'}^{+} = \tilde{\tau}_{x'y'}^{-}, \tag{1}$$

где тильда указывает на отсутствие размерности данной величины.

Формулировка задачи сопряжения для напряжений на контактной границе звучит так: найти напряжения $\sigma_{y'}^{+} = \sigma_{y'}^{-}$ и $\tau_{x'y'}^{+} = \tau_{x'y'}^{-}$ на контактной границе, используя условия сопряжения (1) и граничные условия на свободной границе. В предположении однородных граничных условий на свободной поверхности $\tilde{\sigma}_y = 0$; $\tilde{\tau}_{xy} = 0$ в работах [6, 7] система (1) представлена в виде:

$$1 + 2\omega^{-} + \cos\left(2\omega^{-} + 2\alpha\right) = K\left(1 - 2\omega^{+} + \cos\left(2\omega^{+} + 2\alpha\right)\right); \tag{2}$$

$$\sin\left(2\omega^{-}+2\alpha\right)=K\sin\left(2\omega^{+}+2\alpha\right). \qquad (3)$$

Здесь α – угол наклона контактной границы к оси, ортогональной направлению внешней нагрузки. В случае, когда пластический слой по сечению имеет прямоугольную форму, на контактной границе под действием растягивающей нагрузки ортогонально слою развиваются касательные напряжения. В общем случае их величина зависит от угла наклона контактной границы. Представляет интерес случай, когда на контактной границе касательные напряжения равны нулю. Из (1) и (3) следует, что:

$$\omega^{+}=\omega^{-}=-\alpha,$$

поэтому из (2) легко находится зависимость между α и K:

$$\alpha=-\frac{K-1}{K+1}.$$

Перенос линии разрыва напряжений из более прочной в менее прочную часть. На рис. 1 угол $\omega^{-}>0$, как и угол $\omega^{+}>0$ (поворот характеристики считаем положительным, если он при движении по характеристике от свободной поверхности к контактной происходит по часовой стрелке). Если $\omega^{+}>0$, на более прочном участке происходит наложение зон единственности решения задачи Коши. Пересечение зон образует угол величины $\left|\omega^{\pm}\right|$ с вершиной в особой точке (точка A на рис. 1). В действительности пересечения зон и потери единственности не происходит. Зоны стыкуются по некоторой линии разрыва напряжений [1–5]. Таким образом, для существования линий разрыва напряжений необходимо и достаточно, чтобы $\omega^{+}>0$ в более прочной части и $\omega^{-}<0$ в менее прочной. Точнее говоря, имеют место следующие утверждения:

1) если $\omega^{-}>0$ и $\omega^{+}<0$, то разрывов напряжений в окрестности особой точки (точка A на рис. 1) нет;

2) если $\omega^{-}>0$ и $\omega^{+}>0$, то существует разрыв напряжений в более прочной части соединения в окрестности особой точки;

3) если $\omega^{-}<0$ и $\omega^{+}<0$, то существует разрыв напряжений в менее прочной части соединения в окрестности особой точки;

4) если $\omega^{-}<0$ и $\omega^{+}>0$, то существуют две линии разрыва напряжений: и в менее прочной части, и в более прочной части соединения в окрестности особой точки.

Установим, какие из этих вариантов реализуются. Величины и знаки углов $\omega^{\pm}$ зависят от параметра $K=k^{+}/k^{-}$ и угла наклона контактной границы α. Следовательно, для выяснения того, какая из четырех ситуаций имеет место, необходимо установить граничные ситуации, то есть решить уравнения:

$$\omega^{-}\left(\alpha,K\right)=0; \qquad (4)$$

$$\omega^{+}\left(\alpha, K\right)=0. \qquad (5)$$

Уравнение (4) в силу системы уравнений (2) и (3) сводится к системе трансцендентных уравнений:

$$2\alpha=\arcsin\left(K\sin\left(2\omega^{+}+2\alpha\right)\right); \qquad (6)$$

$$2\omega^{+}=1+\cos\left(2\omega^{+}+2\alpha\right)-\frac{1}{K}\left(1+\cos\left(2\alpha\right)\right). \qquad (7)$$

Рассмотрим итерационную процедуру нахождения углов ω^{+} и α на основе системы уравнений (6), (7). Она основана на итерационных уравнениях вида:

$$2\alpha^{(n+1)}=\arcsin\left(K\sin\left(2\omega^{+(n)}+2\alpha^{(n)}\right)\right); \qquad (8)$$

$$2\omega^{+(n+1)}=\frac{1}{K}\left(K-1+\cos\left(2\omega^{+(n)}+2\alpha^{(n)}\right)-\cos\left(2\alpha^{(n)}\right)\right). \qquad (9)$$

Численный анализ системы уравнений (8) и (9) показывает, что система (6), (7) на имеет решений в диапазоне значений: $\alpha\in\left(-\pi/4;\ \pi/4\right)$, $K>1$. Следовательно, при любом угле наклона контактной границы разрыв напряжений в менее прочной части полосы отсутствует. То же относится и к уравнению (5). Оно также не имеет решений при подходящих (указанных) значениях параметров, то есть изменением угла α невозможно избавиться от разрыва на более прочном участке. Для иллюстрации этих выводов рассмотрим рис. 2, заимствованный из работы [6]. На рис. 2 показаны зависимости углов ω^{+} и ω^{-} от угла наклона контактной границы α. Выполнение условия (4) означает, что кривая (a) пересекает горизонтальную ось. Видно, что даже при большом по модулю отрицательном значении α, $\omega^{-}\left(\alpha, K\right)$ заметно больше нуля. Например, при $\alpha=-0{,}5$ угол $\omega^{-}\left(\alpha, K\right)\approx 0{,}1$. Выполнение условия (5) означает, что кривая (b) пересекает горизонтальную ось. Видно, что даже при большом значении α угол $\omega^{+}\left(\alpha, K\right)$ заметно больше нуля. Например, при $\alpha=0{,}4$ угол $\omega^{+}\left(\alpha, K\right)\approx 0{,}1$.

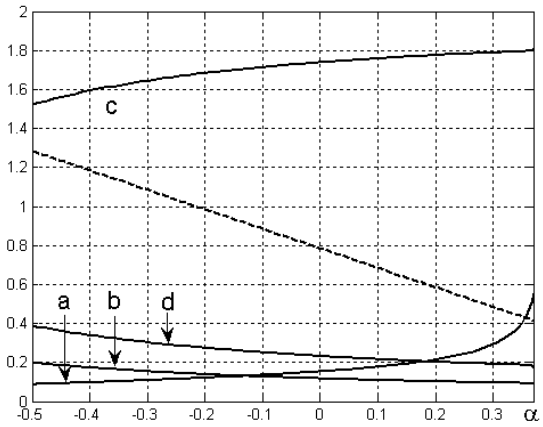


Рис. 2. Зависимость напряжений на контактной поверхности от угла её наклона α. Наклонная пунктирная прямая – угол $\pi/4-\alpha$, ω^- – линия (a), ω^+ – линия (b), σ_y –линия (c), τ_{xy} – линия (d). $K=1{,}3$

Библиографический список

1. Дильман, В.Л. Напряженное состояние и прочность неоднородной пластической полосы с дефектом в более прочной части / В.Л. Дильман // Изв. РАН. МТТ. – 2010. – № 2. – С. 89–102.

2. Дильман, В.Л. Математическое моделирование критических состояний мягких прослоек в неоднородных соединениях: монография / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – 276 с.

3. Дильман, В.Л. Математическое моделирование напряженного состояния тонкостенных неоднородных цилиндрических оболочек: дис. … д-ра физ.-мат. Наук / В.Л. Дильман. – Челябинск, 2011. – 316 с.

4. Дильман, В.Л. Математическое моделирование напряженного состояния тонкостенных неоднородных цилиндрических оболочек: автореф. дис. … д-ра физ.-мат. Наук / В.Л. Дильман. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – 32 с.

5. Дильман, В.Л. Исследование аналитическими методами математических моделей напряженного состояния тонкостенных неоднородных цилиндрических оболочек / В.Л. Дильман // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2009. – Вып. 3. – № 17 (150). – С. 36–58.

6. Дильман, В.Л. Численный анализ напряжений на наклонной контактной поверхности при растяжении дискретно-неоднородного твердого тела / В.Л. Дильман, А.И. Носачева // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – Вып. 14. – № 40 (299). – С. 164–168.

7. Носачева, А.И. Математическое моделирование напряженного состояния неоднородной полосы с наружным макродефектом / А.И. Носачева // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6. – № 3. – С. 79–84.

8. Дильман, В.Л. Математическое моделирование критических состояний пластического слоя / В.Л. Дильман, А.И. Носачева // Вестник Тамбовского университета. Серия: «Естественные и технические науки». – 2013. – Т. 18. – Вып. 5. – С. 2502–2504.

9. Ерошкина, Т.В. Математическое моделирование напряженного состояния поперечного пластического слоя в круглом стержне / Т.В. Ерошкина, В.Л. Дильман // Известия ВУЗов. Математика. – 2011. – № 11. – С. 1–11.

10. Дильман, В.Л. Исследование математических моделей напряженного состояния неоднородного поперечного слоя в круглом стержне / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2009. – Вып. 4. – № 37 (170). – С. 65–77.

11. Eroshkina, T.V. Mathematical modeling of the state stress of a transverse plastic layer in a round rod / T.V. Eroshkina, V.L. Dilman // Russian Mathematics. 2011. V. 55, Issue 11. Pp. 9–17.

12. Ерошкина, Т.В. Математическое моделирование напряженного состояния неоднородных цилиндрических стержней: дис. … канд. физ.-мат. Наук / Т.В. Ерошкина. – Челябинск, 2010. – 103 с.

13. Ерошкина, Т.В. Математическое моделирование напряженного состояния неоднородных цилиндрических стержней: автореф. дис. … канд. физ.-мат. наук / Т.В. Ерошкина. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2010. – 16 с.

14. Дильман, В.Л. Критическое состояние тонкостенной цилиндрической оболочки, содержащей прослойку их менее прочного материала / В.Л. Дильман, Т.В. Карпета // Химическое и нефтегазовое машиностроение. – 2013. – № 10. – С. 21–24.

15. Dilman, V.L. Critical State of a Thin-Walled Cylindrical Shell Containing an Interlayer Fabricated from a Material of Lesser Strength / V.L. Dilman, T.V. Karpeta // Chemical and Petroleum Engineering. 2014, V. 49, Issue 9–10. Pp. 668–674.

16. Дильман, В.Л. Напряженное состояние пластического слоя с переменным по толщине пределом текучести при плоской деформации / В.Л. Дильман, Т.В. Карпета // Известия ВУЗов. Математика. – 2013. – № 8. – С. 34–43.

17. Dilman, V.L. The stress state of a plastic layer with a variable yield strength under a flat deformation / V.L. Dilman, T.V. Eroshkina // Russian Mathematics. 2013, V. 57, Issue 8. Pp. 29–36.

18. Дильман, В.Л. Прочность механически неоднородных соединений с щелевидным дефектом / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Сварочное производство. – 1999. – № 2. – С. 13–15.

19. Дильман, В.Л. Несущая способность прямошовных труб большого диаметра с дефектами на границе сплавления сварного шва / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин, А.А. Воронин // Сварочное производство. – 2002. – № 3. – С. 3–7.

20. Dil’man, V.L. Strength of mechanically heterogeneous welded joints with a slit-like defect / V.L. Dil’man, A.A Ostsemin // Welding International. 1999. V. 13 (8). Pp. 648–650.

21. Dil’man, V.L. Evaluation of the effect of defects and service reliability of welded joints in straight-seam and spiral-seam pipes / V.L. Dil’man, A.A Ostsemin // Welding International. 2002. V. 16 (2). Pp. 139–144.

22. Dil'man, V.L. Load-carrying capacity of straight-seam large diameter pipes with defects at the fusion boundary of the welded joint / V.L. Dil'man, A.A Ostsemin // Welding International. 2003. V. 17 (5). Pp. 376–380.

23. Dil'man, V.L. Static strength of a welded joint with hard interlayers and defect at the fusion line of the weld / V.L. Dil'man, A.A Ostsemin // Welding International. 2004. V. 18 (10). Pp. 805–808.

24. Дильман, В.Л. Влияние дефекта более прочного участка сварного соединения на несущую способность прямошовной трубы большого диаметра / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Проблемы машиностроения и надежности машин. – 2003. – № 6. – С. 107–115.

25. Дильман, В.Л. Анализ методом линий скольжения вязкой прочности сварного соединения с подрезом прямошовных труб большого диаметра / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Проблемы прочности. – 2004. – №3. – С. 72–82.

26. Дильман, В.Л. Влияние поверхностных дефектов на статическую прочность сварных швов спиральношовных труб / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Химическое и нефтегазовое машиностроение. – 2004. – № 2. – С. 16–19.

27. Дильман, В.Л. Статическая прочность сварного соединения с твердыми прослойками и дефектами по линии сплавления шва / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Сварочное производство. – 2004. – № 5. – С. 3–7.

28. Остсемин, А.А. Оценка влияния механической неоднородности на прочность термоупрочненных труб большого диаметра и пластин с дефектами в сварных швах / А.А. Остсемин, В.Л. Дильман // Вестник машиностроения. – 2004. – № 9. – С. 23–28.

29. Дильман, В.Л. Несущая способность прямошовных труб большого диаметра с поверхностным дефектом / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Химическое и нефтегазовое машиностроение. – 2005. – № 2. – С. 8–13.

30. Остсемин, А.А. Влияние дефектов на несущую способность труб магистральных газонефтепроводов при двухосном нагружении / А.А. Остсемин, В.Л. Дильман // Сварочное производство. – 2005. – № 8. – С. 20–25.

31. Остсемин, А.А. Статическая прочность механически неоднородных сварных соединений с односторонним поверхностным дефектом при вязком разрушении / А.А. Остсемин, В.Л. Дильман // Химическое и нефтегазовое машиностроение. – 2005. – № 10. – С. 9–12.

32. Дильман, В.Л. Расчет на прочность прямошовных труб большого диаметра с дефектом / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Вестник машиностроения. – 2006. – № 1. – С. 7–14.

33. Остсемин, А.А. Влияние дефектов сварки, расположенных на границе сплавления, на прочность сварного соединения / А.А. Остсемин, В.Л. Дильман // Вестник машиностроения. – 2006. – № 2. – С. 21–26.

К содержанию

УДК 517.958: 539.374:621.791

АНАЛИЗ ЗАВИСИМОСТИ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ НЕОДНОРОДНОЙ ПОЛОСЫ С ДЕФЕКТОМ В МЕНЕЕ ПРОЧНОЙ ЧАСТИ

В.Л. Дильман, А.И. Носачева

Аналитическими и численными методами исследуется напряженное состояние дискретно неоднородной растягиваемой полосы с наружным макродефектом при плоской деформации. Дефект расположен в менее прочной части. На этой основе получен и реализован алгоритм нахождения критической растягивающей нагрузки в зависимости от размеров и расположения дефекта, угла наклона контактной поверхности и коэффициента механической неоднородности.

Ключевые слова: напряженное состояние, неоднородное соединение, макродефект, плоская деформация

Введение. Своеобразием напряженного состояния дискретно неоднородной растягиваемой полосы в критический момент нагружения является переопределенность граничной задачи в окрестности особой точки с какой-либо одной стороны от контактной границы [1–5]. Это происходит в более прочной части соединения, если контактная граница прямолинейна и ортогональна свободной границе, а также если более прочный участок в окрестности особой точки образует острый угол (рис. 1) [6, 7]. Понятно, что при исследовании критического состояния и прочности листовых конструкций необходимо учитывать это явление. То же относится и к стержневым конструкциям [2, 9–11] и тонкостенным цилиндрическим оболочкам [2–5, 12, 13], где также имеет место переопределенность граничной задачи. Задача заметно осложняется, если материал полосы неоднороден в менее прочной или (и) в более прочной части соединения [2–5, 14, 15].

Более прочная часть влияет на прочность соединения и тогда, когда в менее прочной зоне расположен макродефект (см. рис. 1) [2–5, 16–25]. В общем случае исследование напряженного состояния в целом в полосе и, в особенности, в окрестности контактной границы возможно лишь численными методами. Однако углы ω^+ и ω^- (см. рис. 1) поворота характеристик (линий скольжения) при переходе от свободной к контактной границе можно находить аналитическими методами. Эти методы основаны на решении задачи линейного сопряжения для напряжений на границе между пластическими средами с различными параметрами текучести. Идея метода решения задачи сопряжения для напряжений использует вычисление напряжений на контактной границе через их значения на свободной границе. Для этого применяются инварианты Римана вдоль характеристик. Это позволяет уравнения равновесия на контактной поверхности представить как систему трансцендентных (не дифференциальных) уравнений, решение которой может быть численным или приближенным аналитическим.

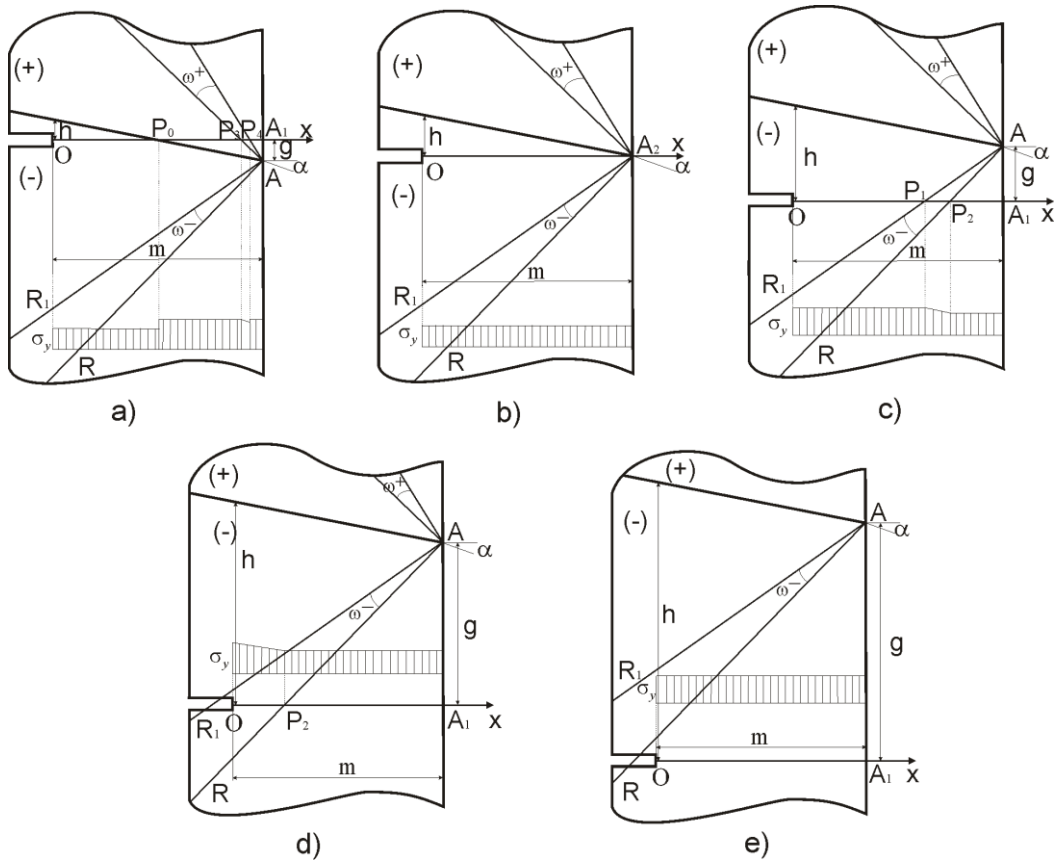


Рис. 1. Схема различных вариантов полей характеристик и эпюры нормальных напряжений по нетто-сечению в соединении с дефектом менее прочного участка (-). Угол α наклона контактной границы отрицателен

Задача линейного сопряжения для напряжений на границе между пластическими средами с различными параметрами текучести впервые была поставлена и в некоторых частных случаях решена в работах [1–5, 8], в которых рассматривался случай, когда контактная поверхность плоская и расположена ортогонально направлению внешней нагрузки. В работах [1–5, 8] эта задача исследовалась при плоском деформированном состоянии. Осесимметричная задача линейного сопряжения для напряжений решалась для дискретно-неоднородного сплошного стержня в работах [9–11]. В работе [9] в качестве менее прочной части соединения рассматривалась неоднородная прослойка (вставка), что существенно увеличивало технические трудности исследования. В работах [1–5, 8–11] получены приближенные решения задачи сопряжения для напряжений в аналитической форме. В работах [6, 7] исследовался более сложный случай, когда контактная поверхность наклонена к направлению внешней нагрузки. В этих работах приближенные аналитические методы привели к очень громоздким аналитическим выражениям. В работах [6, 7] был предложен алгоритм решения задачи сопряжения, положенный в основу быстро сходящегося численного метода.

Цель работы – на основе методов и результатов работ [6, 7] изучить влияния более прочной части соединения на его прочность при наличии дефекта в менее прочной части. Соединение (полоса) находится под растягивающей нагрузкой при плоской деформации.

Исследование влияния более прочного участка на прочность менее прочного участка, содержащего дефект. Рассмотрим неразъемное неоднородное соединение, состоящее из однородных менее прочной и более прочной частей с прямолинейной контактной границей между ними. К таким соединениям можно отнести достаточно широкие продольные заводские сварные швы, прочность которых выше прочности основного материала. Предположим наличие дефекта в основном материале (рис. 1). Наличие более прочного участка вблизи дефекта повышает прочность соединения. Для ее количественной оценки найдем величину напряжений σ_y на нетто-сечении, проходящем через конец дефекта ортогонально направлению нагрузки (ось OX на рис. 1). С точки зрения методики вычисления имеют место восемь случаев, три – для положительного угла наклона контактной поверхности и, соответственно, пять – для отрицательного угла наклона.

Рассмотрим случаи отрицательного угла наклона контактной границы.

Случай 1. Нетто-сечение не пересекает ξ-характеристику AR (см. рис. 1e). Тогда более прочная зона не оказывает упрочняющего влияния на прочность соединения, и на нетто-сечении $\sigma_y = 2$. Условие выполнения этого случая: $g \geq m$. Тогда:

$$\sigma_{cr} = \frac{1}{m}\int_{OA_1} \sigma_y dx = 2.$$

Случай 2. Вершина дефекта располагается внутри веерно-центрированного поля RAR_1 (см. рис. 1, d), что характеризуется неравенством:

$$1 \leq \frac{m}{g} \leq tg\left(\frac{\pi}{4} + \omega^-\right) = \frac{1 + tg\omega^-}{1 - tg\omega^-}.$$

В работах [1, 6, 7] получена зависимость угла ω^- центрированного поля в менее прочной части от коэффициента механической неоднородности соединения K. Ее упрощенный приближенный вид: $\omega^- = 0{,}5(K-1)$. Тогда ограничения случая 2 можно приближенно записать в виде:

$$1 < \frac{m}{g} \leq \frac{1+K}{3-K} \qquad (1)$$

Так как:

$$\sigma_y = 1 + \cos 2\nu + 2\nu,\ \nu = \frac{\pi}{4} - \gamma^-, \qquad (2)$$

где γ^- – угол наклона ξ – характеристики к оси Ox, то на участке P_2A_1 имеет место формула $\sigma_y = 2$, так как там $\gamma^- = \pi/4$.

Пусть ξ – характеристика проходит через точку $x \in OP_2$. Тогда:

$$tg\gamma^- = \frac{g}{m-x}.$$

Отсюда и из (2) следует формула для вычисления напряжения σ_y на участке OP_2:

$$\sigma_y = 1 + \frac{2(m-x)g}{(m-x)^2 + g^2} + \arccos\frac{2(m-x)g}{(m-x)^2 + g^2}. \qquad (3)$$

Считая критическим напряжением среднее напряжение на нетто-сечении, находим σ_{cr} по формуле (обозначения на рис. 1)

$$\sigma_{cr} = \frac{1}{m}\left(\int_{OP_2}\sigma_y dx + \int_{P_2A_1}\sigma_y dx\right) = \frac{1}{m}\left(\int_0^{m-g}\sigma_y dx + 2g\right),$$

в правую часть которой вместо σ_y следует подставить правую часть равенства (3). Полученный интеграл вычисляется в явном виде:

$$\int_0^{m-g}\arccos\frac{2(m-x)g}{(m-x)^2+g^2}dx = x\arccos\frac{2(m-x)g}{(m-x)^2+g^2}\Bigg|_0^{m-g} + 2\int_0^{m-g}\frac{2gxdx}{(m-x)^2+g^2} =$$

$$= g\ln\left((m-x)^2+g^2\right)\Big|_0^{m-g} - 2m\,arctg\,\frac{m-x}{g}\Bigg|_0^{m-g} =$$

$$= g\ln\frac{2g^2}{m^2+g^2} - \frac{\pi m}{2} + 2m\,arctg\,\frac{m}{g}.$$

$$\int_0^{m-g}\left(1 + \frac{2(m-x)g}{(m-x)^2+g^2}\right)dx = m - g - g\ln\frac{2g^2}{m^2+g^2}.$$

Отсюда:

$$\sigma_{cr} = \frac{1}{m}\left(\int_0^{m-g}\sigma_y dx + 2g\right) = \frac{1}{m}\left(m - g - \frac{\pi m}{2} + 2m\,arctg\,\frac{m}{g} + 2g\right) =$$

$$= 1 + \frac{g}{m} - \frac{\pi}{2} + 2arctg\,\frac{m}{g}.$$

Окончательно:

$$\sigma_{cr} = 1 + \frac{m}{g} - \frac{\pi}{2} + 2arctg\,\frac{m}{g}. \qquad (4)$$

При $g = m$ имеет место 1 случай. Тогда формула (4) обращается в формулу первого случая $\sigma_{cr} = 2$. Формула (4) фактически зависит от K, так как выполняется при ограничениях (1).

Случай 3. Вершина дефекта располагается вне веерно-центрированного поля RAR_1 (нетто-сечение пересекает ξ-характеристику AR) (см. рис.1, с), то есть $\frac{m}{g} \geq \frac{1+tg\omega^-}{1-tg\omega^-} = \frac{1+K}{3-K}$.

Промежуточным между вторым и третьим случаями является условие:

$$\frac{m}{g} = \frac{1+K}{3-K}, \tag{5}$$

при котором один из лучей угла ω^- проходит через конец дефекта. В этом случае $x = 0$ в формуле (3), то есть:

$$\sigma_y = 1 + \frac{2mg}{m^2+g^2} + \arccos\frac{2mg}{m^2+g^2}.$$

Используя (5), отсюда получим:

$$\sigma_y = \frac{8}{K^2-2K+5} + \arccos\frac{3+2K-K^2}{K^2-2K+5}. \tag{6}$$

На участке OP_1 напряжения σ_y постоянны и равны значению в точке P_1, которое может быть вычислено по формуле (6). На участке P_1A средние напряжения σ_y можно найти с помощью формулы (4), в которой следует использовать равенство (5):

$$\sigma_y = 1 + \frac{3-K}{1+K} - \frac{\pi}{2} + 2arctg\frac{3-K}{1+K}.$$

Длина участка P_1A – это длина OA в пограничном между вторым и третьим случаями, поэтому из (5) следует, что $P_1A = g\frac{1+K}{3-K}$. Отсюда:

$$m\sigma_{cr} = \left(m - g\frac{1+K}{3-K}\right)\left(\frac{8}{K^2-2K+5} + \arccos\frac{3+2K-K^2}{K^2-2K+5}\right) +$$
$$+\left(g\frac{1+K}{3-K}\right)\left(1 + \frac{3-K}{1+K} - \frac{\pi}{2} + 2arctg\frac{3-K}{1+K}\right).$$

Окончательно в случае 3 получаем:

$$\sigma_{cr} = \left(1 - \frac{g}{m}\frac{1+K}{3-K}\right)\left(\frac{8}{K^2-2K+5} + \arccos\frac{3+2K-K^2}{K^2-2K+5}\right) +$$
$$+\frac{4g}{m(3-K)} + \left(\frac{g}{m}\frac{1+K}{3-K}\right)\left(2arctg\frac{3-K}{1+K} - \frac{\pi}{2}\right).$$

Случаи 4 и 5 рассматриваются аналогично.

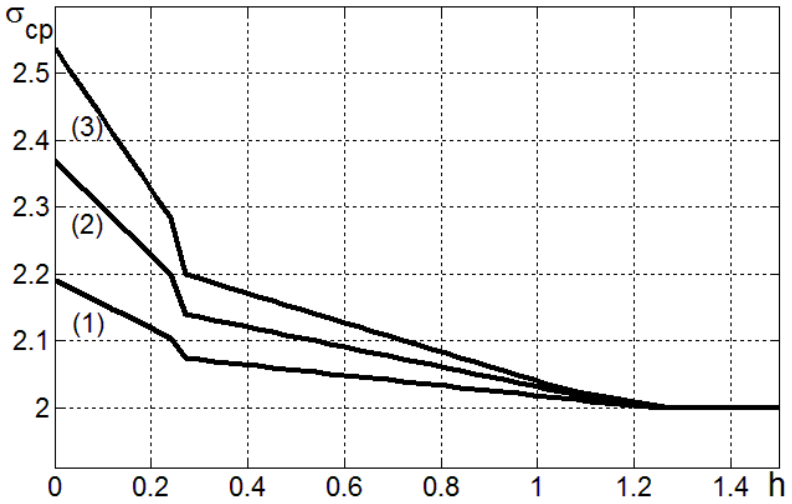


Рис. 2. Зависимость среднего критического напряжения от h – удаления контактной линии от конца дефекта, при различных значениях коэффициента механической неоднородности K: 1) $K = 1{,}1$; 2) $K = 1{,}2$; 3) $K = 1{,}3$. Угол наклона контактной поверхности $\alpha = -15^0$

Выводы. Полученные результаты позволяют численно находить критическую растягивающую нагрузку как функцию геометрических и механических параметров соединения. На рис. 2 представлена зависимость критической нагрузки от величины, характеризующей удаление дефекта от контактной границы при отрицательном угле наклона $\alpha = -15^\circ$ и различных значениях коэффициента механической неоднородности K (при $m = 1$). Видно, что при большом расстоянии между дефектом и линией контакта ($h > 1{,}2$) более прочный участок не оказывает влияния на прочность соединения. Зависимость нагрузки от расстояния не является линейной. Если конец дефекта лежит на линии контакта, то есть нетто-сечение целиком расположено в более прочной части, критическая нагрузка меньше $2K$. Это объясняется влиянием менее прочной части на напряженное состояние в более прочной, приводящим к снижению прочности.

Библиографический список

1. Дильман, В.Л. Напряженное состояние и прочность неоднородной пластической полосы с дефектом в более прочной части / В.Л. Дильман // Изв. РАН. МТТ. – 2010. – № 2. – С. 89–102.

2. Дильман, В.Л. Математическое моделирование критических состояний мягких прослоек в неоднородных соединениях: монография / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – 276 с.

3. Дильман, В.Л. Математическое моделирование напряженного состояния тонкостенных неоднородных цилиндрических оболочек: дис. … д-ра физ.-мат. наук / В.Л. Дильман. – Челябинск, 2011. – 316 с.

4. Дильман, В.Л. Математическое моделирование напряженного состояния тонкостенных неоднородных цилиндрических оболочек: автореф. дис. … д-ра физ.-мат. наук / В.Л. Дильман. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – 32 с.

5. Дильман, В.Л. Исследование аналитическими методами математических моделей напряженного состояния тонкостенных неоднородных цилиндрических оболочек / В.Л. Дильман // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2009. – Вып. 3. – № 17 (150). – С. 36–58.

6. Дильман, В.Л. Численный анализ напряжений на наклонной контактной поверхности при растяжении дискретно-неоднородного твердого тела / В.Л. Дильман, А.И. Носачева // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – Вып. 14. – № 40 (299). – С. 164–168.

7. Носачева, А.И. Математическое моделирование напряженного состояниянеоднороднойполосыс наружным макродефектом / А.И. Носачева // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6. – № 3. – С. 79–84.

8. Дильман, В.Л. Математическое моделирование критических состояний пластического слоя / В.Л. Дильман, А.И. Носачева // Вестник Тамбов. ун-та. Серия: «Естест. и технич. науки». – 2013. – Т. 18. – Вып. 5. – С. 2502–2504.

9. Ерошкина, Т.В. Математическое моделирование напряженного состояния поперечного пластического слоя в круглом стержне / Т.В. Ерошкина, В.Л. Дильман // Известия ВУЗов. Математика. – 2011. – № 11. – С. 1–11.

10. Дильман, В.Л. Исследование математических моделей напряженного состояния неоднородного поперечного слоя в круглом стержне / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математическое моделирование и программирование». – 2009. – Вып. 4. – № 37 (170). – С. 65–77.

11. Eroshkina, T.V. Mathematical modeling of the state stress of a transverse plastic layer in a round rod / T.V. Eroshkina, V.L. Dilman // Russian Mathematics. 2011. V. 55, Issue 11. Pp. 9–17.

12. Дильман, В.Л. Критическое состояние тонкостенной цилиндрической оболочки, содержащей прослойку их менее прочного материала / В.Л. Дильман, Т.В. Карпета // Хим. и нефтегаз. машиностроение. – 2013. – № 10. – С. 21–24.

13. Dilman, V.L. Critical State of a Thin-Walled Cylindrical Shell Containing an Interlayer Fabricated from a Material of Lesser Strength / V.L. Dilman, T.V. Karpeta // Chemical and Petroleum Engineering. 2014, V. 49, Issue 9–10. Pp. 668–674.

14. Дильман, В.Л. Напряженное состояние пластического слоя с переменным по толщине пределом текучести при плоской деформации / В.Л. Дильман, Т.В. Карпета // Известия ВУЗов. Математика. – 2013. – № 8. – С. 34–43.

15. Dilman, V.L. The stress state of a plastic layer with a variable yield strength under a flat deformation / V.L. Dilman, T.V. Eroshkina // Russian Mathematics. 2013, V. 57, Issue 8. Pp. 29–36.

16. Dil'man, V.L. Strength of mechanically heterogeneous welded joints with a slit-like defect / V.L. Dil'man, A.A Ostsemin // Welding International. 1999. V. 13 (8). Pp. 648–650.

17. Dil'man, V.L. Evaluation of the effect of defects and service reliability of welded joints in straight-seam and spiral-seam pipes / V.L. Dil'man, A.A Ostsemin // Welding International. 2002. V. 16 (2). Pp. 139–144.

18. Dil'man, V.L. Load-carrying capacity of straight-seam large diameter pipes with defects at the fusion boundary of the welded joint / V.L. Dil'man, A.A Ostsemin // Welding International. 2003. V. 17 (5). Pp. 376–380.

19. Dil'man, V.L. Static strength of a welded joint with hard interlayers and defect at the fusion line of the weld / V.L. Dil'man, A.A Ostsemin // Welding International. 2004. V. 18 (10). Pp. 805–808.

20. Дильман, В.Л. Влияние дефекта более прочного участка сварного соединения на несущую способность прямошовной трубы большого диаметра / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Проблемы машиностроения и надежности машин. – 2003. – № 6. – С. 107–115.

21. Дильман, В.Л. Анализ методом линий скольжения вязкой прочности сварного соединения с подрезом прямошовных труб большого диаметра / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Пробл. прочности. – 2004. – № 3. – С. 72–82.

22. Дильман, В.Л. Влияние поверхностных дефектов на статическую прочность сварных швов спиральношовных труб / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Хим. и нефтегаз. машиностроение. – 2004. – № 2. – С. 16–19.

23. Остсемин, А.А. Оценка влияния механической неоднородности на прочность термоупрочненных труб большого диаметра и пластин с дефектами в сварных швах / А.А. Остсемин, В.Л. Дильман // Вестник машиностроения. – 2004. – № 9. – С. 23–28.

24. Остсемин, А.А. Влияние дефектов на несущую способность труб магистральных газонефтепроводов при двухосном нагружении / А.А. Остсемин, В.Л. Дильман // Сварочное производство. – 2005. – № 8. – С. 20–25.

25. Дильман, В.Л. Расчет на прочность прямошовных труб большого диаметра с дефектом / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Вестник машиностроения. – 2006. – № 1. – С. 7–14.

К содержанию

УДК 519.853.4

ЭФФЕКТИВНЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ВСПОМОГАТЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ В ОДНОРОДНЫХ АЛГОРИТМАХ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

С. М. Елсаков

Исследуется вспомогательная задача в однородных алгоритмах глобальной оптимизации. Найены локальные максимумы в целевой функции вспомогательной задачи, оценены размеры окрестностей вокруг локальных максимумов, где поиск малоперспективен. Предложен эффективный алгоритм поиска перспективных начальных точек для запуска процедуры локальной оптимизации. Найдено условие при котором локальный поиск позволит решить вспомогательную задачу.

Ключевые слова: многоэкстремальная оптимизация; однородные алгоритмы; вспомогательная задача.

Рассматриваются алгоритмы решения задачи:

$$\underset{x\in X}{absmin}\, f(x), \tag{1}$$

где $f(x): R^d \to R$ – функция удовлетворяющая условию Липшица $|f(x_1) - f(x_2)| \le L\|x_1 - x_2\|$, а $X \subset R^d$ – допустимое множество, которое является компактом. К особенностям задачи (1) можно отнести длительное время вычисления значения целевой функции, а также, как правило, отсутствие аналитического описания функции $f(x)$. Задачи вида (1) часто встречаются на практике [1, 2, 3].

Для решения задачи (1) рассматриваются однородные алгоритмы глобальной оптимизации [2]. Пусть $\{x_i\}_{i=1}^k$ – последовательность точек допустимого множества, в которых осуществляется вычисление значений целевой функции. Будем говорить, что алгоритм относится к классу однородных алгоритмов глобальной оптимизации, если одновременно выполнены три условия:

1. Алгоритм является однородным, т.е. для любых двух целевых функций различающихся на константу последовательности точек испытаний совпадают.

2. Результаты уже проведенных вычислений представляются не в виде таблицы наборов $\{(x_i; f(x_1))\}_{i=1}^k$, а в виде пары функций $m_k(x) = m(x, x_1, f(x_1), ..., x_k, f(x_k))$ и $s_k(x) = s(x, x_1, f(x_1), ..., x_k, f(x_k))$, которые удовлетворяют следующим условиям:

А1. $m_k(x_i) = f(x_i),\ i = \overline{1,k}$;

А2. $s_k(x_i) = 0,\ i = \overline{1,k}$;

A3. $s_k(x) > 0, x \neq x_i, i = \overline{1,k}$;

A4. $m_k(x)$, $s_k(x)$ – липшицевы.

3. Потребуем, чтобы алгоритм мог быть представлен в виде следующего алгоритма:

Шаг 1. Выбрать начальные точки $x_i \in \mathbb{R}^d, i = \overline{1,M}$. Положить $k = M$.

Шаг 2. Вычислить:

$$x_{k+1} = \underset{x \in X}{argabsmin}\, P\left(m_k(x), s_k(x)\right), \tag{2}$$

где $P\left(m_k(x), s_k(x)\right): R^2 \to R$ – функция выбора, которая единственна для алгоритма, $m_k(x), s_k(x)$ – функции, которые перестраиваются после каждой итерации алгоритма и удовлетворяют условиям A1–A4.

Шаг 3. Вычислить значения $f(x_{k+1})$, положить $k = k+1$.

Шаг 4. Если выполнено условие выхода ϕ, то выйти, иначе вернуться на Шаг 2.

Для однородных алгоритмов справедлива теорема [2]:

Теорема 1. *Если для функции* $s_k(x)$ *выполняются условия*

A5. $m\left(x, x_1, f(x_1)+c, ..., x_k, f(x_k)+c\right) = m\left(x, x_1, f(x_1), ..., f(x_k)\right) + c,\ k \in \mathbb{N}, c \in \mathbb{R}$;

A6. $s\left(x, x_1, f(x_1)+c, ..., x_k, f(x_k)+c\right) = s\left(x, x_1, f(x_1), ..., x_k, f(x_k)\right),\ k \in \mathbb{N}, c \in \mathbb{R}$,

A7. $s_k(x) \geq \min\limits_{i=\overline{1,k}} \|x - x_i\|$,

то множество предельных точек порождаемых алгоритмом с критерием:

$$P\left(s_k(x), m_k(x)\right) = m_k(x) - 2Ks_k(x), \tag{3}$$

где $K > L + L_m$, *будет совпадать с множеством глобальных минимумов липшицевой функции* $f(x)$ *с константой Липшица* L.

При практической реализации однородных алгоритмов возникают три сложности: требуется алгоритм для построения функций $m_k(x)$ и $s_k(x)$, требуется достаточно быстро решать задачу (2), требуется каким-либо образом выбирать коэфициент K.

Быстрый алгоритм построения функций $m_k(x)$ и $s_k(x)$ можно построить следующим образом. Пусть допустимое множество X разбито на подмножества $X = X_1 \bigcup X_2 \bigcup \cdots \bigcup X_M$, таким образом, что $X_i \bigcap X_j \neq \varnothing,\ i, j = \overline{1,M}$ и количество точек испытаний внутри каждого подмножества отлично от нуля. Обозначим границу множества X как ∂X, а множеств X_i как ∂X_i. Введем расстояние до внутренней границы подмножества как $\rho_i(x) = \min\limits_{y \in \partial X_i \setminus \partial X} \|x - y\|$.

Теорема 2. *Пусть существует алгоритм построения функций* $m_k(x)$ *и* $s_k(x)$, *удовлетворяющих условиям A1)–A7) и разбиение таково, что для любой точки* $x \in X$, *которая принадлежит более чем одному подмножеству* X_i *выполняется неравенство* $\sum\limits_{x \in X_i} \rho_i(x) > \delta > 0$, *тогда функции:*

$$m_k(x)' = \sum_{x \in X_i} \rho_i(x) m_k^i(x) / \sum_{x \in X_i} \rho_i(x),$$

$$s_k(x)' = \sum_{x \in X_i} \rho_i(x) s_k^i(x) / \sum_{x \in X_i} \rho_i(x),$$

где $m_k^i(x)$, $s_k^i(x)$ *– функции* $m_k(x)$ *и* $s_k(x)$ *построенные для испытаний, которые располагаются тлько внутри подмножества* X_i, *также удовлетворяют условиям A1)–A7).*

Теорема 3. *Для того чтобы решить задачу глобальной оптимизации (1) с точностью* ε *по значению целевой функции с помощью однородного алгоритма (для функций* $m_k(x)$ *и* $s_k(x)$ *выполняются условия A1–A7) достаточно на каждом шаге решать вспомогательную задачу оптимизации (2) таким образом, чтобы выполнялось условие:*

$$P_k(x_{k+1}) \le \min_{i=\overline{1,k}} f(x_i) - \varepsilon. \tag{4}$$

Теорема 3 позволяет на каждом шаге искать следующую точку с помощью алгоритмов локальной оптимизации, не решая задачу (2) точно. И только при выходе требуется решить задачу (2) точно.

Для подбора коэфициента K известно несколько подходов [2]. Нами предлагается подход основанный на подходе адаптивного оценивания коэфициента K. Предлагается ввести некий коэфициент достоверности r с начальным значением меньше 1, например 0.5. Затем решить задачу (1) с $K = r * \max \frac{|f(x_j) - f(x_i)|}{\|x_j - x_i\|}$, после чего значение r увеличивается допустим на 0,1. Это позволяет найти глобальный минимум при минимальном r, как правило, за наименьшее количество операций.

Рассмотрим задачу (2):

$$m_k(x) - 2Ks_k(x) \to \min_{x \in X}, \tag{5}$$

где значения целевой функции в точках $\{x_i\}_{i=1}^k$ равны, соответственно, $\{f(x_i)\}_{i=1}^k$. В соответствии с теоремой 3 нам не требуется на каждом шаге находить точной решение, требуется только найти значение удовлетворяющее неравенству $P_k(x_{k+1}) \le \min_{i=\overline{1,k}} f(x_i) - \varepsilon$.

Исследуем эту задачу более подробно.

Лемма. *Пусть* $x \in S_r(x_i)$, *где* $S_r(x_i)$ *– замкнутый шар с центром в точке* x_i *и радиусом:*

$$r = 0.5 * \min_{\substack{j=\overline{1,k} \\ j \ne i}} \|x_i - x_j\|. \tag{6}$$

Тогда внутри шара:

$$\|x - x_i\| = \min_{i=\overline{1,k}} \|x - x_i.\|. \tag{7}$$

Доказательство:

Для каждой точки x существует некий номер j, такой что $\|x-x_j\| = \min\limits_{i=\overline{1,k}} \|x-x_i\|$. Поскольку точка x принадлежит шару, то $\|x-x_i\| \le r$. Покажем, что для любой точки x_j отличной от x_i выполняется неравенство:

$$\|x-x_i\| \le \|x-x_j\|. \tag{8}$$

Для этого рассмотрим расстояние $\|x_j - x_i\|$. По условиям леммы:

$$2\|x-x_i\| \le 2r = \min_{\substack{j=\overline{1,k} \\ j\ne i}} \|x_i - x_j\| \le \|x_j - x_i\|. \tag{9}$$

Запишем неравенство треугольника:

$$\|x_j - x_i\| \le \|x_j - x\| + \|x - x_i\|. \tag{10}$$

Из неравеств (9) и (10) следует, что:

$$2\|x-x_i\| \le \|x_j - x\| + \|x - x_i\|, \tag{11}$$
$$\|x-x_i\| \le \|x_j - x\|.$$

Следовательно, (7) верно.

Теорема 4. *Функция* $m_k(x) - 2Ks_k(x)$ *имеет локальные максимумы в точках* $x_i, i=\overline{1,k}$.

Доказательство

Рассмотрим разность $m_k(x) - m_k(x_i)$, поскольку функция $m_k(x)$ липшицева, то выполняется неравенство:

$$m_k(x) - m_k(x_i) \le L_m \|x - x_i\|. \tag{12}$$

С учетом того, что $K > L + L_m$, можно записать:

$$L_m x - x_i \le 2K\|x - x_i\|. \tag{13}$$

Пусть $x \in S_r(x_i)$, где $S_r(x_i)$ – замкнутый шар с центром в точке x_i и радиусом $r = 0.5 * \min\limits_{\substack{j=\overline{1,k} \\ j\ne i}} \|x_i - x_j\|$. Тогда, на основе Леммы, в пределах шара будет выполняться соотношение $\|x-x_i\| = \min\limits_{i=\overline{1,k}} \|x-x_i\|$ и, воспользуясь неравенством, (А7) получим:

$$2K\|x-x_i\| = 2K \min_{i=\overline{1,k}} \|x-x_i\| \le 2Ks_k(x). \tag{14}$$

Из неравенств (12)–(14) следует:

$$m_k(x) - m_k(x_i) \le 2Ks_k(x). \tag{15}$$

С учетом того, что $s_k(x_i) = 0$, можно преобразовать неравенство (15):

$$m_k(x) - 2Ks_k(x) \le m_k(x_i) - 2Ks_k(x_i). \tag{16}$$

Неравенство (16) свидетельствует, о существовании окрестности вокруг точки x_i радиусом r внутри которой выполняется условие локального максимума.

Покажем, что значения функции $m_k(x)-2Ks_k(x)$ достаточно большие в окрестностях точек x_i.

Рассмотрим шар $S_r(x_i)$ – замкнутый шар с центром в точке x_i и радиусом $r = 0.5 * \min\limits_{\substack{j=\overline{1,k} \\ j \neq i}} \|x_i - x_j\|$. На границе этого шара будет выполняться неравенство:

$$m_k(x)-2Ks_k(x)-m_k(x_i) \le -2Kr + L_m r, \tag{17}$$

где L_m – константа Липшица для функции $m_k(x)$. Учитывая, что $K > L + L_m$, запишем:

$$-2Kr + L_m r < r(-2L - 2L_m + L_m) = -r(2L + L_m). \tag{18}$$

Таким образом на границе шара значение функции $m_k(x)-2Ks_k(x)$ меньше, чем в центре шара на $r(2L+L_m)$. Поскольку функция $m_k(x)-2Ks_k(x)$ является липшицевой, то в каждой точке x_i существует шар меньшего радиуса, значения в котором заведомо больше, чем $m_k(x_i)-r(2L+L_m)$. Радиус этого шара R может быть найден из условия Липшица:

$$r(2L+L_m) \le \left|m_k(x)-2Ks_k(x)-m_k(x_i)\right| \le, \tag{19}$$

запишем условие Липшица:

$$\le (L_m + 2KL_s)\|x - x_i\| = (L_m + 2KL_s)R. \tag{20}$$

Выразим радиус R:

$$R \ge r\frac{2L+L_m}{L_m+2KL_s}. \tag{21}$$

С учетом, того, что $K > L + L_m$ и $L_s \ge 1$, то правая часть неравенства (21) может изменяться в пределах:

$$0 \le r\frac{2L+L_m}{L_m+2KL_s} \le r. \tag{22}$$

Таким образом для решения задачи (2) требуется искать локальные минимумы функции $m_k(x)-2Ks_k(x)$, которые лежат как можно дальше от точек $x_i, i=\overline{1,k}$. Точное решение этой задачи представляется достаточно сложной задачей, однако, в нашем случае нет необходимости искать точное решение, достаточно указать любую точку из «области притяжения» локального минимума и из этой точки спустить к локальному минимуму. Рассмотрим возможный подход к приблизительному решению этой задачи.

Пусть в качестве допустимого множества X выбрано множество $X=[0;1]^d$. Построим 2^d-арное дерево следующим образом. Корню дерева сопоставим всё множество X. Дальнейшее сопоставление описывается рекурсивной формулой. Пусть узлу сопоставлено некоторое множество $[a;b]^d$, где $a,b\in[0;1]^d$. Тогда потомку этого узла с индексом $i\in\{0,1,\ldots 2^d-1\}$ сопоставим множество $[u;v]^d$, где:

$$u_j=\begin{cases} a_j, если\, i\, and\, 2^j=0; \\ \dfrac{a_j+b_j}{2}, если\, i\, and\, 2^j=2^j; \end{cases}$$
$$v_j=\begin{cases} \dfrac{a_j+b_j}{2}, если\, i\, and\, 2^j=0; \\ b_j, если\, i\, and\, 2^j=2^j. \end{cases} \tag{23}$$

Высота дерева H является параметром алгоритма и задается пользователем. Каждому узлу сопоставим целое число (индекс узла) – количество листьев в поддереве максимальной высоты h этого узла, не содержащем ни одной точки проведенного испытания. Описанная структура данных позволяет эффективно добавлять информацию о проведенных вычислениях в дерево и эффективно определять поддерево максимальной высоты свободное от точек испытаний. Время выполнения этих операций фиксировано и составляет $O(H)$. Дерево высоты H содержит:

$$\frac{2^{Hd}-1}{2^d-1} \tag{24}$$

узлов.

Теорема 5. Если найдено поддерево высоты $h\geq\log_2\left(\left(\max\limits_{i=\overline{1,k}} f(x_i)-\min\limits_{i=\overline{1,k}} f(x_i)+\varepsilon\right)/(2L+L_m)\right)+H+1$, то вспомогательная задача решена с точностью ε.

Доказательство

Пусть высота максимального поддерева h. Тогда можно вписать шар диаметром 2^{h-H} с центром в точке $x_ш$ таким образом, чтобы внутри шара не оказалось ни одной точки уже проведенного испытания. Т.е. найдена точка:

$$\min_{i=\overline{1,k}}\|x_ш-x_i\|\geq 2^{h-H-1}. \tag{25}$$

Для того, чтобы задача была решена требуется:

$$m_k(x_ш)-2Ks_k(x_ш)\leq\min_{i=\overline{1,k}} f(x_i)-\varepsilon. \tag{26}$$

Воспользуемся оценкой из предыдущей теоремы:

$$m_k(x_ш)-2Ks_k(x_ш)-m_k(x_i)\leq-\min_{i=\overline{1,k}}\|x_ш-x_i\|(2L+L_m)\leq \tag{27}$$

с учетом неравенства (25):

$$\leq -2^{h-H-1}\left(2L+L_m\right). \tag{28}$$

Объединяя неравенства (27) и (28):

$$m_k\left(x_ш\right)-2Ks_k\left(x_ш\right)-m_k\left(x_i\right)\leq -2^{h-H-1}\left(2L+L_m\right). \tag{29}$$

Выражая значение функции $m_k\left(x\right)-2Ks_k\left(x\right)$ в центре шара:

$$m_k\left(x_ш\right)-2Ks_k\left(x_ш\right)\leq m_k\left(x_i\right)-2^{h-H-1}\left(2L+L_m\right)\leq \tag{30}$$

$$m_k\left(x_i\right)-2^{h-H-1}\left(2L+L_m\right)\leq \max_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)-2^{h-H-1}\left(2L+L_m\right). \tag{31}$$

Из неравенст (30) и (31) следует:

$$m_k\left(x_ш\right)-2Ks_k\left(x_ш\right)\leq \max_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)-2^{h-H-1}\left(2L+L_m\right). \tag{32}$$

Задача будет решена, если будет выполнено следующее неравенство:

$$\max_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)-2^{h-H-1}\left(2L+L_m\right)\leq \min_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)-\varepsilon. \tag{33}$$

Преобразуем:

$$\max_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)-\min_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)+\varepsilon\leq 2^{h-H-1}\left(2L+L_m\right),$$

$$\frac{\max_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)-\min_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)+\varepsilon}{2L+L_m}\leq 2^{h-H-1},$$

$$\log_2\left(\frac{\max_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)-\min_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)+\varepsilon}{2L+L_m}\right)\leq h-H-1.$$

Выражая высоту найденного поддерева:

$$h\geq \log_2\left(\frac{\max_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)-\min_{i=\overline{1,k}} f\left(x_i\right)+\varepsilon}{2L+L_m}\right)+H+1. \tag{34}$$

Таким образом выполнение неравенства (34) влечет выполнение неравенства (26), что означает возможность решения вспомогательной задачи с точностью ε.

Библиографический список

1. Елсаков, С.М. Однородные алгоритмы многоэкстремальной оптимизации / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. – 2010. – № 10. – С. 1727–1740.

2. Елсаков, С.М. Однородные алгоритмы многоэкстремальной оптимизации для целевых функций со значительным временем вычисления значения / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Вычислительные методы и программирование. – 2011. – № 1. – С. 52–73.

3. Elsakov, S.M. Linear Homogeneous Algorithms of Global Optimization / S.M. Elsakov, V.I. Shiryaev // Global Optimization: Theory, Methods & Applications. Series Lecture notes in decision science. Vol. 12. – Hong Kong, London, Tokyo: Global-Link Publisher, 2009. – Pp. 241–247.

К содержанию

УДК519.71

СИГНАЛЬНЫЕ ПЕРЕМЕННЫЕ В ЗАДАЧЕ ПЛАНИРОВАНИЯ ПОПОЛНЕНИЯ СКЛАДА

Б.М. Кувшинов

Рассматривается многокритериальная задача оптимизации управления пополнением складских запасов предприятия. Определены риски, возникающие в результате неточного и незаблаговременного определения будущего спроса. Предложена двухуровневая система фильтрации, которая позволяет минимизировать указанные риски при ограниченной пропускной способности ЛПР.

Ключевые слова: управление запасами; поддержка принятия решений; многокритериальная оптимизация.

Задача заблаговременного пополнения складских запасов, покрывающих детерминированный или прогнозируемый спрос, типична для предприятий самых разных сфер деятельности, имеющих дело с материальными запасами [1–3]. Объем и время возникновения потребностей определяется графиком отгрузки запасов контрагентам или их использования в собственном производстве. Необходимость же заблаговременного пополнения склада диктуется временными задержками в логистической цепочке [4]. Эти задержки включают время на агрегирование потребностей плановым отделом, поиск необходимых товаров у поставщиков, собственно время доставки на склад, время документального приходования и фактической приемки товара, время контроля качества и размещения поступивших запасов на складе и т.п.

В таких условиях возникает конфликт интересов потребительского и снабженческого подразделений внутри предприятия (например, отдела продаж и отдела закупа). С точки зрения потребительского подразделения, момент определения или прогнозирования потребностей $t_П$ должен быть как можно ближе к моменту отгрузки t_C. Это позволяет максимально точно определять график отгрузки. С точки зрения снабженческого подразделения, напротив, моменты отгрузки t_{C1}, t_{C2}, … должны быть известны как можно более заблаговременно. Это позволяет обеспечить своевременное поступление запасов на склад.

На уровне предприятия такой конфликт решается регламентно: определяется некоторый нормативный минимальный срок T до наступления момента желаемой отгрузки, за который должны быть определены потребности, т.е.:

$$t_П \leq t_C - T. \quad (1)$$

Однако реальные возможности подразделения-потребителя по заблаговременному определению своих потребностей могут различаться от случая к случаю, что приводит к ошибкам в оценке объемов и графика потребления. Соответственно, активированная логистическая цепочка пополнения приводит к появлению излишков или нехватке запасов. Если номенклатура потребляемых запасов достаточно узкая, а спрос имеет высокую частоту – эти отклонения демпфируются и не приносят предприятию потерь. Если же номенклатура запасов широкая, а спрос на них имеет нерегулярных характер, то ситуации преждевременного / избыточного и опаздывающего / недостаточного пополнения склада связаны с реальными убытками. Избыточный запас означает перерасход складских площадей и финансовых ресурсов, «замороженных» в запасах. Нехватка запаса приводит к потере спроса, либо к задержке дальнейшего производственного процесса подразделения-потребителя. В худшем случае предприятие получает запас, вообще не обеспеченный спросом, и вынуждено избавляться от него с потерей стоимости (частичной – если запас может быть продан по заниженной цене, либо полной – если перепродажа запаса невозможна). Таким образом, оценка риска неликвидности приобретаемого запаса при неточном определении будущих потребностей – важнейшая составляющая задачи планирования пополнения склада.

Будем рассматривать задачу планирования в следующем виде. Для данной номенклатурной позиции имеется некоторая история спроса $x(t)$, $t=t_П, t_П–1, t_П–2, \ldots$, планируемые будущие потребности $x(t)$, $t=t_{C1}, t_{C2}, \ldots$, и текущий объем складского запаса $z(t_П)$. Формальная процедура планирования по потребностям требует запустить логистическую цепочку пополнения запаса в объеме r к моменту времени $(t_П+\tau)$. Необходимо оценить риск неликвидности возникающих запасов в случае, если планируемые будущие потребности $x(t)$, $t=t_{C1}, t_{C2}, \ldots$, не реализуются, а потребление запаса продолжится согласно тем же закономерностям, которые наблюдаются в истории спроса $x(t)$, $t=t_П, t_П–1, t_П–2, \ldots$.

Отметим несколько принципиальных моментов.

1. Детали процедуры планирования по потребностям в данном случае не важны: она может группировать спрос, возникший по нескольким отдельным потребностям, опираться на какие-либо алгоритмы прогнозирования, фазировать пополнение запасов во времени и т.д. [1–4]. В любом случае, результатом применения этой процедуры является только объем r и время $(t_П+\tau)$ ожидаемого пополнения запаса.

2. Уже существующий запас $z(t_П)$ и ожидаемое поступление $r(t_П+\tau)$ имеет смысл рассматривать в сумме – как объем запаса, к которому применяется фактор риска исчезновения потребности $x(t)$, $t=t_{C1}, t_{C2}, \ldots$.

3. Окончательное решение об исполнении или неисполнении решения процедуры планирования или об изменении объема пополнения желательно делегировать ЛПР (специалисту отдела планирования). Он сможет учесть дополнительные факторы риска, не представленные в формальной модели планирования: документально подтвержденные гарантии исполнения планируемой потребности x(t), $t=t_{C1}$, t_{C2}, …, ликвидность запаса с точки зрения его потребительских свойств и т.п. При этом возможны различные ситуации:

а) если количество планируемых позиций мало и все они могут быть содержательно проанализированы ЛПР – в формализации понятия «риск неликвидности» нет необходимости;

б) если количество планируемых позиций так велико и/или требуемая скорость планирования так высока, что участие ЛПР в анализе исключено – формализация понятия «риск неликвидности» должна полностью заменять аналитические функции ЛПР;

в) если имеет место промежуточная ситуация – то понятие «риск неликвидности» можно выразить в виде сигнальной (логической) переменной; тогда потребности в пополнении, признанные «низкорисковыми», передаются в исполнение без участия ЛПР, а потребности, признанные «высокорисковыми», передаются на обработку ЛПР.

Последний случай, когда через ЛПР передается только часть потока потребностей в пополнении, можно обеспечить следующим образом.

1. На основании истории спроса x(t), $t=t_П, t_П–1, t_П–2$, …., с помощью некоторой интерполирующей модели Ф, строится аппроксимация g=Ф(t), $t=t_П, t_П–1, t_П–2$, …. истории спроса.

2. Элементы временного ряда x(t), $t=t_П, t_П–1, t_П–2$, …., отклонение которых от построенной аппроксимации g=Ф(t) выше некоторого порога, исключаются из временного ряда (т.е. формируется новый, укороченный отфильтрованный временной ряд x(t), $t=t_П, t_П–1, t_П–2$,…

3. На основании отфильтрованного временного ряда, с помощью некоторой модели прогнозирования F, строится прогноз дальнейшего потребления f=F(t) $t=t_П+1, t_П+2$,…

4. Вычисляется величина:

$$L= (z(t_П) + r(t_П + \tau))/ \sum_{t=t_П+\tau}^{t_П+\tau+D} F(t). \qquad (2)$$

Это прогнозируемая оборачиваемость ожидаемых запасов, выраженная в кол-ве временных интервалов продолжительности D).

5. Величина L сравнивается с некоторым пороговым значением $L_{крит}$. На ручную обработку ЛПР передаются только позиции, для которых $L> L_{крит}$.

Шаги (1)–(3) – это стандартная робастная процедура прогнозирования, однако выбор ее параметров обладает спецификой. Дело в том, что максимальная точность прогнозирования не является целью данной процедуры. Рассмотрим постановку задачи оптимизации значений парамет-

ров, которая более точно отражает экономическую сущность задачи планирования пополнения запаса.

Стандартным образом обозначим:

– $S_{10}(i)$ – «пропуск цели» на i-й номенклатурной позиции, т.е. ситуацию, когда позиция должна была попасть в ручную обработку ЛПР, но была автоматически оценена как «низкорисковая»;

– $S_{01}(i)$ – «ложное срабатывание» на i-й номенклатурной позиции, т.е. ситуацию, когда позиция была оценена как «высокорисковая», но ручная обработка ее ЛПР оказалась излишней.

Аналогичным образом используем обозначения $S_{00}(i)$, $S_{11}(i)$, где первый индекс определяет фактическую необходимость в ручной обработке позиции ЛПР, а второй индекс – результат автоматической оценки риска.

Для множества обрабатываемых номенклатурных позиций I $|\{S_{01}(i), i \in I\}|$ – это количество ситуаций «пропуска цели», которые повлекут за собой финансовые потери, а $|\{S_{10}(i), i \in I\}| + |\{S_{11}(i), i \in I\}|$ – это общее количество ситуаций, которые будут переданы на ручную обработку ЛПР. Таким образом, задача оптимизации по параметрам D, $L_{крит}$ для описанной выше процедуры вычисления сигнальных переменных имеет вид:

$$|\{S_{01}(i), i \in I\}| \to \min, \tag{3}$$

$$|\{S_{10}(i), i \in I\}| + |\{S_{11}(i), i \in I\}| \le S_{max},$$

где S_{max} – предельная пропускная способность ЛПР (количество номенклатурных позиций, которое он может проанализировать на одном шаге планирования).

Решение задачи (3) позволит при ограниченной пропускной способности ЛПР выполнить максимальное количество «полезных» обработок.

Наиболее сложная задача в рамках такой процедуры – оценить значение первого индекса в $S_{xy}(i)$ для каждой номенклатурной позиции. Здесь можно полностью повторить шаги (4)–(5) описанной выше процедуры, но относительно фактической а не прогнозируемой оборачиваемости:

$$L' = (z(t_П) + r(t_П + \tau)) / \sum_{t=t_П-D}^{t_П} x(t). \tag{4}$$

Теперь для решения задачи (3) достаточно воспользоваться переборной процедурой: проверив всевозможные сочетания значений параметров по конечной сетке. В пользу отказа от аналитического или итерационного решения задачи оптимизации говорят следующие факторы.

1. Аналитическая процедура неизбежно привела бы к вероятностным допущениям относительно стационарности спроса. Для широкой номентклатуры запасов, когда отдельные позиции могут иметь в истории лишь 1–2 события потребления, а также являются частичными заменителями, нет никаких оснований для таких допущений.

2. Оценку параметров можно проводить с фиксированной периодичностью, например 1 раз в месяц. Вычислительная сложность перебора не является здесь значимым ограничением.

3. В действительности S_{max} может меняться – за счет того, насколько подробно ЛПР будет анализировать каждую номенклатурную позицию, попавшую на ручную обработку. В этом случае можно говорить о переходе от задачи однокритериальной оптимизации (3) к задаче многокритериальной оптимизации вида:

$$|\{S_{01}(i), i \in I\}| \to \min, \tag{5}$$
$$|\{S_{10}(i), i \in I\}| + |\{S_{11}(i), i \in I\}| \to \min.$$

ЛПР, выполняющему роль «фильтра», полезно будет иметь полную картину вариантов своей работы в терминах «нагрузка-качество фильтрации» – тогда он сможет осознанно выбрать устраивающий его вариант.

Таким образом, предложенная процедура позволяет оценивать риски, возникающие в результате конфликта между требованиями заблаговременного планирования пополнения складских запасов и незаблаговременного получения информации об ожидаемых потребностях в этих запасах. Она представляет собой двухуровневый фильтр, в котором первый уровень – это алгоритм, автоматически отмечающий часть планируемых операций пополнения запасов как высокорисковые, а второй уровень – это ЛПР, который выносит решение по высокорисковым ситуациям с привлечением дополнительно информации. Рассмотрен способ настройки параметров такой системы, позволяющий определить баланс между нагрузкой на ЛПР и количеством ошибочных решений, принимаемых системой в целом. Данная схема успешно применяется на практике для предприятия оптово-розничной торговли с номенклатурой запасов порядка 10 тыс. позиций и частотой размещения заказов на пополнение склада 1–2 раза в неделю. При этом в качестве оптимального уровня фильтрации для ЛПР используется соотношение 500 ложных срабатываний при 25 пропусках целей.

Библиографический список

1. Рыжиков, Ю.И. Теория очередей и управление запасами / Ю.И. Рыжиков. – СПб.: Питер, 2001. – 376 с.

2. Шрайбфедер, Д. Эффективное управление запасами / Д. Шрайбфедер. – М.: Альпина Бизнес Букс, 2005. – 304 с.

3. De Koster. Design and control of warehouse order picking: A literature review / R. De Koster, T. Le-Duc, K.J. Roodbergen // European Journal of Operational Research. – 2006. – № 182(2). Pp. 481–501.

4. Стерлигова, А.Н. Управление запасами в цепях поставок / А.Н. Стерлигова. – М.: ИНФРА-М, 2007. – 430 с.

К содержанию

УДК532.59

ВОЛНОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТЕКАЮЩЕЙ ПЛЕНКИ ЖИДКОСТИ ПРИ НЕУСТОЙЧИВОСТИ МАРАНГОНИ

Л.А. Прокудина

Представлена математическая модель волнового течения неизотермической пленки жидкости. Коэффициенты дисперсионного уравнения включают, в частности, градиенты температуры, поверхностную вязкость. Рассчитаны волновые характеристики, области неустойчивости вертикальной пленки воды при неустойчивости Марангони. Определены волновые числа, соответствующие максимальному значению инкремента, при умеренных числах Рейнольдса.

Ключевые слова: жидкая пленка; неустойчивость Марангони; инкремент; фазовая скорость.

Технологические процессы, связанные с переносом тепла и массы через поверхность раздела между жидкой и газовой фазами [1, 2], широко распространены в химической, нефтехимической, энергетической, металлургической, пищевой и других отраслях промышленности. Тепломассообменные аппараты, в которых реализуется течение тонких пленок жидкости под действием силы тяжести, весьма перспективны в химической, нефтехимической технологии. В тонких пленках жидкости обеспечиваются высокие скорости переноса тепла и массы в сочетании с малой толщиной пленки, но то же время приходиться решать сложнейшие вопросы, связанные с межфазной неустойчивостью, влиянием на нее разнообразных физико-химических факторов, обусловленных, например, наличием градиентов температуры, концентрации вещества на межфазной поверхности, фазовыми переходами. Межфазная неустойчивость, связанная с эффектом Марангони, затрагивает вопросы формирования и развития диссипативных структур. Формирование диссипативных структур в виде ячеек, вихревых потоков наблюдается как при экспериментальных исследованиях, так и при работе технологического оборудования. Исследование таких явлений в пленках жидкости представляют значительный интерес для науки и проектирования современной пленочной аппаратуры.

Математическая модель течения трехмерной пленки жидкости толщиной δ по твердой наклонной поверхности под действием силы тяжести представляет собой систему уравнений Навье–Стокса и уравнения неразрывности с граничными условиями, учитывающими влияние процессов тепломассопереноса, имеет вид [3, 4]:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_+}{\partial t_+} + u_+ \dfrac{\partial u_+}{\partial x_+} + v_+ \dfrac{\partial u_+}{\partial y_+} + w_+ \dfrac{\partial u_+}{\partial z_+} = -\dfrac{\partial P_+}{\partial x_+} + F_x + \dfrac{1}{\mathrm{Re}}\left(\dfrac{\partial^2 u_+}{\partial x_+^2} + \dfrac{\partial^2 u_+}{\partial y_+^2} + \dfrac{\partial^2 u_+}{\partial z_+^2} \right), \\ \dfrac{\partial v_+}{\partial t_+} + u_+ \dfrac{\partial v_+}{\partial x_+} + v_+ \dfrac{\partial v_+}{\partial y_+} + w_+ \dfrac{\partial v_+}{\partial z_+} = -\dfrac{\partial P_+}{\partial y_+} + F_y + \dfrac{1}{\mathrm{Re}}\left(\dfrac{\partial^2 v_+}{\partial x_+^2} + \dfrac{\partial^2 v_+}{\partial y_+^2} + \dfrac{\partial^2 v_+}{\partial z_+^2} \right), \\ \dfrac{\partial w_+}{\partial t_+} + u_+ \dfrac{\partial w_+}{\partial x_+} + v_+ \dfrac{\partial w_+}{\partial y_+} + w_+ \dfrac{\partial w_+}{\partial z_+} = -\dfrac{\partial P_+}{\partial z_+} + F_z + \dfrac{1}{\mathrm{Re}}\left(\dfrac{\partial^2 w_+}{\partial x_+^2} + \dfrac{\partial^2 w_+}{\partial y_+^2} + \dfrac{\partial^2 w_+}{\partial z_+^2} \right), \\ \dfrac{\partial u_+}{\partial x_+} + \dfrac{\partial v_+}{\partial y_+} + \dfrac{\partial w_+}{\partial z_+} = 0, \end{cases} \tag{1}$$

$$y = 0: \quad u_+ = w_+ = 0, \; v_+ = V_0; \tag{2}$$

$$y = \delta: \quad \frac{1}{\mathrm{Re}}\left[2\frac{\partial u_+}{\partial x_+}\frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} - 2\frac{\partial v_+}{\partial y_+}\frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} - \left(\frac{\partial v_+}{\partial x_+} + \frac{\partial u_+}{\partial y_+} \right) + \frac{\partial \delta_+}{\partial z_+}\left(\frac{\partial u_+}{\partial z_+} + \frac{\partial w_+}{\partial x_+} \right) \right] +$$

$$+M\frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} + N\left(\frac{\partial^2 u_+}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2 w_+}{\partial x_+ \partial z_+} \right) + \tau_x = 0; \tag{3}$$

$$\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[2\frac{\partial w_+}{\partial z_+}\frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} - 2\frac{\partial v_+}{\partial y_+}\frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} - \left(\frac{\partial w_+}{\partial y_+} + \frac{\partial v_+}{\partial z_+} \right) + \frac{\partial \delta_+}{\partial x_+}\left(\frac{\partial u_+}{\partial z_+} + \frac{\partial w_+}{\partial x_+} \right) \right] +$$

$$+M\frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} + N\left(\frac{\partial^2 w_+}{\partial z_+^2} + \frac{\partial^2 u_+}{\partial x_+ \partial z_+} \right) + \tau_z = 0; \tag{4}$$

$$P_+ = \frac{2}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial v_+}{\partial y_+} - \frac{\partial \delta_+}{\partial x_+}\left(\frac{\partial u_+}{\partial y_+} + \frac{\partial v_+}{\partial x_+} \right) - \frac{\partial \delta_+}{\partial z_+}\left(\frac{\partial w_+}{\partial y_+} + \frac{\partial v_+}{\partial z_+} \right) \right] - \sigma_+\left(\frac{\partial^2 \delta_+}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2 \delta_+}{\partial z_+^2} \right) +$$

$$+P_0 - \mathrm{sign}\,\Delta T \frac{\dfrac{\rho_1}{\rho_2} - 1}{\left(\mathrm{Re}\cdot \mathrm{Pr}\cdot \mathrm{Ku}\right)^2} \frac{1}{\delta^2}; \tag{5}$$

$$\frac{\partial \delta}{\partial t_+} = v_+ - u_+ \frac{\partial \delta}{\partial x_+} - w_+ \frac{\partial \delta}{\partial z_+} + \frac{1}{\mathrm{Re}\cdot \mathrm{Pr}\cdot \mathrm{Ku}} \frac{1}{\delta}. \tag{6}$$

Безразмерные величины в (1–6): $u_+ = \dfrac{u}{u_0}$, $v_+ = \dfrac{v}{u_0}$, $w_+ = \dfrac{w}{u_0}$ – проекции скорости на соответствующие оси координат; $t_+ = \dfrac{tu_0}{\delta_0}$ – время; $x_+ = \dfrac{x}{\delta_0}$, $y_+ = \dfrac{y}{\delta_0}$, $z_+ = \dfrac{z}{\delta_0}$ – переменные; $\delta_+ = \dfrac{\delta}{\delta_0}$ – толщина жидкой пленки;

$\mathrm{Re} = \dfrac{u_0 \delta_0 \rho}{\mu}$ – число Рейнольдса; $F_x = \dfrac{g_x \delta_0}{u_0^2}$, $F_y = -\dfrac{g_y \delta_0}{u_0^2}$, $F_z = \dfrac{g_z \delta_0}{u_0^2}$ – проекции числа Фруда на соответствующие оси координат; $P_+ = \dfrac{P}{\rho u_0^2}$ – давление; $N = \dfrac{k+e}{\rho \delta_0^2 u_0}$ – параметр поверхностной вязкости; $\bar{\tau}_x = \dfrac{\tau_x}{\rho u_0^2}$, $\bar{\tau}_z = \dfrac{\tau_z}{\rho u_0^2}$ – проекции касательного напряжения; $M = M_T + M_K$ – параметр Марангони: $M_T = \dfrac{\partial \sigma}{\partial T^0}\left(\dfrac{\partial T^0}{\partial y}\right)_{y=\delta} \dfrac{1}{\rho u_0^2}$, $M_K = \dfrac{\partial \sigma}{\partial K}\dfrac{\partial K}{\partial \delta}\dfrac{1}{\rho u_0^2}$; $\mathrm{Pr} = \dfrac{\rho c_p \upsilon}{\lambda}$ – число Прандтля; $\mathrm{Ku} = \dfrac{r'}{c_p \Delta T}$ – число фазового перехода; $\sigma_+ = \dfrac{\sigma}{\rho u_0^2 \delta_0}$ – параметр поверхностного натяжения. Здесь u_0 – средняя скорость основного течения жидкой пленки, δ_0 – толщина пленки в невозмущенном состоянии. В процессе конденсации $\mathrm{sign}\,\Delta T = 1$, а в процессе испарения $\mathrm{sign}\,\Delta T = -1$.

Поверхностное натяжение зависит от температуры и концентрации веществ на свободной поверхности жидкой пленки. Градиенты температуры и концентрации вызывают неоднородность поверхностного натяжения, что приводит к возникновению на межфазной поверхности, например, термокапиллярных сил. Согласно эффекту Марангони поверхностный слой приходит в движение и вовлекает в него близлежащие приповерхностные слои. Идея о существовании внутри пленки потоков жидкости с противоположным направлением циркуляции во впадинах и под гребнями была высказана П.Л. Капицей [5]. Циркуляционные потоки благодаря создаваемому ими дополнительному перемешиванию значительно интенсифицируют процесс переноса вещества и тепла через жидкую пленку. Интенсификация в жидких пленках процессов тепло- и массообмена связана с повышением эффективности, экологической безопасности и надежности пленочных аппаратов.

Поставленная задача (1)–(6) решена методами возмущений [4] и выведено дисперсионное уравнение:

$$\omega\left(a_7 k_x + a_9 k_z + i\right) + a_1 k_x^4 + a_2 k_x^2 k_z^2 + a_3 k_z^4 - a_4 i k_x^3 - a_5 i k_z^3 - -a_6 k_x^2 - a_8 k_x k_z - \\ -a_{10} k_z^2 + a_{11} i k_x + a_{12} i k_z - \frac{1}{\mathrm{Re}\cdot \mathrm{Pr}\cdot \mathrm{Ku}} = 0, \qquad (7)$$

где $\omega = \omega_r + i\omega_i$, k_Σ – волновой вектор, направленный под углом α к оси OX: $k_\Sigma = \sqrt{k_x^2 + k_z^2}$, $\quad \mathrm{tg}\,\alpha = \dfrac{k_z}{k_x}$.

Коэффициенты дисперсионного уравнения (7) имеют вид:

$$a_1 = -\frac{\mathrm{Re}\,\sigma}{3},\ a_2 = 2a_1,\ a_3 = a_1,\ a_4 = -\frac{\mathrm{Re}^2 F_x N}{2},\ a_5 = -\frac{\mathrm{Re}^2 F_z N}{2},\ a_6 = a_6^* + a_6^1,$$

$$a_6^* = -\frac{\mathrm{Re}\,F_y}{3} - \frac{\mathrm{Re}\,M}{2} + \frac{3}{40}\mathrm{Re}^3 F_x\left(\tau_x + F_x\right),\ a_6^1 = \frac{2}{3}\mathrm{Re}\cdot\mathrm{sign}\,\Delta T\,\frac{C}{\left(\mathrm{Re}\cdot\mathrm{Pr}\cdot\mathrm{Ku}\right)^2},$$

$$a_7 = \frac{5}{24}\mathrm{Re}^2 F_x,\ a_8 = \frac{3}{20}\mathrm{Re}^3 F_x F_z + \frac{3}{40}\mathrm{Re}^3\left(F_z\tau_x + F_x\tau_z\right),\ a_9 = \frac{5}{24}\mathrm{Re}^2 F_z,$$

$$a_{10} = a_{10}^* + a_{10}^1,\ a_{10}^* = -\frac{\mathrm{Re}\,F_y}{3} - \frac{\mathrm{Re}\,M}{2} + \frac{3}{40}\mathrm{Re}^3 F_z\left(\tau_z + F_z\right),$$

$$a_{10}^1 = \frac{2}{3}\mathrm{Re}\cdot\mathrm{sign}\,\Delta T\,\frac{C}{\left(\mathrm{Re}\cdot\mathrm{Pr}\cdot\mathrm{Ku}\right)^2},\ a_{11} = -\mathrm{Re}\,F_x - \mathrm{Re}\,\tau_x,\ a_{12} = -\mathrm{Re}\,F_z - \mathrm{Re}\,\tau_z.$$

Уравнение (7) позволяет рассчитать волновые характеристики: ω_r – частоту, ω_i – инкремент, фазовую скорость $c_r = \frac{\omega_r}{k}$ для диапазона чисел Рейнольдса $\mathrm{Re} \le 20$.

Вычислительные эксперименты по влиянию неустойчивости Марангони (параметр $M > 0$) на волновые характеристики проведены для вертикальной пленки воды. В этом случае проекции числа Фруда равны:

$$F_x = \frac{3}{\mathrm{Re}} - \frac{3}{2}\tau_x,\quad F_y = 0.$$

Поверхностное натяжение связано с числом Рейнольдса зависимостью $\sigma = 4887\,\mathrm{Re}^{-\frac{5}{3}}$.

На рис. 1, 2 представлены инкремент ω_i и фазовая скорость c_r. При неустойчивости Марангони для всего исследуемого диапазона чисел Рейнольдса заметно увеличивается величина инкремента и уменьшается фазовая скорость по сравнению с соответствующими их величинами (рис. 3, 4) при свободном стекании пленки, когда $M = 0$.

При неустойчивости Марангони область неустойчивого течения пленки жидкости расширяется по диапазону волновых чисел для исследуемых чисел Рейнольдса $\mathrm{Re} \le 20$ (рис. 5). В области неустойчивости определено положение кривых, соответствующих максимальному значению инкремента. Волновым числам, принадлежащим гармоникам максимального инкремента, соответствует минимальное значение фазовой скорости. Режимы течения пленок жидкости с максимальным значением инкремента реализуются в экспериментах [2].

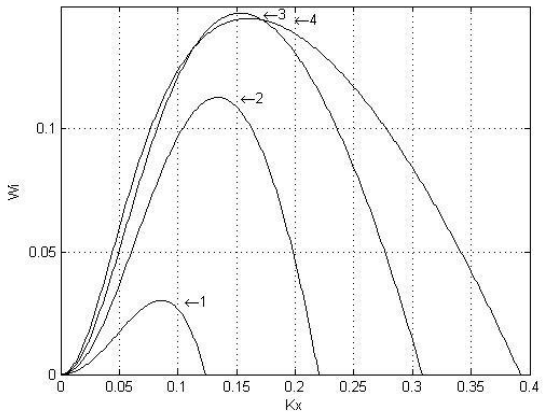


Рис. 1. Зависимость инкремента от волнового числа при M=1:
1-Re=5, 2–10, 3–15, 4–20

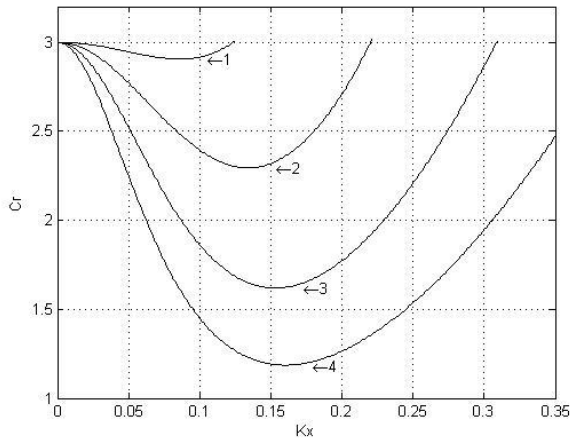


Рис. 2. Фазовая скорость при M=1:
1-Re=5, 2–10, 3–15, 4–20

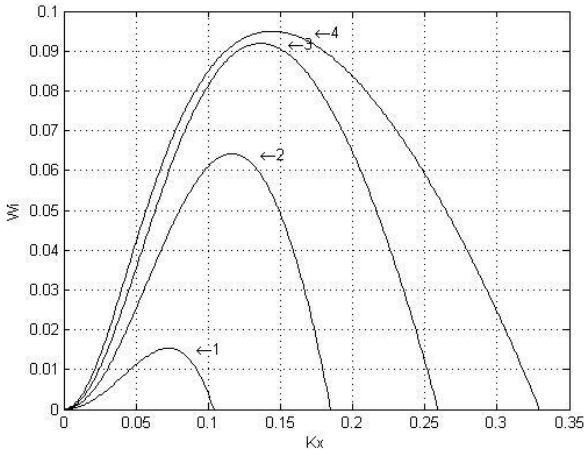


Рис. 3. Зависимость инкремента от волнового числа при M=0:
1-Re=5, 2–10, 3–15, 4–20

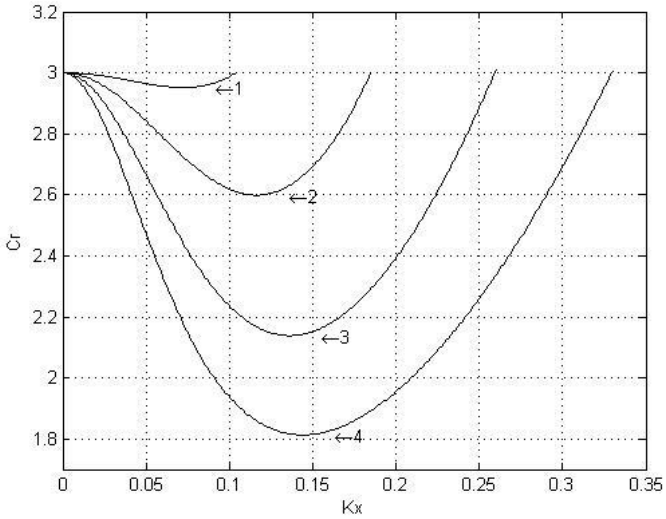


Рис. 4. Фазовая скорость при M=1:
1-Re=5, 2–10, 3–15, 4–20

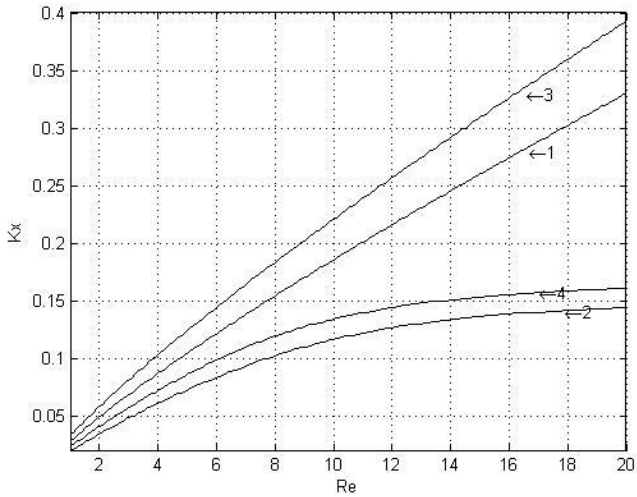


Рис. 5. Область неустойчивости:
кривые нейтральной устойчивости: 1-M=0, 3-M=1;
кривые максимального инкремента: 2-M=0, 4-M=1

При значительных градиентах температуры в жидких пленках происходит заметное снижение фазовой скорости и межфазная неустойчивость приводит к разрушению пленок. Зависимость для критических значений параметра Марангони, при которых происходит разрыв жидкой пленки, приведена в работе [3]. В представленных экспериментах по расчету волновых характеристик жидкой пленки значения параметра Марангони принималось меньше их критических значений для каждого числа Рейнольдса.

Библиографический список

1. Холпанов, Л.П. Гидродинамика и тепломассообмен с поверхностью раздела / Л.П. Холпанов, В.Я. Шкадов. – М.: Наука, 1990. – 271 с.

2. Алексеенко, С.В. Волновое течение пленок жидкости / С.В. Алексеенко, В.Е. Накоряков, Б.Г. Покусаев. – М.: Наука, 1992. – 256 с.

3. Прокудина, Л.А. Неустойчивость неизотермической жидкой пленки / Л.А. Прокудина, Г.П. Вяткин // Доклады РАН. – 1998.– Т. 362, № 6. – С. 770–772.

4. Прокудина, Л.А. Влияние неоднородности поверхностного натяжения на волновое течение жидкой пленки / Л.А. Прокудина // Инженерно-физический журнал. – 2014. – Т. 87, № 1. – С. 158–166.

5. Капица, П.Л. Волновое течение тонких слоев вязкой жидкости / П.Л. Капица // ЖЭТФ. – 1948. – Т. 18, Вып. 1. – С. 3–28.

К содержанию

УДК 621.391.837:681.3

ШУМОПОДАВЛЕНИЕ ПРИ НЕЛИНЕЙНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОГО МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ МОДУЛЕЙ

А.Н. Тырсин, В.А. Сурин

Основное содержание исследования составляет анализ применения сглаживания на основе ОМНМ-статистик. Результаты исследования свидетельствуют о том, что сглаживание на основе ОМНМ-оценок приводит к меньшему растеканию полезного сигнала на перепаде. Трудоемкость реализации сглаживания данных на основе обобщенного метода наименьших модулей соизмерима с вычислительными затратами медианного фильтра.

Ключевые слова: фильтрация, изображение, оценки, сигнал, метод наименьших модулей, помеха, подавление помех.

Шумоподавление является одной из актуальных проблем в области обработки изображений и сигналов. Все линейные алгоритмы фильтрации приводят к сглаживанию резких перепадов яркости изображений, прошедших обработку. Этот недостаток, особенно существенный, если потребителем информации является человек, принципиально не может быть исключен в рамках линейной обработки. Дело в том, что линейные процедуры являются оптимальными при гауссовом распределении сигналов, помех и наблюдаемых данных. Реальные изображения, строго говоря, не подчиняются данному распределению вероятностей. Причем, одна из основных причин этого состоит в наличии у изображений разнообразных границ, перепадов яркости, переходов от одной текстуры к другой и т.п. Поддаваясь локальному гауссовому описанию в пределах ограниченных участков, многие реальные изображения в этой связи плохо представляются как гауссовские объекты. Именно это и служит причиной смазывания границ при линейной фильтрации.

Вторая особенность линейной фильтрации – ее оптимальность, как только что упоминалось, при гауссовом характере помех. Обычно этому условию отвечают шумовые помехи на изображениях, поэтому при их подавлении линейные алгоритмы имеют высокие показатели. Однако, часто приходится иметь дело с изображениями, искаженными помехами других типов. Одной из них является импульсная помеха. При ее воздействии на изображении наблюдаются белые или (и) черные точки, хаотически разбросанные по кадру. Применение линейной фильтрации в этом случае неэффективно – каждый из входных импульсов дает отклик в виде импульсной характеристики фильтра, а их совокупность способствует распространению помехи на всю площадь кадра.

Удачным решением перечисленных проблем является применение медианной фильтрации, предложенной Джоном Тьюки [1]. При применении медианного фильтра происходит последовательная обработка каждой точки кадра, в результате чего образуется последовательность оценок [2]. В идейном отношении обработка в различных точках независима, но в целях ее ускорения целесообразно алгоритмически на каждом шаге использовать ранее выполненные вычисления. Медианные фильтры эффективны при сглаживании импульсного шума.

Но для медианной фильтрации наихудшим является случай контрастного изображения. Медианный фильтр чувствителен к резким перепадам яркости. Поэтому медианная фильтрация приводит к ослаблению сигнала, что проявляется в виде размытых контуров деталей контрастных изображений. Также при шумоподавлении, импульсы шума, расположенные близко друг к другу, могут сохраняться. Для устранения указанных недостатков предложен ряд различных модификаций медианной фильтрации [3–5]. К ним можно отнести различные взвешенные и адаптивные алгоритмы медианной фильтрации. Они в ряде случаев достигают выигрыша по сравнению с медианной фильтрацией, но они недостаточно формализованы, и как правило, требуют наличия дополнительной априорной информации.

Рассмотрим возможность использования для нелинейной фильтрации изображений обобщенного метода наименьших модулей (ОМНМ) [6].

С целью упрощения изложим сглаживание данных применительно к фильтрации сигналов. Пусть задан нестационарный ряд наблюдений $\{x_1, x_2, \ldots\}$. Принципиальным случаем нестационарного процесса $x_k = a + \xi_k$, где a – полезный сигнал, ξ_k – случайная составляющая, является перепад. В терминологии сглаживания данных это исследование поведения скользящего фильтра на границе. Поведение скользящей медианы исследовано во многих работах. Поэтому проведем сравнительный анализ статистических характеристик скользящих медианы и ОМНМ-оценок. Исследование выполним на типовой модели «перепад + шум» [2]:

$$\ldots, x_0, \ldots, x_3, x_4 + h, \ldots, x_7 + h, \ldots, \qquad (1)$$

где $x_k \sim (1-\gamma)N(0,\sigma^2) + \gamma N(\mu,\sigma_1^2)$, $0 \le \gamma < 1$.

Примем для определенности в (5.25) величину перепада, как и в [2], $h = 5$, а апертуру скользящего фильтра $L = 2m + 1 = 5$. Скользящая медиана в этом случае для любого номера k равна:

$$y_k^{LD} = \mathrm{med}\{x_{k-m}, \ldots, x_{k+m}\} = \mathrm{med}\{x_{k-2}, \ldots, x_{k+2}\}.$$

Скользящая ОМНМ-оценка среднего имеет вид:

$$y_k^{GLD} = \arg\min_a \sum_{-m}^{m} \rho(|x_{k+i} - a|) = \arg\min_a \sum_{i=-2}^{2} \rho(|x_{k+i} - a|),$$

где ρ – некоторая монотонно возрастающая на положительной полуоси функция потерь, причем $\rho(0) = 0$ и $\rho''(x) < 0$ для любого $x > 0$.

Для определенности ограничимся случаями нормального распределения случайных погрешностей и с симметричными выбросами. Очевидно, что $\forall k\ \mathrm{E}[x_k] = 0$. Поэтому «в идеале» на выходе должна быть сформирована последовательность: … , $y_3 = 0$, $y_4 = 0$, $y_5 = 5$, $y_6 = 5$, …. Оценки математического ожидания (y_k) и среднего квадратического отклонения (s_{yk}) средней, медианы и ОМНМ-статистик на последовательности «граница + шум» (1) приведены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1

Оценки математического ожидания и среднего квадратичексого отклонения скользящих среднего, медианы и ОМНМ-статистик на последовательности «граница + шум», $x_k \sim N(0,1)$

k	Оценки	Функции потерь						
		x^2	$\lvert x\rvert$	$\lvert x\rvert^{0,5}$	$\ln(\lvert x\rvert+1)$	$1-e^{-\lvert x\rvert}$	$\lvert x\rvert/(\lvert x\rvert+1)$	$\arctan(\lvert x\rvert)$
2	y_k	1,007	0,340	0,251	0,238	0,044	0,082	0,083
	s_{yk}	0,444	0,614	0,689	0,708	0,771	0,766	0,773
3	y_k	2,019	0,878	0,512	0,348	0,575	0,459	0,451
	s_{yk}	0,451	0,748	0,988	1,038	1,650	1,459	1,457
4	y_k	3,018	4,157	4,527	4,683	4,457	4,544	4,535
	s_{yk}	0,454	0,759	1,058	1,150	1,714	1,593	1,614
5	y_k	4,006	4,697	4,799	4,812	5,010	4,982	4,984
	s_{yk}	0,450	0,601	0,689	0,706	0,767	0,764	0,765

Таблица 2

Оценки математического ожидания и среднего квадратичексого отклонения скользящих среднего, медианы и ОМНМ-статистик на последовательности «граница + шум», $x_k \sim 0{,}9N(0{,}1)+0{,}1N(0{,}9)$

k	Оценки	Функции потерь						
		x^2	$\lvert x\rvert$	$\lvert x\rvert^{0,5}$	$\ln(\lvert x\rvert+1)$	$1-e^{-\lvert x\rvert}$	$\lvert x\rvert/(\lvert x\rvert+1)$	$\arctan(\lvert x\rvert)$
2	y_k	0,998	0,371	0,273	0,255	0,083	0,114	0,113
	s_{yk}	0,592	0,694	0,769	0,782	0,934	0,911	0,918
3	y_k	2,006	1,028	0,748	0,623	0,867	0,764	0,763
	s_{yk}	0,591	1,030	1,300	1,440	1,942	1,810	1,819
4	y_k	3,008	3,991	4,316	4,475	4,272	4,348	4,345
	s_{yk}	0,605	1,063	1,388	1,509	1,942	1,844	1,857
5	y_k	4,002	4,664	4,778	4,794	4,973	4,953	4,958
	s_{yk}	0,599	0,697	0,780	0,811	0,922	0,897	0,895

Оценки выполнены методом Монте-Карло для количества статистических испытаний $M = 400000$. Для наглядности на рис. 1 показаны значения оценок математического ожидания: среднего (линия 1), медианы (линия 2), ОМНМ-оценки при $\rho(x) = \arctan|x|$ (линия 3) и входного процесса на перепаде (линия 4) для $x_k \sim N(0{,}1)$.

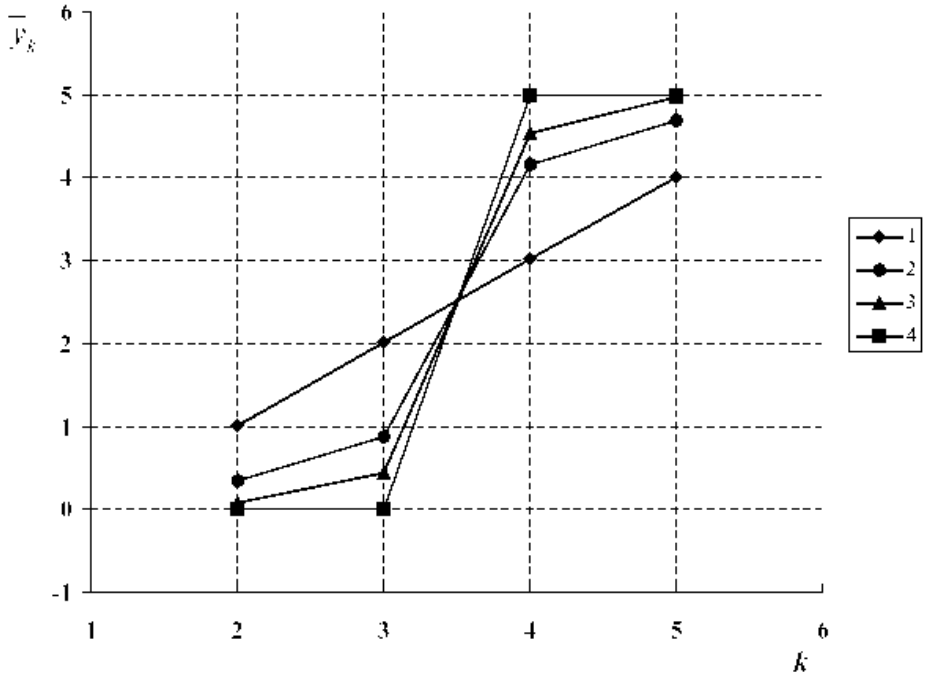


Рис. 1. Оценки математического ожидания среднего (линия 1), медианы (линия 2), ОМНМ-оценки (линия 3) и входного процесса на перепаде (линия 4) для $x_k \sim N(0{,}1)$

Анализ проведен вблизи границы ($2 \le k \le 5$), поскольку при $k < 2$ и $k > 5$ математические ожидания всех скользящих оценок совпадут и будут несмещенными. Результаты исследования свидетельствуют о том, что сглаживание на основе ОМНМ-оценок приводит по сравнению с медианным сглаживанием к меньшему растеканию полезного сигнала на перепаде. Аналогичные результаты были получены и для несимметричного засорения.

Отметим, что имеется возможность повысить степень подавления гауссова шума при сохранении той же эффективности для импульсных помех. Это достигается за счет использования выпукло-вогнутых функций потерь вида:

$$\rho(x) = \ln(|x|^{1+\delta} + 1), \qquad \rho(x) = 1 - \exp(-|x|^{1+\delta}), \qquad \rho(x) = \left[|x| / (|x| + 1)\right]^{1+\delta},$$

$$\rho(x) = \operatorname{arctg}(|x|^{1+\delta}),\ \delta > 0.$$

Реализация скользящего ОМНМ-сглаживания в принципе не намного сложнее медианного сглаживания. Действительно, в данном случае не нужно решать систем линейных уравнений для поиска узловых точек, т.к. ими являются значения входного процесса внутри скользящего окна данных, а именно, $x_{k-m}, \ldots, x_{k+m}$. Задача сводится к их простому перебору, который можно еще упростить, используя рекуррентные алгоритмы.

Скользящее ОМНМ-сглаживание можно непосредственно применять для подавления помех в виде выбросов, а также сглаживать нестационарные процессы. Наряду с этим, совместный анализ сглаженной и шумовой составляющих имеет самостоятельное значение.

Сравним два метода сглаживания. Исказим снимок Луны аддитивным импульсным шумом с плотностью 74 %. Затем обработаем зашумленный снимок Луны (рис. 2а) с помощью двумерного медианного фильтра (рис. 2б) и обобщённого метода наименьших модулей (рис. 2в), с одинаковой апертурой-крест и одинаковое количество раз.

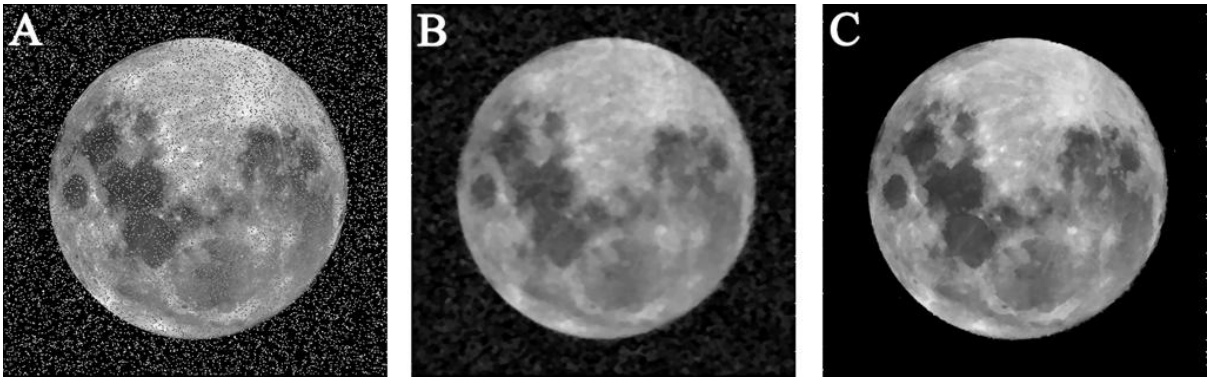


Рис. 2. Изображения: а) зашумленное изображение,
б) изображение, обработанное медианным фильтром,
в) изображение, обработанное ОМНМ-фильтром

В качестве объективного критерия качества восстановления изображения используется отношения сигнал/шум (ПОСШ) [7]:

$$W = 20\lg\frac{255}{\sqrt{s}},$$

где s – среднеквадратичная ошибка восстановления, вычисляемая по формуле:

$$s = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(\hat{f}_i - f_i)^2,$$

N – число пикселей в изображении, $f(x,y)$ – исходное (без аддитивного шума) изображение, $\hat{f}(x,y)$ – восстановленное изображение.

Для медианного фильтра, получили W^{LD} = 12,86 дБ, при этом остались не только пиксели шума, но так же фильтр изменил пиксели исходного изображения, в результате снизилась детализация мелких объектов. Обработав изображения ОМНМ-фильтром, получили W^{GLD} = 38,67 дБ. Данные результаты свидетельствуют о высокой устойчивости обобщённого метода наименьших модулей к импульсным помехам и эффективности при подавлении шума на контрастных изображениях.

Таким образом возможно сделать следующие выводы:

1. Обобщенный метод наименьших модулей эффективнее медианных методов обработки изображений при наличии импульсных помех, а также при подавлении шумовых помех на контрастных изображениях.

2. Трудоемкость реализации сглаживания данных на основе обобщенного метода наименьших модулей соизмерима с вычислительными затратами медианного фильтра.

В дальнейшем это позволит решать такие задачи как: сглаживание изображений в оптике и голографии при наличии импульсных помех; увеличение детальности изображений; автоматическая диагностика параметров помех и искажений видеосигнала; обнаружение границ изображений.

Библиографический список

1. Tukey, J.W. Discussion emphasizing the connection between analysis of variance and spectrum analysis / J.W. Tukey // Technometrics. 1961. V. 3. Pp. 191–219.

2. Быстрые алгоритмы в цифровой обработке изображений / Т.С. Хуанг, Дж.-О. Эклунд, Г.Дж. Нуссбаумер и др.; под ред. Т.С. Хуанга; пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1984. – 224 с.

3. Abreu, E. A new efficient approach for the removal of impulse noise from highly corrupted images / E. Abreu, M. Lightstone, S. Mitra, K. Arakawa // IEEE Trans, on Image Processing. 1996. V. 5, № 6. Pp. 1012–1025.

4. Chan, R. Convergence of Newton's Method for a Minimization Problem in Impulse Noise Removal / Chan R., Ho C., Nikolova M. // J. Comput. Math., 2004.V. 2, Pp.168–177.

5. Schulte, S. A fuzzy impulse noise detection and reduction method / S. Schulte, M. Nachtegael, V. De Witte, D. Van der Weken, E. Kerre // IEEE Trans, on image processing. 2006. V. 15, N 5. Pp. 1153–1162.

6. Тырсин, А.Н. Робастное построение регрессионных зависимостей на основе обобщенного метода наименьших модулей / А.Н. Тырсин // Записки семинаров ПОМИ. – 2005. – Т. 328. – С. 236–250.

7. Бухтояров, С.С. Применение переключающихся медианных фильтров для восстановления зашумленных изображений / С.С. Бухтояров, А.Л. Приоров, И.В. Апальков, В.В. Хрящев // Вопросы радиоэлектроники: Серия общетехническая. – 2006. – Вып. 2. – С. 137–147.

К содержанию

УДК 64.066.8:519.722

ЭНТРОПИЙНЫЙ ПОДХОД К РИСК-АНАЛИЗУ СИСТЕМ КРИТИЧНЫХ ИНФРАСТРУКТУР

А.Н. Тырсин, А.А. Сурина

В докладе рассмотрены общие вопросы разработки энтропийно-вероятностного подхода для решения задач исследования безопасности взаимозависимых критичных инфраструктур. Сформулирована гипотеза о повышении безопасности сложной системы с ростом энтропии. Предложен подход к моделированию взаимозависимых инфраструктур.

Ключевые слова: риск-анализ, энтропия, модель, сложная система, критичная инфраструктура, управление, случайная величина.

Одной из актуальных проблем в теории риска является построение адекватных моделей сложных систем. Сложные системы многогранны, определяются множеством различных показателей, затрудняющими выбор единого критерия эффективности управления, характеризуются тем, что взаимодействие их элементов (подсистем) нельзя или крайне затруднительно представить в явном виде. Поэтому традиционные модели представления, основанные на параллельно-последовательном структурировании систем [1] не всегда являются их адекватным описанием. Использование сценарных логико-вероятностных моделей [2, 3] и в виде графов [4] требует больших усилий и наличия значительной априорной информации об объекте исследования, что не всегда практически реализуемо.

Актуальным направлением математического моделирования сложных систем является моделирование с помощью энтропийных методов. В основе этих методов лежит использование энтропии в качестве критерия оценки функционирования системы. Это обусловлено тем, что энтропия – универсальный показатель, свойственный различным категориям социально-экономических, территориальных, биологических и других систем.

Современная физика предоставляет полезный инструмент для свертывания всех значимых параметров задачи в один на основе использования понятия энтропии. Энтропия является универсальным физическим параметром, позволяющим объединять различные проявления физического мира в единое целое, то есть, служить общим знаменателем. Понятие энтропии все шире используется в современной науке для описания структурной дезорганизации, степени разрушения связей между элементами системы, и вообще, для описания степени деградации любой замкнутой системы, включая территориальные образования [5–8]. Разложение суммарной энтропии на ее составляющие – энтропии взаимодействия, конфигурации, локальной, структурной и т.д., позволяет выработать решения по их уменьшению. Поэтому представляется, что энтропия может выступать в роли универсального параметра и идеально подходит для решения задач риск-менеджмента сложных систем, представляемых в виде совокупности взаимозависимых критичных инфраструктур (КИ) [4, 9].

В докладе рассмотрены общие вопросы разработки энтропийно-вероятностного подхода для решения задач исследования безопасности взаимозависимых КИ. Данный подход позволяет преодолеть проблему разнородности исходных данных, поскольку все физические меры различных инженерных задач будут приведены к одной безразмерной мере – энтропии.

Пусть X – некоторая случайная величина, характеризующая функционирование одной КИ. Пусть ее закон распределения известен. Если X – дискретная случайная величина, принимающая конечное число значений $x_1,\ldots,x_n$, так что:

$$P_X(x_i) = p_i,\ \sum_{i=1}^{n} p_i = 1,\ p_i \geq 0,\ i = 1,2,\ldots,n.$$

Тогда обычно энтропия определяется как:

$$H(X) = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i, \tag{1}$$

которую называют информационной энтропией [10]. От основания логарифма в (1) зависит единица измерения информации и энтропии.

Если для распределения случайной величины известен закон распределения, то от знака суммирования можно перейти к интегралу

$$H(X) = -\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log p(x) dx, \tag{2}$$

где $p(x)$ – плотность распределения случайная величина X. Полученная по формуле (2) энтропия называется энтропией закона распределения или дифференциальной энтропией.

При замене интеграла на конечную сумму в (2), нетрудно убедиться, что информационная (1) и дифференциальная (2) энтропии отличаются друг от друга на константу.

Однако, дифференциальная энтропия, являясь числовой характеристикой (функционалом) закона распределения $p(x)$, имеет ясную интерпретацию и поэтому более предпочтительна для использования.

Для удобства возьмем в (2) натуральное основание логарифма:

$$H(X) = -\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \ln p(x) dx .$$

Взаимозависимые инфраструктуры рассматриваем как элементы сложной системы S. Тогда систему S можно представить в виде многомерной случайной величины $\mathbf{X} = (X_1, X_2, .., X_n)^T$.

Каждый элемент X_i этого вектора является одномерной случайной величиной, которая характеризует функционирование соответствующей КИ исследуемой сложной системы. Элементы могут быть как взаимозависимыми, так и не зависеть друг от друга. С учетом вышеизложенного замечания, энтропию многомерной случайной величины $\mathbf{X}$ будем определять по формуле:

$$H(\mathbf{X}) = -\int_{-\infty}^{+\infty} ... \int_{-\infty}^{+\infty} p(x_1, x_2, ..., x_n) \ln p(x_1, x_2, ..., x_n) dx_1 dx_2 ... dx_n , \qquad (3)$$

причем $H(\mathbf{X}) \le \sum_{i=1}^{n} H(X_i)$, где равенство достигается только при условии взаимной независимости случайных величин $X_1, X_2, .., X_n$.

Сделаем две предпосылки.

1°. Считаем, что компоненты X_i случайного вектора:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ ... \\ X_n \end{pmatrix},$$

имеет нормальное распределение $X_i \sim N(a_i, \sigma_i^2)$, т.е. $p_{X_i}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-a_i)^2}{2\sigma_i^2}}$, $i = 1, 2, ..., n$.

2°. Для случайного вектора $\mathbf{X}$ известна или может быть определена по выборке его ковариационная матрица:

$$\mathbf{\Sigma} = \{\sigma_{ij}\}_{n\times n} = \begin{pmatrix} \mathrm{cov}(X_1, X_1) & \mathrm{cov}(X_1, X_2) & \dots & \mathrm{cov}(X_1, X_n) \\ \mathrm{cov}(X_2, X_1) & \mathrm{cov}(X_2, X_2) & \dots & \mathrm{cov}(X_2, X_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathrm{cov}(X_n, X_1) & \mathrm{cov}(X_n, X_2) & \dots & \mathrm{cov}(X_n, X_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \dots & \sigma_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \dots & \sigma_n^2 \end{pmatrix}.$$

Определим энтропию $H(\mathbf{X})$. Введем вектор математических ожиданий $\mathbf{a} = (a_1, a_2, .., a_n)^T$. Тогда с учетом 1° и 2° получим:

$$p(x_1, x_2, ..., x_n) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} |\mathbf{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \exp\left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{X} - \mathbf{a}) \mathbf{\Sigma}^{-1} (\mathbf{X} - \mathbf{a})^T \right\},$$

где $|\mathbf{\Sigma}|$ – определитель матрицы $\mathbf{\Sigma}$. Далее преобразуем (3):

$$H(\mathbf{X}) = -\int_{-\infty}^{+\infty} ... \int_{-\infty}^{+\infty} p(x_1, ..., x_n) \ln\left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} |\mathbf{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} \exp\left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{X} - \mathbf{a}) \mathbf{\Sigma}^{-1} (\mathbf{X} - \mathbf{a})^T \right\} \right) dx_1 ... dx_n =$$

$$= \ln\left((2\pi)^{\frac{n}{2}} |\mathbf{\Sigma}|^{\frac{1}{2}} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} ... \int_{-\infty}^{+\infty} p(x_1, ..., x_n) \, dx_1 ... dx_n +$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} ... \int_{-\infty}^{+\infty} p(x_1, ..., x_n) (\mathbf{X} - \mathbf{a}) \mathbf{\Sigma}^{-1} (\mathbf{X} - \mathbf{a})^T \, dx_1 ... dx_n =$$

$$= \ln\left[(2\pi)^{\frac{n}{2}} |\mathbf{\Sigma}|^{\frac{1}{2}} \right] + \frac{n}{2} = \frac{1}{2} \ln\left[(2\pi)^n |\mathbf{\Sigma}| \right] + \frac{1}{2} \ln e^n = \frac{1}{2} \ln\left[(2\pi e)^n |\mathbf{\Sigma}| \right].$$

Таким образом, энтропия случайного нормального вектора $\mathbf{X}$ равна:

$$H(\mathbf{X}) = \frac{1}{2} \ln\left[(2\pi e)^n |\mathbf{\Sigma}| \right]. \qquad (4)$$

Из (4) видно, что энтропия $H(\mathbf{X})$ является элементарной функцией от определителя ковариационной матрицы $\mathbf{\Sigma}$. Поэтому соотношение (4) представляет собой простую математическую модель, позволяющую строить простые оптимизационные алгоритмы. В [7] показано, что наиболее безопасное состояние конструкции соответствует ее максимальной неопределенности, т.е. максимуму энтропии. Представляется оправданным, что данный вывод можно распространить на любую сложную систему.

Сделанные предположения 1°, 2° основаны на центральной предельной теореме. Если условия задачи не позволяют считать вектор $\mathbf{X}$ нормальным, то можно выполнить «энергетическую» линеаризацию исходных данных. Ее суть состоит в представлении случайных компонент X_i нормально распределенными со средними значениями и дисперсиями, равными их выборочным оценкам, найденным по исходным данным.

Сформулируем гипотезу о том, что рост энтропии соответствует повышению безопасности сложной системы. Данное предположение соответствует результатам, полученным в ряде публикаций [4–8]. В результате задачу увеличения безопасности сложной системы можно существенно упро-

стить и унифицировать. Действительно, она может быть заменена на более формализованную задачу повышения энтропии исследуемой системы. Увеличить энтропию всей системы можно достичь за счет роста неопределенности одной или нескольких ее подсистем. При этом возникает известная трудность, связанная с локализацией и распределением ограниченных ресурсов для обеспечения необходимого развития системы. В данной работе предлагается концепция «точек роста». Суть ее в том, что управляющее воздействие целенаправленно концентрируют в конкретной «точке роста». Поскольку система представляет собой взаимосвязанное единое целое, то воздействие на правильно подобранную точку в ней спровоцирует процессы, способствующие повышению безопасности функционирования всей системы целиком.

Таким образом, в моделировании безопасности сложных систем КИ можно сформулировать следующие актуальные задачи: что является универсальным критерием эффективности управления системой; какую точку выбрать для активизации процессов, которые обеспечат развитие этой точки с последующим эффективным развитием всей системы; какие минимальные ресурсы нужно привлечь, чтобы запустить эти процессы.

Анализ предложенной базовой энтропийно-вероятностной модели безопасности системы КИ в виде (3), (4) показывает, что одним из путей увеличения (максимизации) энтропии многомерной случайной величины является добавление некоторой нормально распределенной случайной величины U в одну из ее составляющих $X_1, X_2, .., X_n$. Ее дисперсия σ_u^2 – это эквивалент уровня воздействия, оказываемого на соответствующую компоненту случайного вектора **X**. На практике это может выглядеть как вложение дополнительных ресурсов (в том числе финансовых) в одну из КИ – «точку роста». Взаимосвязанность КИ приведет к повышению безопасности все системы целиком.

Из (4) следует, что целевая функция данного метода максимизации энтропии имеет вид:

$$H(X_1, X_2, ..., X_i + U, ..., X_n) = \frac{1}{2}\ln\left[(2\pi e)^n(|\Sigma| + \sigma_u^2 M_{ii})\right],$$

где M_{ii} – минор i-ой строки и i-го столбца матрицы $\mathbf{\Sigma}$.

Следовательно, задача максимизации энтропии принимает вид:

$$\begin{cases} H(X_1, X_2, ..., X_i + U, ..., X_n) \to \max\limits_{i \in [1,n]}, \\ \mathbf{\Sigma}_{\mathbf{X}} = \mathbf{\Sigma}, \\ \sigma_u^2 = \sigma^2, \\ \operatorname{cov}(U, X_i) = 0, \ i = 1, 2, ..., n. \end{cases} \tag{5}$$

Задача (5) позволит осуществить эффективное управление системой КИ. Ее решение обеспечит максимальный прирост энтропии, а значит, и безопасности всей системы.

Если имеется возможность одновременного воздействия на несколько КИ, то задачу (5) можно усложнить. В этом случае будем аддитивно воздействовать на многомерную случайную величину **X** дополнительным вектором, элементы которого не зависят от элементов исходной случайной величины. Тогда получим задачу максимального прироста энтропии многомерной случайной величины путем добавления нормально распределенных случайных величин U_i, $U_i \sim N(a_{u_i}, \sigma_{u_i}^2)$, $(i = 1, 2, ..., n)$ к компонентам X_i. случайной величины **X**. Считаем, что $\mathrm{cov}(X_i, U_i) = 0$, $i = 1, 2, ..., n$. Введем обозначения:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \dots \\ U_n \end{pmatrix}, \ \mathbf{\Omega}_u = \begin{pmatrix} \sigma_{u_1}^2 \\ \sigma_{u_2}^2 \\ \dots \\ \sigma_{u_n}^2 \end{pmatrix}.$$

Покажем, что энтропия вектора $\mathbf{X}^* = \mathbf{X} + \mathbf{U}$ будет определяться по формуле:

$$H(\mathbf{X}^*) = \frac{1}{2} \ln \left[(2\pi e)^n \left(|\mathbf{\Sigma}| + \sum_{i=1}^{n} \sigma_{u_i}^2 M_{ii}^* \right) \right], \tag{6}$$

где

$$M_{11}^* = \begin{vmatrix} \sigma_2^2 + \sigma_{u_2}^2 & \sigma_{23} & \dots & \sigma_{2n} \\ \sigma_{32} & \sigma_3^2 + \sigma_{u_3}^2 & \dots & \sigma_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n2} & \sigma_{n3} & \dots & \sigma_n^2 + \sigma_{u_n}^2 \end{vmatrix}, \ M_{22}^* = \begin{vmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{13} & \dots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{31} & \sigma_3^2 + \sigma_{u_3}^2 & \dots & \sigma_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n3} & \dots & \sigma_n^2 + \sigma_{u_n}^2 \end{vmatrix},$$

…

$$M_{nn}^* = \begin{vmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1,n-1} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \dots & \sigma_{2,n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n-1,1} & \sigma_{n-1,2} & \dots & \sigma_{n-1}^2 \end{vmatrix} = M_{nn}.$$

Действительно, поскольку энтропия n-мерной нормально распределенной случайной величины **X** определяется по формуле (4), следовательно, при переходе к $\mathbf{X}^*$ в расчетной формуле энтропии изменится только ковариационная матрица. Она примет вид:

$$\mathbf{\Sigma}^* = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 + \sigma_{u_1}^2 & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 + \sigma_{u_2}^2 & \dots & \sigma_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \dots & \sigma_n^2 + \sigma_{u_n}^2 \end{pmatrix}.$$

Найдем ее определитель:

$$\left|\mathbf{\Sigma}^*\right| = \begin{vmatrix} \sigma_1^2+\sigma_{u_1}^2 & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2+\sigma_{u_2}^2 & \dots & \sigma_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \dots & \sigma_n^2+\sigma_{u_n}^2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \dots & \sigma_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \dots & \sigma_n^2 \end{vmatrix} +$$

$$+\sigma_{u_1}^2 \begin{vmatrix} \sigma_2^2+\sigma_{u_2}^2 & \sigma_{23} & \dots & \sigma_{2n} \\ \sigma_{32} & \sigma_3^2+\sigma_{u_3}^2 & \dots & \sigma_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n2} & \sigma_{n3} & \dots & \sigma_n^2+\sigma_{u_n}^2 \end{vmatrix} + \sigma_{u_2}^2 \begin{vmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{13} & \dots & \sigma_{1n} \\ \sigma_{31} & \sigma_3^2+\sigma_{u_3}^2 & \dots & \sigma_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n3} & \dots & \sigma_n^2+\sigma_{u_n}^2 \end{vmatrix} + \dots$$

$$\dots + \sigma_{u_n}^2 \begin{vmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1,n-1} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \dots & \sigma_{2,n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n-1,1} & \sigma_{n-1,2} & \dots & \sigma_{n-1}^2 \end{vmatrix} = \left|\mathbf{\Sigma}\right| + \sum_{i=1}^{n} \sigma_{u_i}^2 M_{ii}^*,$$

откуда следует справедливость формулы (6).

Следовательно, зная формулу изменения энтропии случайного вектора **X**, можно установить те его компоненты, добавление к которым новых случайных величин U_i приведет к максимальному увеличению энтропии. Таким образом, сформулирована следующая задача нелинейного программирования:

$$\begin{cases} H(\mathbf{X}+\mathbf{U}) \to \max\limits_{\mathbf{\Omega}_u}, \\ \mathbf{\Sigma}_{\mathbf{X}} = \mathbf{\Sigma}, \\ \sum\limits_{i=1}^{n} \sigma_{u_i}^2 = D, \\ \sigma_{u_i}^2 \ge 0,\ i = 1,2,\dots,n, \\ \operatorname{cov}(U_i, X_j) = 0,\ i = 1,2,\dots,n,\ j = 1,2,\dots,n. \end{cases} \tag{7}$$

Решение задачи (7) позволяет обеспечить максимальный прирост энтропии многомерной случайной величины.

Пример. Приведем в качестве иллюстрации изложенного энтропийно-вероятностного подхода пример решения задачи (7). Сгенерируем выборку объема $N = 100$ для некоторого случайного вектора размерности $n = 3$. Корреляционная матрица оказалась равной:

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} 0{,}818 & 0{,}751 & 0{,}120 \\ 0{,}751 & 0{,}857 & 0{,}459 \\ 0{,}120 & 0{,}459 & 0{,}836 \end{pmatrix}.$$

Вычислим для полученной выборки энтропии всех компонент и случайного вектора в целом: $H(X_1) = 1{,}772$, $H(X_2) = 1{,}667$, $H(X_3) = 1{,}427$, $H(\mathbf{X}) = 3{,}506$. Зададим $D = 1$. Тогда имеем следующую задачу:

$$\begin{cases} H(X_1+U_1, X_2+U_2, X_3+U_3) \to \max\limits_{\mathbf{\Omega}_u}, \\ \mathbf{\Sigma}_{\mathbf{X}} = \mathbf{\Sigma}, \\ \sum\limits_{i=1}^{3} \sigma_{u_i}^2 = 1, \\ \sigma_{u_i}^2 \geq 0, \ i = 1,2,3, \\ \operatorname{cov}(U_i, X_j) = 0, \ i = 1,2,3, \ j = 1,2,3. \end{cases} \tag{8}$$

где

$$H(\mathbf{X}^*) = \frac{1}{2}\ln\left[(2\pi e)^3\left(|\mathbf{\Sigma}| + \sum_{i=1}^{3}\sigma_{u_i}^2 M_{ii}^*\right)\right],$$

$$|\mathbf{\Sigma}| = \begin{vmatrix} 0{,}818 & 0{,}751 & 0{,}120 \\ 0{,}751 & 0{,}857 & 0{,}459 \\ 0{,}120 & 0{,}459 & 0{,}836 \end{vmatrix} = 0{,}0128, \quad M_{11}^* = \begin{vmatrix} 0{,}857+\sigma_{u_2}^2 & 0{,}459 \\ 0{,}459 & 0{,}836+\sigma_{u_3}^2 \end{vmatrix},$$

$$M_{22}^* = \begin{vmatrix} 0{,}818 & 0{,}120 \\ 0{,}120 & 0{,}836+\sigma_{u_3}^2 \end{vmatrix}, \quad M_{33}^* = \begin{vmatrix} 0{,}818 & 0{,}751 \\ 0{,}751 & 0{,}857 \end{vmatrix}.$$

Решение задачу (8) дает: $\sigma_{u_1}^2 = 0{,}364$, $\sigma_{u_2}^2 = 0{,}635$, $\sigma_{u_3}^2 = 0{,}001$. При этом максимальное значение энтропии составит $H(\mathbf{X}^*) = 3{,}596$.

Выводы

1. Сформулирована гипотеза о том, что рост энтропии сложной системы соответствует повышению безопасности ее функционирования. На ее основе предложен энтропийно-вероятностный подход моделирования взаимозависимых КИ.

2. В основе энтропийно-вероятностного моделирования лежит представление системы в виде многомерного нормального случайного вектора. В качестве критерия эффективности использован максимальный прирост энтропии за счет увеличения неопределенности компонент случайного вектора.

3. К достоинствам предложенного подхода следует отнести следующее:

– простота реализации;

– энтропийно-вероятностная модель применима при решении задачи эффективного управления системой КИ с целью повышения безопасности ее функционирования;

– универсальность и применимость для сложных систем различной природы.

Библиографический список

1. Borge, D. The Book of Risk / D. Borge // John Wiley & Sons, Inc. – 2001.

2. Crouhy, M. The Essentials of Risk Management / M. Crouhy, D. Galai, R. Mark // McGraw-Hill. – 2006.

3. King, J. Operational Risk: Measurement and Modeling / J. King // Wiley. Chichester, UK. – 2001.

4. Wallace, W.A. Managing Disruptions to Critical Interdependent Infrastructures in the Context of the 2001 World Trade Center Attack / W.A. Wallace, D. Mendonca, E. Lee, J. Mitchell, J. Chow // Critical Infrastructures. 2006. – 4. – Pp. 235–264.

5. Wilson, A.G. Entropy in Urban and Regional Modelling / A.G. Wilson // Pion Limited. London. – 1970.

6. Muhlbauer, W. K. Pipeline Risk Management Manual / W. K. Muhlbauer // Ideas, Techniques, and Resources. Third Edition. Elsevier Inc. – 2004.

7. Skorobogatov, S.M. A design of structures using crack indeterminacy and information entropy / S.M. Skorobogatov, A.A. Khaykov // Proceedings of International conference Concrete 200. Scotland, Dundee, Sept. – 1993. – Pp. 12.

8. Haken, H. Information and Self-Organization. A Macroscopic Approach to Complex Systems / H. Haken // Springer-Verlag Berlin Heidelberg. – 1988.

9. Rinaldi, S.M. Understanding, and Analyzing Critical Infrastructure Interdependencies / S.M. Rinaldi, J.P. Peerenboom, T.K. Kelly // IEEE Control Systems Magazine (December). – 2001. – Pp.11–25.

10. Cover, T.M. Elements of Information Theory. Second Edition / T.M. Cover, J.A. Thomas // John Wiley & Sons, Inc. – 2006.

К содержанию

УДК 519.7

ЗАДАНИЕ МНОЖЕСТВА ПОИСКА ПАРАМЕТРА ПРИ ИДЕНТИФИКАЦИИ МОДЕЛИ ХАОТИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА

А.С. Шелудько

Предложены способы задания множества поиска параметра в задаче идентификации модели одномерного хаотического процесса по зашумленным измерениям. На примере квадратичного отображения рассмотрено применение гарантированного подхода для уточнения априорной множественной оценки параметра с помощью рекуррентного алгоритма обработки измерений. Описана возможность использования автокорреляционной функции хаотического процесса в качестве дополнительной информации для задания множества поиска параметра.

Ключевые слова: хаотическое отображение; задача идентификации; многоэкстремальная целевая функция; гарантированный подход; автокорреляционная функция.

Одним из направлений исследований в нелинейной динамике является разработка методов идентификации моделей хаотических процессов [1–3]. В данной работе рассматривается задача оценивания параметра λ одномерного хаотического отображения:

$$x_{k+1} = f\left(x_k, \lambda\right), \tag{1}$$

по единственной зашумленной реализации измерений:

$$y_k = x_k + v_k,\ k = 1, 2, ..., N, \tag{2}$$

где v_k – ошибки измерений. Распространенным подходом к решению поставленной задачи является использование метода наименьших квадратов [2, 3], что предполагает минимизацию целевой функции:

$$F\left(x_0, \lambda\right) = \sum_{k=1}^{N}\left(y_k - f^k\left(x_0, \lambda\right)\right)^2. \tag{3}$$

Главной сложностью, которая возникает при таком подходе, является многоэкстремальность [4] целевой функции (3). Можно выделить несколько причин этого:

1) модели вида (1) описывают временные процессы, которые по своим характеристикам близки к случайным шумам, составляющим ошибки измерений v_k. Такие модели также часто используются как генераторы шумовых сигналов;

2) сильная чувствительность реализации хаотического отображения (1) к малым изменениям параметра λ и начального условия x_0, в результате чего целевая функция (3) является «изрезанной»;

3) на практике число измерений N может быть небольшим, вследствие чего локальные экстремумы целевой функции (3) будут мало отличаться друг от друга.

Одним из путей частичного преодоления проблемы многоэкстремальности является использование итерирования в обратном времени [2], то есть минимизация целевой функции:

$$F\left(x_N, \lambda\right) = \sum_{k=0}^{N-1}\left(y_{N-k} - f^{(-k)}\left(x_N, \lambda\right)\right)^2.$$

Однако выписать в явном виде обратное отображение:

$$x_k = f^{-1}\left(x_{k+1}, \lambda\right)$$

не всегда возможно. В конечном счете, это приводит к необходимости применения трудоемких алгоритмов глобальной оптимизации (см., например, [3]). В этом случае эффективным подходом может стать предварительная обработка измерений (2) с целью уточнения множества поиска параметра λ. Это позволит уменьшить число локальных экстремумов целевой функции (3), а также сократить время вычислений при применении алгоритмов глобальной оптимизации.

Для задания множества поиска может быть использован гарантированный подход [5, 6], что предполагает рекуррентное нахождение множественных оценок (информационных множеств) Λ_k и X_k для параметра λ и

переменой состояния x_k соответственно. При этом не требуется выдвигать предположений о модели ошибок измерений v_k. Информация об ошибках представляется только в виде множественных оценок $V_1,...,V_N$:

$$v_1 \in V_1,\ \ldots,\ v_N \in V_N. \tag{4}$$

Исходными данными для алгоритма также являются априорно заданные множества Λ_0 и X_0 возможных значений параметра λ и начального условия x_0:

$$\lambda \in \Lambda_0,\ x_0 \in X_0. \tag{5}$$

Информационное множество X_k для переменной состояния x_k на шаге k определяется следующим образом [7–9]:

$$X_k = X_{k/k-1} \cap Y_k, \tag{6}$$

где $X_{k/k-1}$ – множество прогнозов; Y_k – множество, совместное с измерениями. Для построения множества прогнозов $X_{k/k-1}$ используются информационные множества X_{k-1} и Λ_{k-1}, найденные на предыдущем шаге:

$$X_{k/k-1} = \bigcap_{\lambda \in \Lambda_{k-1}} S\left(X_{k-1}, \lambda\right), \tag{7}$$

где $S\left(X_{k-1}, \lambda\right)$ – множество прогнозов, построенное для конкретного значения параметра λ:

$$S\left(X_{k-1}, \lambda\right) = \left\{x \mid x = f\left(t, \lambda\right),\ t \in X_{k-1}\right\}. \tag{8}$$

Множество, совместное с измерениями, находится исходя из множественных оценок (4) для ошибок v_k:

$$Y_k = \left\{x \mid y_k - x \in V_k\right\}. \tag{9}$$

Для некоторых значений параметра λ может оказаться, что $S\left(X_{k-1}, \lambda\right) \cap X_k = \varnothing$. Тогда за счет исключения таких значений удается уточнить множественную оценку параметра:

$$\Lambda_k = \left\{\lambda \in \Lambda_{k-1} \mid S\left(X_{k-1}, \lambda\right) \cap X_k \neq \varnothing\right\}. \tag{10}$$

Результат работы алгоритма является гарантированным: на каждом шаге k истинные значения параметра λ и переменной состояния x_k принадлежат соответствующим информационным множествам Λ_k и X_k, найденным с помощью уравнений (6)–(10) при корректных исходных данных (4), (5). Таким образом, истинное значение параметра λ не может быть потеряно в ходе обработки измерений.

Рассмотрим пример использования описанного алгоритма для уточнения множества поиска параметра квадратичного (логистического) отображения:

$$x_{k+1} = f\left(x_k, \lambda\right) = \lambda x_k \left(1 - x_k\right), \tag{11}$$

которое имеет хаотические решения при $x_0 \in \left(0;\ 1\right)$ и $\lambda \in \left(3{,}569945...;\ 4\right]$ (за исключением тех значений параметра, которым соответствуют циклы отображения f). Пусть истинное значение параметра $\lambda = 3{,}7$, начальное условие $x_0 = 0{,}3$, длина реализации $N = 20$ (рис. 1). В качестве ошибок измерений v_k была выбрана реализация белого гауссовского шума с нулевым математическим ожиданием и среднеквадратическим отклонением $\sigma = 0{,}1$ (рис. 2). Зашумленные измерения показаны на рис. 3. Исходные данные для алгоритма:

$$\Lambda_0 = \left[3{,}57;\ 4\right],\ X_0 = \left[0;\ 1\right],$$

$$V_1 = ... = V_N = \left[-0{,}2;\ 0{,}2\right].$$

На рис. 4 показаны полученные информационные множества X_k для переменной состояния x_k. При обработке измерений множественная оценка Λ_k для параметра λ уточнялась два раза: при $k = 7$ и $k = 16$ (рис. 5). Конечная множественная оценка:

$$\Lambda_N = \left[3{,}6537;\ 3{,}7532\right].$$

Таким образом, использование предложенного алгоритма позволило уменьшить априорное множество поиска Λ_0 параметра λ квадратичного отображения (11) в 4 раза.

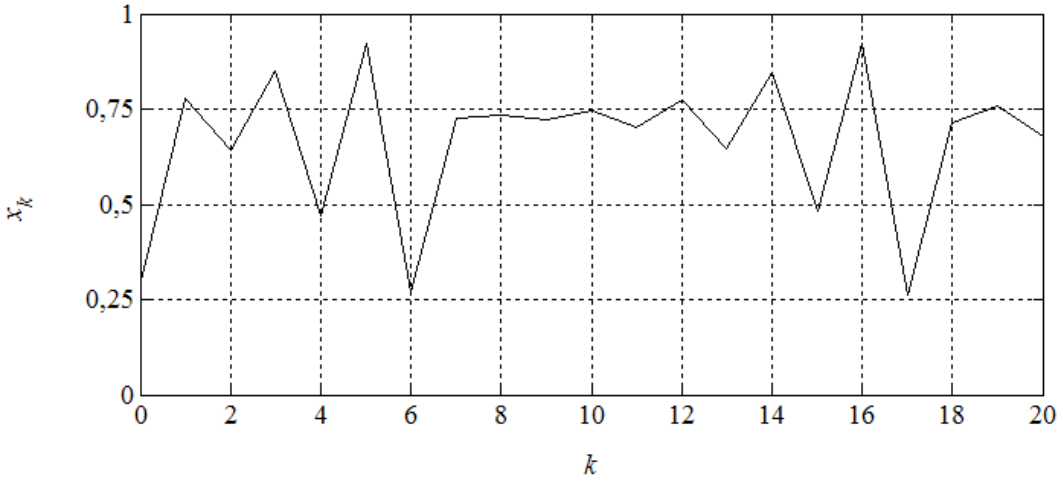


Рис. 1. Реализация квадратичного отображения

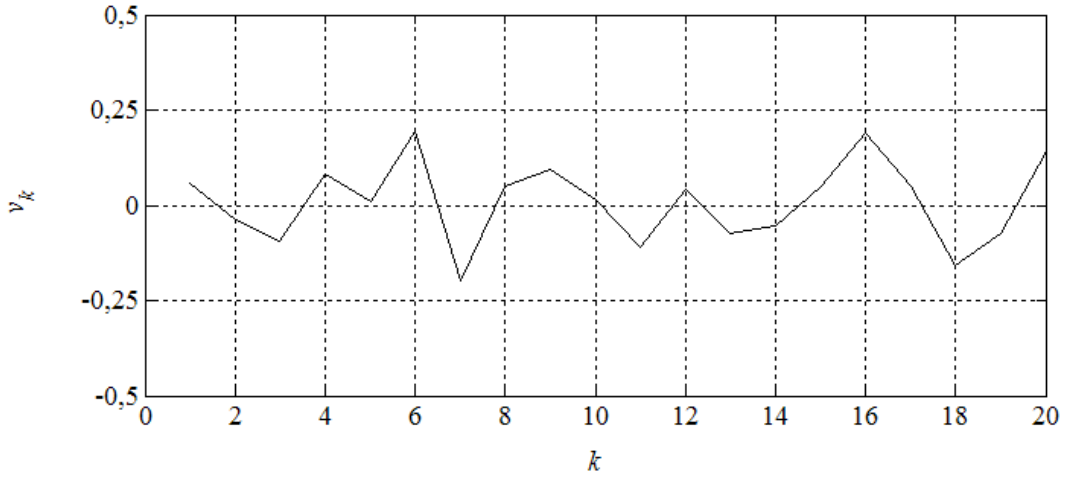


Рис. 2. Ошибки измерений

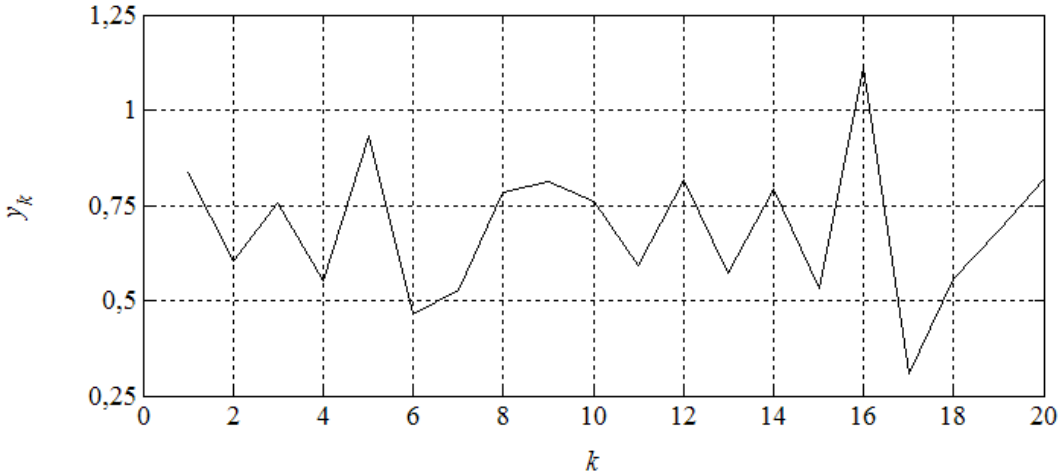


Рис. 3. Зашумленные измерения

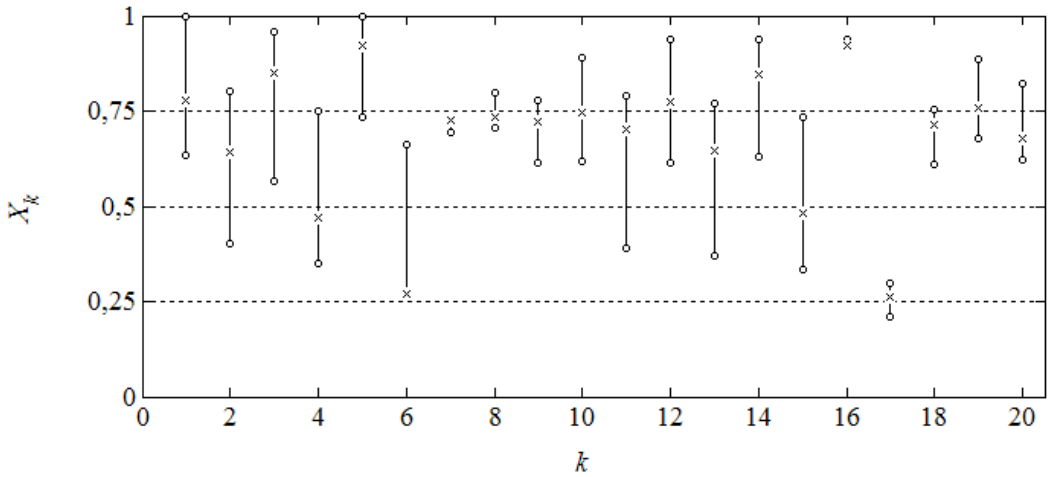


Рис. 4. Информационные множества для переменной состояния
(крестиком показаны истинные значения)

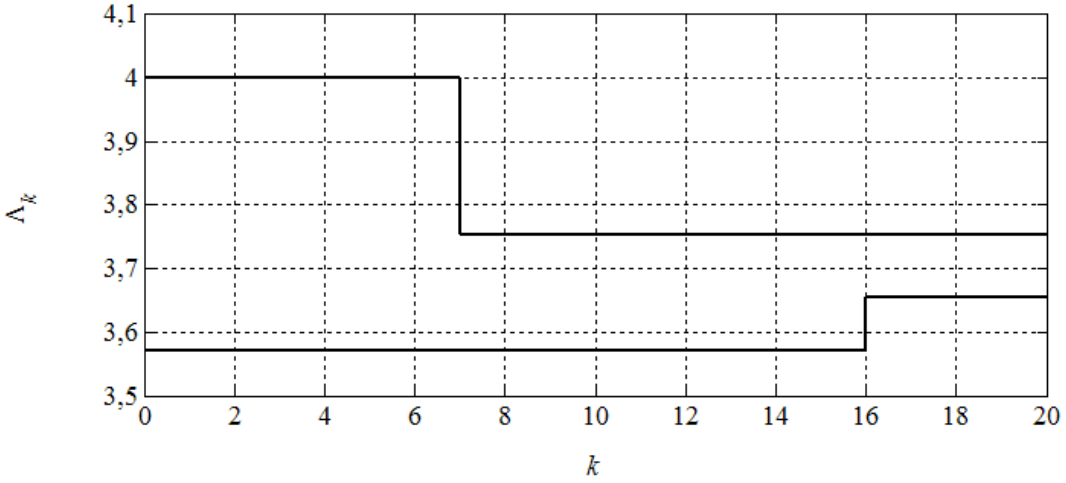


Рис. 5. Множественная оценка параметра

Другим возможным подходом для задания множества поиска параметра является использование автокорреляционной функции (АКФ). Если АКФ $R_x(\tau)$ хаотического процесса x_k, заданного отображением (1), представить (точно или приближенно) в виде явно заданной функции:

$$R_x(\tau) = \varphi(\tau, \boldsymbol{\alpha})$$

и установить зависимость вектора параметров $\boldsymbol{\alpha}$ функции φ от параметра λ, то при решении задачи идентификации можно воспользоваться обратной зависимостью $\lambda(\boldsymbol{\alpha})$ для задания множества поиска. АКФ в данном случае интерпретируется не как статистическая характеристика (оценка которой, найденная по единственной реализации не является состоятельной), а как вспомогательный образ процесса, вычисляемый для конкретной реализации. В ряде случаев можно получить аналитический вид АКФ хаотических процессов [10]. Для большинства же классов хаотических отображений это не удается сделать, однако возможно использовать аппроксимацию АКФ зависимостями, которые используются при корреляционном анализе случайных процессов [11]. Например, АКФ реализации квадратичного отображения (11) можно приближенно описать функцией

$$R_x(\tau) \approx \mathbf{e}^{-\beta\tau} \cos \omega\tau .$$

Библиографический список

1. Гришин, И.В. О решении задач параметрической идентификации процессов с хаотической динамикой / И.В. Гришин, А.С. Шелудько, В.И. Ширяев и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника». – 2008. – № 3. – С. 44–50.

2. Смирнов, Д.А. Метод оценки параметров одномерных отображений по хаотическим временным рядам / Д.А. Смирнов, В.С. Власкин, В.И. Пономаренко // Письма в ЖТФ. – 2005. – Т. 31, № 3. – С. 18–26.

3. Banerjee, A. A comparative analysis of particle swarm optimization and differential evolution algorithms for parameter estimation in nonlinear dynamic systems / A. Banerjee, I. Abu-Mahfouz // Chaos, Solitons & Fractals. – 2014. – Vol. 58. – Pp. 65–83.

4. Елсаков, С.М. О многоэкстремальности в задачах оценивания систем детерминированного хаоса / С.М. Елсаков, В.И. Ширяев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника». – 2009. – № 3. – С. 37–41.

5. Куржанский, А.Б. Задача идентификации – теория гарантированных оценок / А.Б. Куржанский // Автоматика и телемеханика. – 1991. – № 4. – С. 3–26.

6. Ширяев, В.И. Алгоритмы управления динамическими системами в условиях неопределенности / В.И. Ширяев // Мехатроника. – 2001. – № 8. – С. 2–5.

7. Уханов, М.В. Алгоритмы построения информационных множеств для реализации минимаксного фильтра / М.В. Уханов, В.И. Ширяев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2002. – № 3. – С. 19–33.

8. Шелудько, А.С. Совместное использование фильтра Калмана и минимаксного фильтра в задаче оценивания параметров модели хаотического процесса / А.С. Шелудько, В.И. Ширяев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника». – 2012. – № 35. – С. 59–64.

9. Шелудько, А.С. Алгоритм минимаксной фильтрации для одномерного хаотического процесса / А.С. Шелудько, В.И. Ширяев // Мехатроника, автоматизация, управление. – 2014. – № 5. – С. 8–12.

10. Аникин, В.М. Аналитические модели детерминированного хаоса / В.М. Аникин, А.Ф. Голубенцев. – М.: Физматлит, 2007. – 328 с.

11. Анищенко, В.С Корреляционный анализ режимов детерминированного и зашумленного хаоса / В.С. Анищенко, Т.Е. Вадивасова, Г.А. Окрокверцхов, Г.И. Стрелкова // Радиотехника и электроника. – 2003. – Т. 48, № 7. – С. 824–835.

К содержанию

УДК 519.1

ОЦЕНКА ЧИСЛА ДОМИНИРОВАНИЯ В ГРАФАХ ДИАМЕТРА 2

А.Ю. Эвнин

Получена следующая оценка сверху для числа доминирования графа диаметра 2 с n вершинами: $\gamma(G) < \sqrt{n \ln n + 1}$. Показано, существуют графы диаметра 2 со сколь угодно большим числом вершин n, для которых $\gamma(G) = \sqrt{n}$. Приведены также недавние результаты, связанные с числом тотального доминирования в графах диаметра 2.

Ключевые слова: число доминирования графа, диаметр графа, число тотального доминирования, вероятностный метод.

Подмножество $V' \subset V$ вершин графа $G = \langle V, E \rangle$ называется *доминирующим*, если каждая вершина из $V \setminus V'$ смежна с некоторой вершиной из V'. Наименьшую мощность доминирующего множества графа называют *числом доминирования графа* и обозначают $\gamma(G)$. В статье используются терминология и обозначения из [1], в частности, через $\rho(\upsilon)$ обозначается степень вершины υ, а через $\Gamma(\upsilon)$ – множество вершин, смежных с υ.

Известно [2], что задача нахождения числа доминирования является NP-полной, даже если граф является планарным и степени его вершин не больше 3. Поэтому представляют интерес оценки сверху числа доминирования для различных видов графов.

Теорема 1. *Пусть граф G с n вершинами имеет диаметр 2. Тогда:*

$$\gamma(G) < \sqrt{n \ln n + 1}.$$

Доказательство. Так как диаметр графа равен 2, доминирующим множеством будет $\Gamma(\upsilon)$ – множество вершин, смежных с υ, где υ – произвольная вершина графа. Поэтому:

$$\gamma(G) \le \min_{\upsilon \in V} \rho(\upsilon).$$

При $\gamma(G) = 1$ доказываемое утверждение очевидно. Считая, что $\gamma(G) \ge 2$, положим $m = \gamma(G) - 1$. Тогда для любой вершины υ выполняется неравенство $\rho(\upsilon) > m$.

В силу того, что никакое множество из m вершин не является доминирующим, для любых m вершин графа G найдётся вершина, не смежная с этими вершинами. Поскольку всего существует C_n^m множеств из m вершин, найдётся такая вершина u в графе G, для которой существует не менее C_n^m / n неупорядоченных наборов из m вершин, ни с одной из которых эта вершина не смежна. Действительно, обозначив через k_i число m-элементных множеств вершин, не пересекающихся с $\Gamma(\upsilon_i)$, получим $\sum_{i=1}^{n} k_i \ge C_n^m$, откуда $\max k_i \ge C_n^m / n$.

С другой стороны, так как $\rho(u) \geq \gamma(G) = m+1$, для данной вершины u найдётся $n-1-\rho(u) \leq n-m-2$ вершин, не смежных с ней. Из указанных вершин можно составить не более C_{n-m-2}^{m} наборов из m вершин.

Таким образом, выполняется неравенство $C_{n-m-2}^{m} \geq C_{n}^{m}/n$, или $C_{n-m-2}^{m}/C_{n}^{m} \geq 1/n$. Последнее неравенство запишем в виде:

$$\frac{(n-m-2)(n-m-3)\ldots(n-2m-1)}{n(n-1)\ldots(n-m+1)} =$$

$$= \left(1-\frac{m+2}{n}\right)\left(1-\frac{m+2}{n-1}\right)\ldots\left(1-\frac{m+2}{n-m+1}\right) \geq \frac{1}{n}.$$

В полученном произведении первый множитель больше всех последующих и поэтому больше среднего геометрического всех m множителей, которое, в свою очередь, не меньше чем $1/\sqrt[m]{n}$. Получено неравенство:

$$1-\frac{m+2}{n} > \frac{1}{\sqrt[m]{n}}.$$

Прологарифмируем его: $\ln\left(1-\frac{m+2}{n}\right) > -\frac{\ln n}{m}$. Применив (справедливое для $0<x<1$) неравенство $\ln(1-x) < -x$ получим теперь $-\frac{m+2}{n} > -\frac{\ln n}{m}$, или $m^2+2m < n\ln n$, откуда $m < -1+\sqrt{n\ln n+1}$. Таким образом,

$$\gamma(G) = m+1 < \sqrt{n\ln n+1},$$

что и требовалось доказать.

Замечание. Чуть менее точная оценка $\gamma(G) < 1+\sqrt{n\ln n}$ была найдена нами ранее и опубликована в [3] (задача 316).

Покажем теперь, что *для сколь угодно большого n существует граф диаметра 2 с n вершинами, для которого число доминирования равно* $\sqrt{n}$.

Положим $n = t^2$, где $t > 1$, и рассмотрим рёберный граф $G' = L(K_{t,t})$ полного двудольного графа $G = K_{t,t}$ с долями $V_1 = \{u_1, u_2, \ldots, u_t\}$ и $V_2 = \{v_1, v_2, \ldots, v_t\}$.

Для любых двух несмежных рёбер $u_k v_j$ и $u_k v_l$ графа *G* найдётся ребро, смежное им обоим (даже два таких ребра – $u_i v_l$ и $u_k v_j$). Поэтому диаметр графа *G'* равен 2.

Возьмём произвольное совершенное паросочетание *M* в $K_{t,t}$. Любое ребро $u_i v_l$ из *G*, не входящее в *M*, смежно с двумя рёбрами из *M*, покрывающими соответственно вершины u_i и v_j. Значит, вершины, соответствующие рёбрам из *M*, образуют в графе *G'* доминирующее множество мощности $\sqrt{n}$.

С другой стороны, если взять в G' менее чем t вершин, образующих некоторое множество A, то соответствующие им рёбра в G не покроют какую-то вершину $u_i \in V_1$ и какую-то вершину $v_j \in V_2$. Но тогда вершина в G', отвечающая ребру $u_i v_j$, не будет смежна ни с одной вершиной из A. Поэтому множество A не является доминирующим.

Мы доказали, что:

$$\gamma(L(K_{t,t})) = t = \sqrt{n}.$$

Приведём интересные результаты, связанные с числом *тотального доминирования* в графах диаметра 2, которые совсем недавно получила группа математиков из ЮАР во главе с Майклом Хеннингом и Андерсом Йео [4].

Подмножество $V' \subset V$ вершин графа $G = \langle V, E \rangle$ называется *тотально доминирующим*, если каждая вершина из V смежна с некоторой вершиной из V'. Наименьшую мощность тотально доминирующего множества графа называют *числом тотального доминирования* и обозначают $\gamma_t(G)$.

Теорема 2. *Пусть граф* G *с* n *вершинами имеет диаметр 2. Тогда:*

$$\gamma_t(G) < 1 + \sqrt{n \ln n}.$$

При этом если максимальная степень вершины не больше $\sqrt{n}$ *или не меньше* $\sqrt{n} \ln n$, *то* $\gamma_t(G) \le 1 + \sqrt{n}$.

Теорема 3. *Для любого* $\varepsilon > 0$ *существует граф, порядок которого – достаточно большое чётное число n, с числом тотального доминирования*

$$\gamma_t(G) > \left(\frac{1}{4 + \varepsilon} \right) \sqrt{n \ln n}.$$

Техника, с помощью которой доказываются теоремы 2 и 3, основана на связи тотального доминирования в графе с трансверсалями в соответствующем гиперграфе, а также на применении вероятностного метода. Основы вероятностного метода изложены в брошюре [5] и в последней главе книги [6].

В заключение статьи отметим, что наши результаты сходны с результатами Хеннинга и Йео, но получены более простыми методами.

Библиографический список

1. Краснов, М. Л. Вся высшая математика: учебник. Т. 7 / М.Л. Краснов, А.И. Киселёв, Г.И. Макаренко, Е.В. Шикин, В.И. Заляпин, А.Ю. Эвнин. – М.: КомКнига, 2012. – 208 с.

2. Гэри, М. Вычислительные машины и труднорешаемые задачи / М. Гэри, Д. Джонсон. – М.: Мир, 1982. – 416 с.

3. Эвнин, А.Ю. Задачник по дискретной математике / А.Ю. Эвнин. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 1998. – 124 с.

4. Desormeaux, W.J. Total Domination in Graphs with Diameter 2 / W.J. Desormeaux, T.W. Haynes, M.A. Henning, A. Yeo // Journal of Graph Theory. – 2013. – Vol. 75, Issue 1. – pp. 91–103.

5. Райгородский, А.М. Вероятность и алгебра в комбинаторике / А.М. Райгородский. – М.: МЦНМО, 2008. – 48 с.

6. Айгнер, М. Доказательства из Книги. Лучшие доказательства со времён Евклида до наших дней / М. Айгнер, Г. Циглер. – М.: Мир, 2006. – 256 с.

К содержанию

УДК 517.984.64

ИССЛЕДОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ОДНОГО УРАВНЕНИЯ СОБОЛЕВСКОГО ТИПА

П.О. Москвичёва

В данной работе исследована устойчивость нулевого решения обобщенного уравнения Хоффа, заданного на конечном, связном и ориентированном графе с условиями непрерывности и баланса потоков в его вершинах.

Ключевые слова: уравнение соболевского типа, фазовое пространство, граф, функция Ляпунова.

Уравнение Хоффа [1]:

$$(\lambda-\lambda_0)u_t+u_{xxt}=\alpha_1 u+\alpha_2 u^3+\ldots+\alpha_n u^{2n-1}, n\in N, \qquad (1)$$

моделирует динамику выпучивания двутавровой балки, находящейся под постоянной нагрузкой. Начально-краевые задачи для уравнения (1) первым начал изучать Н.А. Сидоров [2] со своими учениками [3], [4]. Они первыми обнаружили феномен принципиальной неразрешимости этих задач при произвольных начальных данных. В [5] было начато исследование множества допустимых начальных данных, понимаемое как фазовое пространство уравнения (1). В [6] было показано, что фазовым пространством уравнения (1) служит простое банахово C^∞-многообразие. В работе [7] было исследовано фазовое пространство обобщенного уравнения Хоффа.

Пусть $\mathrm{G}=(\mathrm{V};\mathrm{E})$ – конечный связный ориентированный граф, где $\mathrm{V}=\{V_i\}$ – множество вершин, а $\mathrm{E}=\{E_j\}$ – множество ребер, причем каждому ребру E_j поставлены в соответствие два положительных числа $l_j, d_j\in\mathrm{R}_+$, которые в контексте нашей задачи будут иметь физический смысл длины и площади поперечного сечения ребра соответственно. На каждом ребре E_j зададим обобщенное уравнение Хоффа:

$$\left(\lambda_j - \lambda_{0j}\right)u_{jt} + u_{jxxt} = \alpha_{1j}u_j + \alpha_{2j}u_j^3 + \ldots + \alpha_{nj}u_j^{2n-1}, n \in N, \quad (2)$$

где параметры $\lambda_j \in \mathrm{R}_+$ соответствуют нагрузке на балку, а параметры $\alpha_{sj} \in R, s = 1, 2, \ldots n$ характеризуют свойства материала *j*-ой балки; переменные $x \in (0; l_j), t \in R.$

Для уравнений (1) в каждой вершине графа зададим условия

$$u_j(0,t) = u_k(0,t) = u_m(l_m,t) = u_p(l_p,t), \quad (3)$$

$$\sum_j d_j u_{jx}(0,t) - \sum_m d_m u_{mx}(l_m,t) = 0, \quad (4)$$

где $E_j, E_k \in E^{\alpha}(V_i), E_m, E_p \in E^{\omega}(V_i), t \in \mathrm{R}$. Здесь через $E^{\alpha(\omega)}(V_i)$ обозначено множество ребер с началом (концом) в вершине V_i. Кроме того, искомые компоненты должны удовлетворять начальным условиям Коши:

$$u_j(x,0) = u_{j0}(x), \qquad x \in (0, l_j). \quad (5)$$

Начально-краевая задача (2)–(5) описанная дифференциальными уравнениями с частными производными, заданными на графе и представляет собой модель для изучения поведения нагруженной конструкции из двутавровых балок.

Статья кроме вводной части содержит два параграфа и список литературы. В п.1 содержится редукция задачи (2)–(5) к задаче Коши:

$$u(0) = u_0 \quad (6)$$

для абстрактного уравнения соболевского типа:

$$L\dot{u} = Mu + N(u), \quad (7)$$

где L, M – линейные, а N — нелинейный операторы, определенные на специально подобранных функциональных пространствах.

Результаты п.1 были подробно изложены в [7]. П.2 посвящен исследованию устойчивости стационарного решения $O = (0,0,...0,...)$ задачи (2)–(5) в терминах потока и функций Ляпунова. Все абстрактные результаты являются обобщениями соответствующих результатов гл. 4 [8]. Их приложения к задаче (2)–(5) представляют главное содержание статьи.

Фазовое пространство. Введем в рассмотрение гильбертово пространство:

$$L_2(G) = \{g = (g_1, g_2, ...g_j, ...) : g_j \in L_2(0, l_j)\}$$

со скалярным произведением и нормой соответственно:

$$\langle g, h \rangle = \sum_{E_j \in \mathrm{E}} d_j \int_0^{l_j} d_j(x) h_j(x) dx \qquad \|g\|^2 = \sum_{E_j \in \mathrm{E}} d_j \int_0^{l_j} d_j^2 dx$$

и гильбертово пространство $U = \{u = (u_1, u_2, ...u_j, ...) : u_j \in W_2^1(0, l_j),$ и выполнено условие (3) со скалярным произведением:

$$[u,v]=\sum_{E_j\in \mathrm{E}} d_j\int_0^{l_j}(u_{jx}v_{jx}+u_jv_j)dx.$$

Формулой $\langle Au,v\rangle=\sum_j d_j\int_0^{l_j}(u_{jx}v_{jx}+a_ju_jv_j)dx,\quad u,v\in U$ определим оператор $A:U\to F,$ где $a_j\in R_+$ – произвольные константы. Теперь построим операторы $L,M:U\to F$

$$\langle Lu,v\rangle=\sum_j d_j(\lambda_j-\lambda_{0j}+a_j)\int_0^{l_j}u_jv_jdx-\langle Au,v\rangle,$$

$$\langle Mu,v\rangle=\sum_j \alpha_{1j}d_j\int_0^{l_j}u_jv_jdx.$$

Очевидно, что операторы L,M линейны и непрерывны, причем оператор L фредгольмов (т.е. $\operatorname{ind}L=0$), а оператор M компактен. Теперь построим оператор:

$$\langle N(u),v\rangle=\sum_j d_j\Big(\alpha_{2j}\int_0^{l_j}u_j^3v_jdx+\ldots+\alpha_{nj}\int_0^{l_j}u_j^{2n-1}v_jdx\Big)$$

и убедимся, что он действует из пространства U в пространство F. Для этого построим вспомогательное пространство:

$$L_{2n}(G)=\{g=(g_1,g_2,\ldots g_j,\ldots):g_j\in L_{2n}(0,l_j)\}.$$

Очевидно, имеют место плотные и непрерывные вложения:

$$U\to L_{2n}(G)\to L_2(G).$$

Обозначим через $L^*_{2n}(G)$ сопряженное к $L_{2n}(G)$ относительно двойственности $\langle\cdot,\cdot\rangle$ пространство. Пространство $L^*_{2n}(G)$ топлинейно изоморфно пространству:

$$L_{\frac{2n}{2n-1}}(G)=\left\{g=(g_1,g_2,\ldots g_j,\ldots):g_j\in L_{\frac{2n}{2n-1}}(0,l_j)\right\}.$$

Норма пространства $L_p(G)$ задается следующим образом:

$$\|u\|_p=\sum_j d_j\left(\int_0^{l_j}|u_j|^p\,dx\right)^{\frac{1}{p}}.$$

Поэтому в силу неравенства Гельдера и непрерывности вложений:

$$L_{2n}(0,l_j)\to L_{2s}(0,l_j)\to L_2(0,l_j),\quad s=1,2,\ldots,n$$

получим $|\langle N(u),v\rangle|\le c_1\max_j\{|\alpha_{2j}|\}\|u\|_{2n}^3\|v\|_{2n}+\ldots+c_{n-1}\max_j\{|\alpha_{nj}|\}\|u\|_{2n}^{2n-1}\|v\|_{2n},$ где константы $c_i\in R_+, i=1,\ldots,n-1$ и не зависят ни от u ни от v, то есть действие оператора $N:L_{2n}(G)\to L_{\frac{2n}{2n-1}}(G)$ имеет место. Действие оператора $N:U\to F$

имеет место в силу вложения $U \to L_{2n}(G)$, из которого следует вложение $L_{\frac{2n}{2n-1}}(G) \to F$. Кроме того, нетрудно показать, что при любых $\alpha_{2j}, \alpha_{3j}, ..., \alpha_{nj} \in R$ оператор $N \in C^{\infty}(U, F)$.

Итак, мы редуцировали задачу (2)–(5) к задаче (6)–(7). Теперь исследуем фазовое пространство задачи (2)–(5).

Вектор-функцию $u \in C^{\infty}(R, U)$ назовем *решением уравнения* (7), если она удовлетворяет этому уравнению.

Определение 1. Множество $P \subset U$ называется *фазовым пространством уравнения* (7), если:

(i) любое решение $u = u(t)$ лежит в P поточечно, т.е. $u(t) \in P, t \in R$;

(ii) при любом $u_0 \in P$ существует единственное решение задачи Коши (6), (7).

Выберем в ядре $\ker L$ ортонормированный (в смысле $\langle \cdot, \cdot \rangle$ базис):

$$\ker L = \operatorname{span}\{\chi_k : k = 1, 2, ... l\},$$

и отождествим его с базисом $\operatorname{co}\ker L$. Так как $U^0 = \ker L$, то все решения уравнений (2) будут с необходимостью лежать во множестве:

$$M = \{u \in U : \langle Mu + N(u), \chi_k \rangle = 0, k = 1, 2, ... l\}$$

как траектория.

Теорема 1. *Пусть выполнено*

(i) $\ker L = \{0\}$. *Тогда фазовым пространством уравнения (7) служит все пространство* U.

(ii) $\ker L \neq \{0\}$, *все коэффициенты* $\alpha_{kj} \neq 0$, $k = 1, ... n$ *одного знака. Тогда фазовым пространством уравнения (7) служит простое многообразие* M.

Устойчивость. Пусть $\mathbf{V}$ — нормированное пространство. Говорят, что на $\mathbf{V}$ задан *поток*, если существует отображение S такое, что для любого $u \in \mathrm{V}$ и некоторого $\tau = \tau(u) \in R_+$ выполняются соотношения:

(i) $S = S(t, u) \in \mathbf{V}$, при всех $t \in (-\tau; \tau)$; $S(0, u) = u$;

(ii) $S(t + s, u) = S(t, S(s, u)) \in \mathbf{V}$ при всех $t + s \in (-\tau; \tau)$.

Точка такая, что $S(t, u) = u$, $t \in R$, называется *стационарной точкой* потока S.

Определение 2. Стационарная точка u потока S называется:

(i) *устойчивой* (по Ляпунову), если для любой окрестности $\mathbf{O}_u$ точки u существует (возможно, другая) окрестность $\mathbf{O}'_u$ той же точки, что $S(t, v) \in \mathbf{O}'_u$ при всех $v \in \mathbf{O}_u$ и $\mathrm{t} \in \mathrm{R}_+$;

(ii) *асимптотически устойчивой* (по Ляпунову), если она устойчива и для любой точки v из некоторой окрестности O_u точки u выполняется $S(t,v) \to u$ при $t \to \infty$.

Определение 3. Функционал $V \in C(U,R)$ называется *функционалом Ляпунова* потока S, если:

$$\dot{V}(u) = \overline{\lim_{t \to 0+}} \frac{1}{t}(V(S(t,u)) - V(u)) \le 0$$

для всех $u \in U$.

Теорема 2. *Пусть u – стационарная точка потока S на U. Если для потока S существует функционал Ляпунова такой, что:*

(i) $V(u) = 0$;

(ii) $V(v) \ge \varphi(\|v-u\|)$;

где φ – строго возрастающая непрерывная функция такая, что $\varphi(0) = 0$ и $\varphi(r) > 0$ при $r \in R_+$, то точка u устойчива.

Теорема 3. *Пусть выполнены условия теоремы 2, и существует строго возрастающая непрерывная функция ψ такая, что $\psi(0) = 0$ и $\psi(r) > 0$ при $r \in R_+$, причем $\dot{V}(u) \le -\psi(\|v-u\|)$,* тогда точка u *асимптотически устойчива.*

Применим теоремы 2 и 3 к исследованию устойчивости задачи (2)–(5). Рассмотрим два случая. Пусть сперва $\lambda_j \ne \lambda_{oj}$. В этом случае задача (2)–(5) порождает поток на банаховом пространстве U. Снабдив это пространство нормой $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{L_4}$, превратим его в нормированное. Определив функционал Ляпунова как:

$$V(u) = \sum_{E_j \in E} d_j \int_0^{l_j} (u_{jx}^2 + (\lambda_{0j} - \lambda_j) u_j^2) dx,$$

мы сразу получим выполнение условия (i) теоремы 2. Далее, в силу непрерывности вложения $U \to L_4(G)$ мы имеем $V(u) \ge (c\|u\|)^2$, где c – константа вложения. Таким образом, условие (ii) тоже выполнено. Наконец заметим, что в силу эквивалентности нормы в $L_4(G)$ имеем:

$$\sum_{E_j \in E} d_j \int_0^{l_j} u_j^4 dx \ge (c_1 \|u\|_{L_4})^4.$$

Поэтому $\dot{V}(u) \le -2\alpha(c_1\|u\|)^4$, что показывает выполнение условия теоремы 3.

В случае $\lambda_j = \lambda_{oj}$ можно привести к уравнению, которое определяет поток на $U^1 = \{u \in U : \langle u, \varphi \rangle = 0\}$. Определив функционал Ляпунова как:

$$V(u) = \sum_{E_j \in E} d_j \int_0^{l_j} u_{1jx}^2 dx,$$

мы получим выполнение условия (i) теоремы 2. Кроме того, $V^{1/2}$ определяет норму на U^1, эквивалентную индуцированной из U. Значит, $V(u) \geq (c\|u\|)^2$ в силу теоремы вложения. Таким образом доказана.

Теорема 4. *(i) При любых* $\alpha_{nj} \in R_+$ *и* $\lambda_j \in [0, \lambda_{0j})$ *решение* $O = (0, 0, \ldots 0, \ldots)$ *задачи (2)–(4) асимптотически устойчиво*.

(ii) При любых $\alpha_{nj} \in R_+$ *и* $\lambda_j = \lambda_{0j}$ *решение* $O = (0, 0, \ldots 0, \ldots)$ *задачи (2)–(4) устойчиво*.

Мы доказали асимптотическую устойчивость задачи (2)-(5) при $\lambda_j \in [0, \lambda_{oj})$ и устойчивость при $\lambda_j = \lambda_{oj}$. Параметр λ_j характеризует нагрузку, поэтому он неотрицателен. Значит, λ_{oj} выступает здесь как предельная нагрузка на j-ю балку, при которой она еще устойчива.

Библиографический список

1. Hoff, N.J. Creep buckling / N.J. Hoff // Aeron. Quarterly 7, 1956, №1, P. 1–20.

2. Сидоров, Н.А. Общие вопросы регуляризации в задачах теории ветвления / Н.А. Сидоров // Иркутск: Изд-во Иркутского гос. ун-та, 1982.

3. Сидоров, Н.А. О применении некоторых результатов теории ветвлений при решении дифференциальных уравнений / Н.А. Сидоров, О.А. Романова // Дифференциальные уравнения. – 1983. – Т.19, №9. – С. 1516–1526.

4. Сидоров, Н.А. Обобщенные решения дифференциальных уравнений с фредгольмовым оператором при производной / Н.А. Сидоров, М.В. Фалалеев // Дифференц. Уравнения. – 1987. – Т.23, № 4. – С. 726–728.

5. Свиридюк, Г.А. Квазистационарные траектории полулинейных динамических уравнений типа Соболева / Г.А. Свиридюк // Изв. РАН. Сер. матем. – 1993. – Т.57, №3. – С. 192–207.

6. Свиридюк, Г.А. Фазовое пространство начально-краевой задачи для уравнения Хоффа / Г.А. Свиридюк, В.О. Казак // Мат. заметки. – 2002. – Т. 71, №2. – С. 292–297.

7. Баязитова, А.А. Обобщенная задача Штурма-Лиувилля на графе / А.А. Баязитова // Воронежская зимняя математическая школа им. С.Г. Крейна — 2010.: тез. докл. — Воронеж, 2010. – С. 18–19.

8. Геометрическая теория полулинейных параболических уравнений / Д. Хенри. – М.: Мир, 1985.

К содержанию

УДК 517.9

О МОДЕЛЯХ СОБОЛЕВСКОГО ТИПА В ПРОСТРАНСТВЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ K-ФОРМ НА СФЕРЕ

Д.Е. Шафранов

Исследована разрешимость задачи Коши для абстрактных моделей соболевского типа в пространствах гладких k-форм, определенных на сфере. С помощью теории Г.А. Свиридюка и теории гармонических полей Ходжа – Кодаиры доказана разрешимость для любого начального значения из фазового пространства. Решения представимо через аналитические разрешающие группы операторов в банаховых пространствах.

Ключевые слова: модели соболевского типа; дифференциальные формы; римановы многообразия; фазовое пространство.

Введение

Модели, описываемые уравнениями соболевского типа вида

$$L\dot{u} = Mu + f\ , \tag{1}$$

т.е. не разрешенные относительно производной по времени известны очень давно, еще с работ А. Пуанкаре, но систематически изучаются, начиная со статьи С.Л. Соболева [1]. Такими моделями в различных постановках занимается Челябинская научная школа под руководством Г.А. Свиридюка [2–3].

В этой статье рассмотрим линейные однородные модели:

$$L\dot{u} = Mu\ , \tag{2}$$

задаваемые с помощью линейных операторов L, M и с функцией $f \equiv 0$ в пространстве гладких дифференциальных k-форм, определенны на сфере Ω_n. Для изучения разрешимости задачи Коши:

$$u(0) = u_0 \tag{3}$$

используются теория Г.А. Свиридюка об относительно ограниченных оператора [2] и теория Ходжа – Кодаиры о гармонических полях [5].

Статья состоит из введения, 2 пунктов и библиографического списка. В первом пункте даны предварительные сведения из теорий Г.А. Свиридюка и теории гармонических полей Ходжа – Кодаиры. Во втором пункте приведен основной результат и пример для модели Баренблатта – Желтова – Кочиной.

Предварительные сведения. Пусть U и F банаховы пространства и операторы $L, M \in \mathcal{L}(U, F)$ – линейны и ограниченны. Введем в рассмотрение L-резольвентное множество $\rho^L(M) = \{\mu \in \mathbf{C} : (\mu L\text{-}M)^{-1} \in \mathcal{L}(F, U)\}$ и L-спектр $\sigma^L(M) = \mathbf{C} \setminus \rho^L(M)$ оператора M. Оператор-функцию $(\mu L - M)^{-1}$

будем называть L-резольвентой оператора M, а оператор-функции $R_\mu^L(M)=(\mu L-M)^{-1}L$ и $L_\mu^L(M)=L(\mu L-M)^{-1}$ правой и левой L-резольвентой оператора M соответственно.

Определение 1. *Оператор M называется ограниченным относительно оператора L (короче, (L,σ)-ограниченным), если $\exists a\in\mathrm{R}_+\ \forall\mu\in\mathrm{C}\,(|\mu|>a)$. Оператор M называется (L,p)-ограниченным, если он является (L,σ)-ограниченным и ∞ полюс порядка $p\in\{0\}\cup\mathbf{N}$ L-резольвенты оператора M.*

Пусть $\rho^L(M)\neq\varnothing$. Уравнение (2) редуцируется к паре эквивалентных ему уравнений

$$R_{\delta_1}^L(M)\dot{u}=(\delta_1 L-M)^{-1}Mu, \tag{4}$$

$$L_{\delta_1}^L(M)\dot{f}=M(\delta_1 L-M)^{-1}f, \tag{5}$$

где $\delta_1\in\rho^L(M)$.

Оба уравнения будем рассматривать как конкретные интерпретации уравнения:

$$A\dot{v}=Bv, \tag{6}$$

где операторы $A,B\in\mathcal{L}(W)$, а W – некоторое банахово пространство.

Решением уравнения (6) называется вектор-функция $v\in C^\infty(\mathbf{R},W)$ удовлетворяющая уравнению (6).

Определение 2. *Отображение $V\in C^\infty(\mathbf{R},\mathcal{L}(W))$ называется разрешающей группой уравнения (6), если:*

(i) $V^sV^t=V^{s+t}$ для любых $s,t\in\mathbf{R}$;

(ii) для любого $v_0\in W$ вектор-функция $v(t)=V^tv_0$ является решением уравнения (6).

Теорема 1. [2] *Пусть оператор M (L,p)-ограничен. Тогда существуют аналитические разрешающие группы уравнений (4) и (5), представимые интегралами Данфорда – Тейлора:*

$$U^t=\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma R_\mu^L(M)e^{\mu t}d\mu, \tag{7}$$

$$F^t=\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma L_\mu^L(M)e^{\mu t}d\mu, \tag{8}$$

где контур Γ – ограничивает область, содержащую $\sigma^L(M)$.

Группы (7), (8) имеют единицы:

$$U^0=\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma R_\mu^L(M)d\mu=P,\ F^0=\frac{1}{2\pi i}\int_\Gamma L_\mu^L(M)d\mu=Q. \tag{9}$$

Обозначим ядра и образы этих полугрупп $\ker P = \mathsf{U}^0, \operatorname{im} P = \mathsf{U}^1$, $\ker Q = \mathsf{F}^0$, $\operatorname{im} Q = \mathsf{F}^1$.

Определение 3. *Множество $P \in W$ называется фазовым пространством уравнения (6), если:*

(i) любое решение $v = v(t)$ лежит в P, т.е. $v(t) \in P, \forall t \in (-T, T)$;

(ii) для любого $v_0 \in P$ существует единственное решение $v \in C^\infty((-T,T), W)$ задачи Коши $v(0) = v_0$ для уравнения (6).

Пусть Ω_n является гладким компактным ориентируемым римановым многообразием без края. Пространства гладких дифференциальных k-форм, определенных на многообразии Ω_n обозначим $H_k = H_k(\Omega_n), k = 0,1,\ldots,n$. В пространствах H_k определен оператор Лапласа – Бельтрами $\Delta = +d\delta + \delta d$, где d – оператор внешнего дифференцирования k-форм, $\delta = (-1)^{n(k+1)+1} * d *$ – сопряженный к оператору d, а $*$ – оператор Ходжа. Положим $H_{kd} = d\delta[H_k], H_{k\delta} = \delta d[H_k], H_{k\Delta} = \ker \Delta,\ k = 0,1,\ldots,n$.

Определим формулой:

$$(\xi, \eta)_0 = \int \xi \wedge *\eta, \text{ где } \xi, \eta \in H_k, \tag{10}$$

скалярное произведение в пространстве $H_k, k = 0,1,\ldots,n$, а соответствующую норму обозначим $\|\circ\|_0$. Пополнение пространства H_k по этой норме обозначим H_k^0. Пополнение линеалов H_{kd}, $H_{k\delta}$, $H_{k\Delta}$ по ней обозначим соответственно через H_{kd}^0, $\mathrm{H}_{k\delta}^0$, $\mathrm{H}_{k\Delta}^0$.

Теорема 2. [4] (теорема Ходжа – Кодаиры) *Для любого $k = 0,1,\ldots,n$ существует расщепление пространства H_k^0 в прямую ортогональную сумму:*

$$\mathrm{H}_k^0 = \mathrm{H}_{kd}^0 \oplus \mathrm{H}_{k\delta}^0 \oplus \mathrm{H}_{k\Delta}^0, \tag{11}$$

причем пространство $\mathrm{H}_{k\Delta}^0$ конечномерно.

Введем формулами:

$$\begin{aligned} (\xi, \eta)_1 &= (-\Delta\xi, \eta)_0 + (\xi, \eta)_0, \\ (\xi, \eta)_2 &= (\Delta\xi, \Delta\eta)_0 + (\xi, \eta)_1, \end{aligned} \tag{12}$$

еще два скалярных произведения пространстве $H_k, k = 0,1,\ldots,n,$ а соответствующие нормы обозначим $\|\circ\|_1$ и $\|\circ\|_2$ соответственно. Пополнение пространства H_k по этим нормам обозначим $\mathrm{H}_k^1, \mathrm{H}_k^2$.

Рассмотрим в H_k^0 ортопроектор P_Δ, $\ker P_\Delta = \mathrm{H}_{k\Delta}^0$. Он будет ортопроектором и в $\mathrm{H}_k^1, \mathrm{H}_k^2$, причем в силу конечномерности их ядра совпадут, и $\mathrm{H}_{k\Delta}^0 = \mathrm{H}_{k\Delta}^1 = \mathrm{H}_{k\Delta}^2$. Положим $\mathsf{H}_k^l = (\mathrm{H}_{k\Delta}^l)^\perp, l = 0,1,2$ (т.е. ортогональное дополнение к гармоническим k-формам).

Пространства $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{i}, i=1,2$ – банаховы (их гильбертова структура нас в дальнейшем не интересует), причем в силу непрерывности и плотности вложений $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{0} \subset \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{1} \subset \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{2}$, а также конечности ранга оператора $P_{k\Delta}$ и $k=0,1,\ldots,n$ справедливо следующее.

Следствие. [5] *Для любого* $k=0,1,\ldots,n$ *существуют расщепления пространств:*

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{i} = \mathbf{H}_{\mathbf{k}\Delta}^{i1} \oplus \mathbf{H}_{\mathbf{k}\Delta}, \tag{13}$$

где $\mathbf{H}_{\mathbf{k}\Delta}^{i1} = \mathbf{I} - P_{k\Delta}\mathbf{H}_{\mathbf{k}\Delta}, i=1,2$.

Основные результаты. Пусть Ω_n – n-мерная сфера без края.

Лемма 1. Сфера Ω_n является гладким компактным ориентируемым римановым многообразием без края.

Определим пространства:

$$\tilde{U} = \bigoplus_{k=0}^{n} \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{2}, \tilde{F} = \bigoplus_{k=0}^{n} \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{0}. \tag{14}$$

Пространства $\tilde{U}$ и $\tilde{F}$ вещественные векторные расслоения на многообразии Ω_n. Обозначим $U = C^{\infty}(\tilde{U})$, $F = C^{\infty}(\tilde{F})$ векторные пространства гладких сечений $\tilde{U}, \tilde{F}$ соответственно.

Пространства U и F разлагаются в ортогональные суммы:

$$F = \operatorname{im} L \oplus \ker L^{*} = \mathbf{F}^{0} \oplus \mathbf{F}^{1}, \tag{15}$$

$$U = \operatorname{im} L^{*} \oplus \ker L = \mathbf{U}^{0} \oplus \mathbf{U}^{1}. \tag{16}$$

Определение 4. *Линейный дифференциальный оператор* L *порядка* l, *действующий из* $\tilde{U}$ *в* $\tilde{F}$, *– это линейное отображение из* U *в* F. *Оператор* L *называется эллиптическим, если он эллиптический локально (в каждой тривиализации).*

Лемма 2. *Спектр оператора* L дискретен, конечнократен и сгущается только к точке $+\infty$.

Разрешимость задачи Коши:

$$u(0) = u_0, \tag{17}$$

для модели соболевского типа:

$$L\dot{u} = Mu \tag{18}$$

показана в следующей теореме.

Теорема 3. *Пусть* L *дифференциальный эллиптический и самосопряженный оператор порядка* l, *а оператор* M (L,p)*-ограничен, тогда для любого* $u_0 \in \mathbf{U}^0$ *существуют аналитические разрешающие группы разрешающие задачу Коши (17) для уравнения (18).*

Приведем идею доказательства. Дифференциальный оператор L имеет формально сопряженный L^*. Пространства $\ker L, \ker L^*$ конечномерны.

Откуда и из (15), (16) следует, что L – фредгольмов. Тогда следуя теореме 1 существуют разрешающие группы уравнения (19). Фазовым пространством уравнения будет $P = \mathbf{U}^0$.

Пример. *В качестве примера рассмотрим задачу Коши:*

$$u(0) = u_0, \tag{19}$$

для уравнения Баренблатта – Желтова – Кочиной:

$$(\lambda + \Delta)u_t = \alpha \Delta u. \tag{20}$$

Операторы $L = \lambda + \Delta$ *и* $M = \alpha\Delta$ *удовлетворяют, в пространствах дифференциальных k-форм, описанных в пункте 1 в силу теоремы Атьи – Зингера условиям теоремы 3 [6].*

Библиографический список

1. Соболев, С.Л. Об одной новой задаче математической физики / С.Л. Соболев // Известия АН СССР, сер. Математическая. – 1954. – Т. 18. – С. 3–50.

2. Sviridyuk, G.A. Linear Sobolev Type Equations and Degenerate Semigroups of Operators / G.A. Sviridyuk, V.E. Fedorov. – Utrecht etc.: VSP, 2003. – 268 p.

3. Свиридюк, Г.А. Неклассические модели математической физики / Г.А. Свиридюк, С.А. Загребина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – Вып. 14. – № 40 (299). – С. 7–18.

4. Уорнер, Ф. Основы теории гладких многообразий и групп Ли / Ф. Уорнер. – М.: Мир, 1987. – 302 с.

5. Шафранов, Д.Е. Уравнение Хоффа как модель упругой оболочки / Д.Е. Шафранов, А.И. Шведчикова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – Вып. 12. – № 18 (277). – С. 77–81.

6. Свиридюк, Г.А. Задача Коши для уравнения Баренблатта – Желтова – Кочиной на гладком многообразии / Г.А. Свиридюк, Д.Е. Шафранов // Вестник Челябинского ун-та, Сер. Математика, механика, информатика. – Челябинск, 2003. – № 3. – С. 171–177.

К содержанию

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

УДК 538.9+544.27

ФОРМИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КОДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗЫ РАСПЛАВОВ

А.Г. Воронцов

Методами компьютерного моделирования проведено исследование механизмов формирования жидкой фазы (расплава) металла из газовой фазы. Проведено исследование двух механизмов превращения: однофазного (при движении по термодинамическому пути вокруг критической точки жидкость – пар) и гетерофазного (рост малых капель жидкости). По результатам анализа структурных характеристик системы, установлена область параметров на фазовой диаграмме (в случае однофазного механизма), которая может считаться границей конденсированных состояний. В случае гетерофазного механизма установлена область размеров атомных комплексов, которые могут быть отнесены к конденсированной фазе.

Ключевые слова: теория жидкости; конденсация; структурные переходы в жидкости.

Развитие технологий привело к тому, что для экспериментального изучения и использования стали доступны вещества, находящиеся в экстремальных условиях: температурах до нескольких тысяч Кельвин и давлениях в тысячи атмосфер. Эксплуатация материалов в таких условиях делает актуальной задачу теоретического описания и прогнозирования их свойств. На рис. 1 схематически изображена область однофазных состояний Жидкость – Флюид – Газ (Ж-Ф-Г), огибающая критическую точку, и вызывающая интерес из-за возможности плавного изменения свойств системы в широких пределах (путь 1 на рис. 1): от свойств, присущих жидкостям до свойств, характерных для газов. Эта область слабо изучена и теоретически и экспериментально, особенно в случае металлических систем, для которых критические температуры превышают 2 кК.

Существование критической точки жидкость – пар свидетельствует об отсутствии качественных различий между жидкостью и газом, что подтверждается возможностью единого аналитического описания этих состояний уравнением Ван-дер-Ваальса. Однако, в начале XX-го века стало понятно, что в жидкости расположение атомов, в отличие от газа, не является случайным, в ней существует ближний порядок. Это обстоятельство, а также то, что многие свойства плотной жидкости (плотность, сжимаемость и др.) близки к свойствам соответствующей твердой фазы, поставило под сомнение представление о сугубо количественном характере различия между жидкостью и газом.

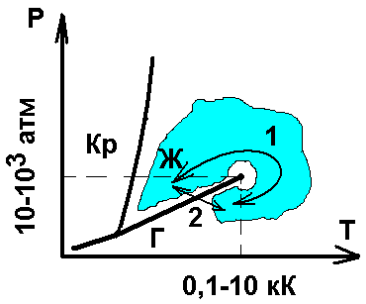


Рис. 1. Фазовая диаграмма металлических систем (схематично).
Стрелки – два пути перехода из газовой фазы в жидкую:
1 – однофазный путь, 2 – гетерофазный путь (рост малых капель)

Первостепенной задачей при формировании единой концепции строения текучих фаз (Ж-Ф-Г), является описание структурных изменений и выявление возможных фазовых переходов. Обсуждение множества экспериментальных данных по переходам жидкость – жидкость содержится в обзоре Бражкина [1]. В нем отмечается, что определение типа большинства из них пока затруднено. Переходы в жидкости, при сосуществовании обеих жидкостей с кристаллической фазой, можно рассматривать, как «унаследованные» от переходов в кристаллах, т.е. они являются аналогом аллотропных кристаллических состояний, количество которых нередко достигает 4–5. Такие переходы наблюдаются при высоких давлениях и объясняются развивающимися процессами гибридизации атомных орбиталей, в результате которых, качественно изменяется энергетика атомных взаимодействий. Менее изученным является вопрос о существовании качественных изменений в жидкости при равновесии ее с паром. В данном случае исключена возможность «наследования» свойств, т.к. пар – абсолютно неупорядоченная среда, в которой отсутствуют качественные измения. Поэтому переход жидкость – рыхлая жидкость должен быть индивидуальной особенностью жидкой фазы. Такой переход был экспериментально зафиксирован для серы. Его объяснение основано на предположении существования полимерной жидкости шестиатомных колец при низких температурах и молекулярной жидкости при высоких температурах [2]. Однако модель, предложенную для серы, нельзя применить к простым жидкостям с ненаправленным, ненасыщаемым взаимодействием атомов (инертные газы, металлы), поэтому вопрос о существовании переходов в них до сих пор остаётся дискуссионным.

На данную проблему обратили внимание Ландау и Зельдович [3], предсказав возможность фазового перехода в проводящей жидкости металл–неметалл. Несмотря на экспериментальное подтверждение этой гипотезы, задача теоретического описания структурных изменений, сопутствующих переходу металл–неметалл, до сих пор не решена. Трудности решения данной задачи связаны с экстремальными температурами (более 10^3 К), и невозможностью разделить влияние разных факторов на исследуемые системы.

Еще одной возможностью получить структуру конденсированной фазы является формирование капель малых размеров (от нано до микрометров) из пара (путь 2 на рис. 1). Анализ литературы [4, 5] показал, что основное внимание здесь уделяется описанию структуры и свойств кластеров и наночастиц, находящихся в твердом состоянии при комнатной температуре, что, безусловно, актуально для их использования. Однако многие технологии получения химически чистых нано- и микрочастиц используют процесс «самосборки» наночастиц из пара при его конденсации. Интенсивное тепловыделение, сопровождающее конденсацию, может служить причиной перегрева кластеров и наночастиц до жидкого состояния, что, безусловно, оказывает влияние на кинетику процесса конденсации. Данные по рассмотрению кластеров в жидком состоянии крайне фрагментарны, поэтому в этой работе обобщены представления о процессе формирования структуры конденсированной фазы из пара.

Современные методики оценки структурных параметров неупорядоченных веществ

Отсутствие универсальной теории жидкого состояния в рамках традиционных статистических методов является следствием практической невозможности описания многочастичных корреляций, существующих в системе. Это связано, в первую очередь, с отсутствием надежных методик получения подобной информации из экспериментальных данных даже для простых одноатомных жидкостей. На сегодняшний день единственной возможностью получения дополнительных данных представляется изучение механизмов формирования структуры на компьютерных моделях.

Наиболее строгим подходом при изучении корреляций в расположении атомных центров, полученных при моделироании, является метод разбиения Вороного – Делоне [6, 7], при помощи которого задача анализа атомной структуры сводится к статистическому анализу многогранников или симплексов и их взаимного расположения. Существующие в его рамках методики анализа структурной информации направлены на изучение плотных систем, для которых разработаны соответствующие критерии для сравнения элементов структуры [6]. Для систем низкой плотности такие критерии оказываются неинформативными, т.к. они испытывают значительные флуктуации.

В работе [8] предложен подход к анализу структуры, лишенный указанных выше недостатков. В нем независимо анализируются топологические и метрические параметры структуры. Он основан на построении системы атомных и симплициальных (межатомных) сфер методом Вороного – Делоне. Локальная топология такой системы описывается числом пересечений симплициальных сфер между собой. При этом все элементы структуры (симплексы Делоне) разделяются на 5 типов (n_0,... n_4) нумеруемых числами от 0 до 4, отвечающих разной форме межатомного пространства,

т.е. разному локальному порядку. Наиболее плотноупакованные расположения атомов соответствуют симплексам, симплициальные сферы, которых пересекается с малым числом соседей (типы симплексов n_0, n_1, n_2). Они являются основой плотных упаковок кристаллов и плотной жидкости [8]. Симплексы, симплициальная сфера которых пересекается с 3-мя или 4-мя соседними (типы n_4 и n_3), являются элементами «рыхлой» структуры. В такой структуре пустоты объединяются, а атомы имеют значительное пространство для перемещения [7].

Статистическая надежность использования предложенного набора параметров для оценки топологических свойств модели показана в работе [9]. Проверка для моделей разупорядоченных кристаллов, случайных упаковок, моделей твердых сфер, моделей Леннард-Джонса и др., показала, что в системах более 1000–2000 атомов обсуждаемые топологические параметры определяются с точностью выше 5 %.

Пример использования типов симплексов для характеристики структуры жидкости показан на рис. 2. На нем представлены несколько сечений атомной структуры и структуры межатомного пространства, взятых из моделей Cs, соответствующих разным температурам (плотностям). На фазовой диаграмме отмечены условия выполнения экспериментов по рассеянию [10], на основе которых были построены модели [11]. Рядом с фазовой диаграммой показана доля симплексов разных типов в моделях. Римскими цифрами I, II и III обозначены области соответствующие системам с максимальным количеством симплексов определенного типа. При низких плотностях (область III) в системе преобладают рыхлые симплексы типа n_4, т.е. система состоит преимущественно из пустот. В плотной системе (область I) преобладают симплексы типа n_2, т.е. существенную роль играют эффекты упаковки. Область II – небольшая область переходной структуры. Данное разделение может служить отправной точкой для сравнения сильноразупорядоченных структур разных веществ.

Анализ структуры

В работах [11] были изучены структуры различных жидких металлов (Cs, Rb, Hg, Fe, Ga). Во всех моделях наблюдались сходные изменения атомной структуры при движении вдоль кривой равновесия жидкость – пар: число «рыхлых» фрагментов структуры увеличивалось при увеличении температуры и уменьшении плотности. Наиболее заметны изменения в структуре Cs (см. рис. 2), т.к. его плотность в жидком состоянии изменяется примерно в 6 раз. Область перехода II между рыхлой и плотной структурой показана на рисунке пунктирными линиями. Анализ размеров симплициальных полостей показал, что межатомное пространство рыхлой структуры состоит из значительных пустот, сравнимых по размеру с размерами атомов [12]. Подобные изменения атомной структуры могут влиять на характер движения атомов в системе. Это и наблюдалось при сравнении

[13] данных моделирования автокорреляционных функций скоростей, экспериментальных данных по исчезновению аномальной положительной дисперсии звука [14] и области изменения структурных параметров.

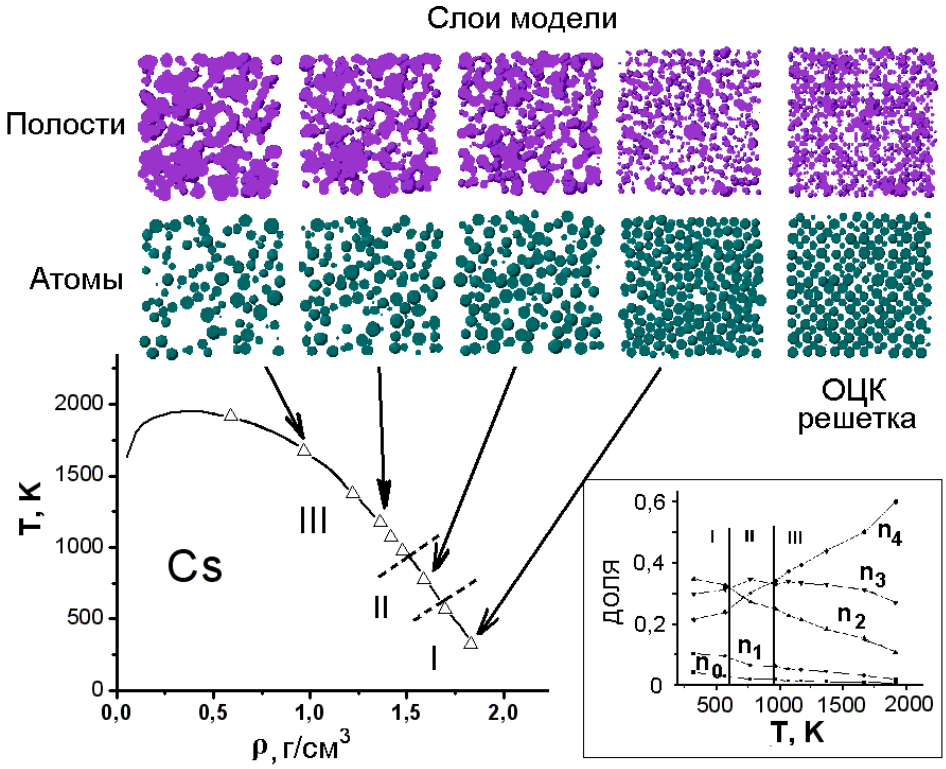


Рис. 2. Модели структуры цезия, соответствующие разным термодинамическим состояниям и доля симплексов определенного вида в зависимости от плотности упаковки. Вертикальными линиями обозначены границы областей с различной атомной структурой

Эксперименты, в которых обнаружены аномалии термодинамических свойств расплавов чистых металлов, являются единичными: адиабатического термического коэффициента давления цезия [15] и адиабатической сжимаемости, определённой по экспериментальным значениям скорости звука в ртути [16]. Авторы работ отмечают, что данный эффект невелик, и может быть выявлен только при высокой точности эксперимента и сканировании свойств с малым шагом, что обычно не делается. При этом области скачков параметров, найденных в указанных работах совпадают с областями переходной структуры для данных материалов [11]. Использование рекомендаций экспериментаторов совместно с представленными результатами моделирования позволяет надеяться на получение дополнительных подтверждений структурных переходов в жидкости.

В результате сопоставления найденных областей изменения атомной структуры с опытными данными и данными моделирования электронной структуры показало [17], что в области изменения структуры с плотной на рыхлую меняется характер зависимостей электронных свойств. В об-

ласти плотной жидкости поведение системы соответствует модели идеального электронного газа, в то время как в рыхлом расплаве проявляются индивидуальные физико-химические свойства элементов.

Структура малых кластеров

Статистически анализировались [18] данные о кластере Cu, находящемся в среде буферного газа Ar с постоянной температурой T = 1150–1540 K. Атомная структура кластера изучалась методом, основанным на разбиении Делоне, описанным выше. Изучение более 10^5 конфигураций позволило установить послойную структуру кластера для сферических слоев, находящихся на разном расстоянии от его центра. Были получены данные для кластеров разных размеров, имеющих разные значения внутренней энергии. На рис. 3 приведены распределения симплексов разного типа (n_0...n_4) по расстоянию до центра масс кластеров разного размера. Показаны распределения только внутренних симплексов (имеющих полное число соседей).

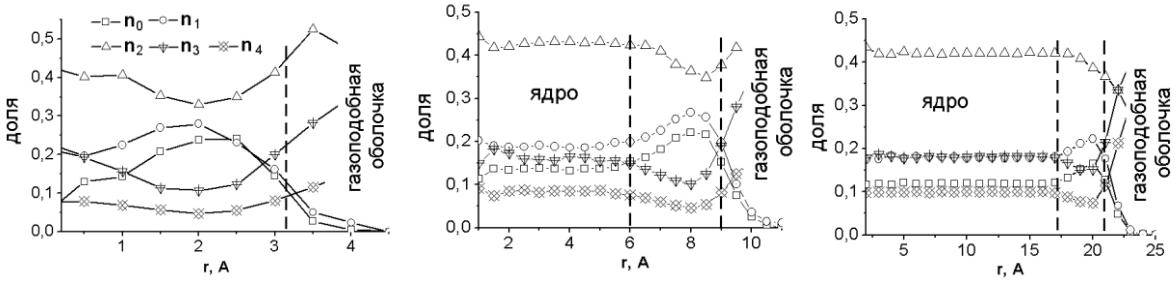


Рис. 3. Доля симплексов разного типа в кластерах
в зависимости от расстояния до его центра масс
а) кластер 21 атомов, б) кластер 290 атомов, в) кластер 3200 атомов

Из рис. 3 видно, что в структуре сформировавшегося кластера можно выделить 3 слоя: ядро кластера, наружное псевдогазовая оболочка с уменьшающейся плотностью и разделительный слой, отделяющий центральную часть кластера от его псевдогазовой оболочки. Промежуточный слой имеет толщину 3–4 Å, и отличается от ядра кластера повышенным содержанием правильных тетраэдрических элементов. При изменении размера кластера уплотнённый слой сохраняет свою толщину вплоть до кластеров супермалых размеров, когда он поглощает центральную часть кластера на рис. 3а. Найдено, что при повышении температуры кластеров соотношение типов симплексов в ядре кластера и разделительном слое меняется, а интенсивное испарение кластера наблюдается, когда структура разделительного слоя приближается к структуре его центральной части.

Сравнение структуры центральной части кластера со структурой объёмной фазы показало [19], что центральная часть кластера из 3200 атомов соответствует структуре объёмной фазы с той же температурой, т.е. центральная часть кластера из нескольких тысяч атомов уже может считаться близкой к конденсированной фазе.

Заключение

В работе продемонстрированы закономерности изменения объёмной структуры жидких металлов и выявлен переход от плотных расплавов к рыхлым в области жидкости. Анализ атомной структуры моделей металлов позволил установить положение этих переходов в металлических системах и объяснил многочисленный аномалии термодинамических и электронных свойств металлов в этой области.

Анализ формирования атомной структуры конденсированной фазы металла при формировании капель из пара показал, что структура разогретых кластеров имеет 3 слоя. Центральная часть кластера формируется начиная с кластеров размеров 4–5 Å. А ее структура становится эквивалентную структуре жидкости для кластеров более 10 Å.

Библиографический список

1. Brazhkin, V.V. High-pressure transformations in simple melts / V.V. Brazhkin, S.V. Popova, RN. Voloshin // High Pressure Research. – 1997. – N. 15. – Pp. 267–305.

2. Tanaka, H. General view of a liquid-liquid phase transition / H. Tanaka // Phys. Rev. E. – 2000. – V. 62(5). – Pp. 6968–6976.

3. Ландау, Л.Д. О соотношении между жидким и газообразным состоянием у металлов / Л.Д. Ландау, Я.Б. Зельдович // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1944. – № 14. – С. 32.

4. Baletto, F. Structural properties of nanoclusters: Energetic, thermodynamic, and kinetic effects / F. Baletto, R. Ferrando // Reviews of Modern Physics. – 2005. – V. 77(1). – Pp. 371–423.

5. Altavilla, C. Inorganic Nanoparticles: Synthesis, Applications, and Perspectives / C. Altavilla, E. Ciliberto. – London: CRC Press, 2010. – 546 p.

6. Медведев, Н.Н. Метод Вороного-Делоне в исследовании структуры некристаллических систем / Н.Н. Медведев. – Новосибирск: Из-во СО РАН, 2000. – 216 с.

7. Воронцов, А.Г. Применение симплексов Делоне для анализа структуры межатомного пространства расплава цезия / А.Г. Воронцов, А.А. Мирзоев // Известия Челябинского научного центра. – 2002. – Вып. 3(16). – С. 19–23.

8. Воронцов, А.Г. Использование геометрических характеристик межатомного пространства для анализа моделей структуры жидкости / А.Г. Воронцов, Д.А. Куц // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика Механика Физика». – 2005. – Вып. 6 (46). – С. 77–84.

9. Воронцов, А.Г. Статистико-геометрический метод анализа структуры однокомпонентных систем / А.Г. Воронцов, Д.А. Куц // Расплавы. – 2008. – № 3. – С. 83–92.

10. Winter, R. The Static Structure Factor of Cesium Over the Whole Liquid Range up to the Critical Point / R. Winter, F. Hensel, T. Bodensteiner, W. Glaser // Berichte der Bunsengesellschaft fur physikalische Chemie. – 1987. – V. 91. – N 12. – Pp. 1327–1330.

11. Vorontsov, A. Modifications of structure and properties of liquids at high temperatures / A. Vorontsov, D. Kuts // EPJ Web of Conferences. – 2011. – V. 15. – P. 1004.

12. Воронцов, А.Г. Анализ межатомного пространства в жидком цезии / А.Г. Воронцов, А.А. Мирзоев, Б.Р. Гельчинский // ЖФХ. – 2003. – Т. 77. – № 11. – С. 1800–1804.

13. Воронцов, А.Г. К вопросу о движении атомов в неупорядоченных средах / А.Г. Воронцов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика Механика Физика». – 2012. – Вып. 7. – № 34(293). – С. 81–85.

14. Simeoni, G.G. The Widom line as the crossover between liquid-like and gas-like behaviour in supercritical fluids / G.G. Simeoni, T. Bryk, F.A. Gorelli, M. Krisch, G. Ruocco, M. Santoro, T. Scopigno // Nature Physics. – 2010. – V. 6(7). – Pp. 503–507.

15. Blagonravov, L.A. Phase transition in liquid cesium near 590 K / L.A. Blagonravov, S.N. Skovorod'ko, A.S. Krylov, L.A. Orlov, V.A. Alekseev, E.E. Shpilrain // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2000. – V. 277. – Pp. 182–187.

16. Kobayashi, K. A precursor of liquid-liquid coexistence in the metal-nonmetal transition range of fluid mercury / K. Kobayashi, H. Kajikawa, Y. Hiejima, T. Hoshino, M. Yao // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2007. – V. 353. – Pp. 3362-3365.

17. Sobolev, A.N. The Kubo-Greenwood calculation of conductivity of the simple and non-simple liquid metals in a wide temperature range / A.N. Sobolev, A.A. Mirzoev // Journal of Physics: Conference Series. – 2008. – V. 98. – N 6.

18. Воронцов А.Г. Кинетика и энергетические состояния нанокластеров в начальной стадии процесса гомогенной конденсации при высоких степенях пересыщения / А. Г. Воронцов, Б. Р. Гельчинский, А.Е. Коренченко // ЖЭТФ. – 2012. – Т. 142. – Вып. 5. – С. 897.

19. Воронцов, А.Г. Изменение структуры металлических кластеров в процессе их получения / А.Г. Воронцов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика Механика Физика». – 2013. – Т. 5. – № 2. – С. 94–98.

К содержанию

УДК 514.174.6 + 548.121

ИНФЛЯЦИОННЫЙ И ДЕФЛЯЦИОННЫЙ ПОДХОДЫ К ОПИСАНИЮ ФРАКТАЛА ИЗ ПЯТИКОНЕЧНЫХ ЗВЕЗД

А.А. Поляков

Предложено два подхода к описанию фрактала из пятиконечных звезд: дефляционный и инфляционный. Предложена краткая запись строения таких фракталов. Показана связь между дефляционным и инфляционным описаниями. Для дефляционного подхода характерно уменьшение элементов структуры с каждым шагом, инфляционный характеризуется бесконечным ростом.

Ключевые слова: фракталы; квазипериодические решетки; мозаика Пенроуза.

В интервью [1] Бенуа Мандельброт, автор термина фрактал, на вопрос о том, будет ли когда-нибудь дано точное определение фрактала, говорил, что определение фрактала не стоит искать. Это будет ограничивать огромное множество объектов, которое описывает это понятие. Общим для всех фракталов является свойство самоподобия: неизменность структуры объекта при изменении масштаба.

Для известных классических множеств, которые сегодня считают фракталами, можно дать такое описание: это множество точек, которое можно всюду считать негладким, не имеющим производных, обладающее самоподобием.

В некоторых книгах, посвященных фракталам [2], при рассмотрении самоподобия рассматривают также квазипериодические решетки (квазипериодические решетки не обладают периодичностью, но характеризуются строгим самоподобием). Классический двумерный паркет Пенроуза – пример квазипериодической решетки [3]. Исследования таких решеток предшествовали по времени экспериментальному открытию Даном Шехтманом квазикристаллов – нового вида кристаллического состояния вещества [4]. Развитие подходов к описанию и построению таких решеток позволило разработать математические методы рентгенографического исследования квазикристаллов. Можно сказать, что паркет Пенроуза играет ту же роль в кристаллографии квазикристаллов, что и примитивная кубическая решетка в классической кристаллографии.

При описании фрактала обычно задают инициатор и генератор. Инициатор – исходный геометрический объект, генератор – объект, который показывает метод построения фрактала. Каждый этап действия генератора называется предфракталом.

Как соотносятся квазипериодические решетки (паркет Пенроуза) и фракталы? Квазипериодические решетки, кроме того, что они самоподобны, являются системами точек Делоне [5], для которых характерно существование минимального и максимального расстояния между ближайшими

точками. Эти условия приводят к тому, что невозможно бесконечное сближение точек, как в классических примерах фрактальных множеств, так и невозможно появление пор и трещин, что наблюдается во фракталах, но в кристаллических решетках считается дефектами. Можно сказать, что квазипериодические решетки – это подкласс фракталов, являющихся системами точек Делоне.

Рассмотрим такие методики построения квазипериодических решеток, как операции дефляции и инфляции на примере мозаики Пенроуза [6]. Паркет Пенроуза строится из двух типов ромбов. У таких ромбов ребра имеют одинаковую длину, острый угол при вершине в одном случае составляет $\frac{\pi}{5}$, а в другом случае – $\frac{\pi}{10}$. Для задания дефляции определяют способы разбиения исходных ромбов на части. Затем для исходной конфигурации, например, одиночного ромба, проводят последовательно разбиения. Очевидно, что дефляция при построении квазипериодической решетки эквивалентна заданию инициатора и генератора при вычислении фрактала. Результат также получается похожим: образуется структура с уменьшающимися на каждом шаге элементами. Если строить мозаику Пенроуза, как квазипериодическую решетку, из элементов постоянного размера, на каждом шаге надо увеличивать полученную структуру.

Операция инфляции: для построения мозаики задаются правила соединения ромбов, а затем по этим правилам начинают присоединять новые ромбы. Этот процесс в отличие от дефляции не строго детерминирован: возможны тупиковые пути роста, тогда, после попадания в тупик, делают откат до разветвления траектории роста и, затем, продолжают рост.

Ранее [7, 8, 9] было показано, что в двумерном паркете Пенроуза можно выделить слои, в которых наблюдаются кластеры из пятиконечных звезд, было высказано предположение, что эти слои можно считать фракталами из звезд (любая точка такого слоя принадлежит одному или нескольким множествам из 10 точек, расположенных в вершинах правильных пятиконечных звезд постоянного минимального размера).

Было замечено, что расстояние между центрами звезд в кластерах в τ^N раз больше расстояния от центра звезды до внутренних вершин ($\tau = {}^{1+\sqrt{5}}/_{2} \approx 1{,}618$ – «золотое сечение»). Отмечались целые значения показателя *N*, равные 2 и 3. Расстояние между центрами кластеров также описывается целой степенью золотого сечения. В каждом слое наблюдались две ориентации звезд, связанные операцией инверсии, которые были обозначены буквами «*w*» и «*b*» (white and black).

Общее описание фрактала. Мы будем рассматривать фрактал, инициатором которого является точка, а генератором – правильная пятиконечная звезда, причем на каждом шаге линейный размер генератора определяется выражением:

$$a_k = a\tau^{-N_k},$$

здесь $N_k = 0, 1, 2, \dots$, a – размер звезды-инициатора. Заметим, что каждый раз задается ориентация звезды-генератора, а центры этих звезд располагаются по всем вершинам пятиконечных звезд предыдущего шага, затем точки предыдущего шага удаляются.

Рассмотрим подробнее процесс построения фрактала.

1. Изображаем исходную звезду с размером $a_0 = a\tau^{-N_0}$ и одной из двух ориентаций («*w*» или «*b*»). Обозначаем ее символами $N_0 c_0$, где $c_0 = w$ или b.

2. Обобщенные звезды первого шага ориентации c_1 и размера $a_1 = a\tau^{-N_1}$, где $N_1 \geq N_0$, располагается так, что их центры совпадают с вершинами звезд предыдущего шага. Точки предыдущего шага удаляются.

3. Обобщенные звезды *i*-го этапа с размерами $a_i = a\tau^{-N_i}$ и ориентацией c_i располагаем так, что их центры совпадают с вершинами предфрактала предыдущего этапа. При этом совпадающие точки учитываются один раз, предыдущий предфрактал удаляется.

Гибкость и разнообразие форм полученного фрактала определяется набором значений размерного числа N_i и значений ориентаций c_i .

Такое описание фрактала назовем «**дефляционное абсолютное**» и запишем в виде:

$$^{da}N_0\, c_0 N_1 c_1 N_2 c_2 \dots$$

Можно показать, что окончательный вид фрактала не зависит от порядка обобщенных звезд (так мы будем называть звезду-генератор на каждом этапе построения). Поэтому в дальнейшем обобщенные звезды располагаются так, что числа N_k порождают неубывающую последовательность.

Из всего разнообразия фракталов можно выделить фракталы с повторяющимися свойствами, у них свойство самоподобия ярко выражено. У таких фракталов, например, может быть постоянная ориентация обобщенных звезд и каждая следующая в τ раз меньше, его можно записать следующим образом:

$$^{da}0w_1w_2w_3w \dots$$

Для того чтобы описывать такие фракталы, можно предложить **относительное дефляционное** описание фрактала, у которого размерное число равно разности соответствующих чисел абсолютной записи:

$$^{d}N_i = {}^{da}N_i - {}^{da}N_{i-1}$$

Относительную ориентацию обобщенных звезд можно определить по правилу *исключающего или* (XOR в программировании):

$^{d}c_i$	$^{da}c_i = ' w '$	$^{da}c_i = ' b '$
$^{da}c_{i-1} = ' w '$	w	b
$^{da}c_{i-1} = ' b '$	b	w

При совпадении ориентаций в абсолютной записи на i-м шаге и предыдущем, в дефляционной записи пишем «белую» ориентацию, иначе – «черную». Договоримся также, что ${}^{d}N_0 = {}^{da}N_0$.

Обратный переход (от относительной дефляционной к дефляционной записи) описывается соотношениями:

$$ {}^{da}N_i = \sum_{k=0}^{i} {}^{d}N_k $$

	${}^{d}c_i = 'w'$	${}^{d}c_i = 'b'$
${}^{da}c_i$	${}^{da}c_{i-1}$	$\overline{{}^{da}c_{i-1}}$

Здесь черта обозначает отрицание: $\bar{w} = b$ и $\bar{b} = w$.

По предложенным алгоритмам можно всегда получить из абсолютной записи относительную и наоборот. Показанный выше пример можно записать следующим образом:

$$ {}^{da}0w1w2w3w\ldots = {}^{d}0w1w1w1w\ldots = {}^{d}0w\,(1w). $$

В данном случае скобки обозначают бесконечное повторение последовательности, как в записи бесконечной десятичной дроби.

Самоподобные фракталы из пятиконечных звезд в общем случае можно описать следующим образом:

$$ {}^{d}N_0\, c_0 N_1 c_1 N_2 c_2 \ldots N_k c_k (N_{k+1} c_{k+1} \ldots N_m c_m). $$

Рассмотрим построение снизу – склеивание звезд во все возрастающие кластеры. В этом случае у звезд фиксированные размеры и мы образуем решетку бесконечного размера. Как уже отмечалось, ограничение размера конструкции, а следовательно, уменьшение строительных элементов на каждом этапе приведет к почти точной аналогии с дефляционным описанием (обычным для фракталов).

В этом случае **абсолютное инфляционное** описание фрактала можно сделать следующим:

$$ {}^{ia}N_0\, c_0 N_1 c_1 N_2 c_2 \ldots, $$

где $N_i = 0, 1, 2 \ldots$ – показатель в описании размера обобщенной звезды $a_k = a\tau^{N_k}$. Как и в предыдущем случае, будем рассматривать неубывающую последовательность целых чисел.

Построение фрактала с помощью операции инфляции можно представить следующим образом:

1. Выбирается исходная звезда размером $a_0 = a\tau^{N_0}$, с ориентацией «w» или «b».

2. По вершинам обобщенной звезды Z_1 размера $a_1 = a\tau^{N_1}$ ориентации c_1 располагаем звезды исходного размера и ориентации. Сама обобщенная звезда Z_1 не отображается.

3. Кластеры звезд, полученные на предыдущем этапе размножают и располагают по вершинам обобщенной звезды Z_2 (с размером $a_2 = a\tau^{N_2}$ ориентации c_2). Совпадающие точки учитывают один раз. Обобщенная звезда Z_2 не отображается.

Последний пункт повторяем, варьируя размер и ориентацию обобщенной звезды.

Относительная инфляционное описание: также, как в предыдущем случае, для выделения свойств самоподобия полезно записать операцию инфляции с помощью относительной записи.

$$^{i}N_i = {}^{ia}N_i - {}^{ia}N_{i-1}$$

Относительную ориентацию обобщенных звезд можно определить по правилу *исключающего или* (XOR в программировании):

$^{i}c_i$	$^{ia}c_i = ' w '$	$^{ia}c_i = ' b '$
$^{ia}c_{i-1} = ' w '$	w	b
$^{ia}c_{i-1} = ' b '$	b	w

Обратный переход (от относительной инфляционной к абсолютной инфляционной записи) описывается соотношениями:

$$^{ia}N_i = \sum_{k=0}^{i} {}^{i}N_k$$

	$^{i}c_i = ' w '$	$^{i}c_i = ' b '$
$^{ia}c_i$	$^{ia}c_{i-1}$	$\overline{^{ia}c_{i-1}}$

Здесь также черта обозначает отрицание. Приведенные уравнения не определяют начальное значение, поэтому условимся, что $^{i}N_0 = {}^{ia}N_0$.

Возникает вопрос: как можно связать **дефляционное и инфляционное** описание?

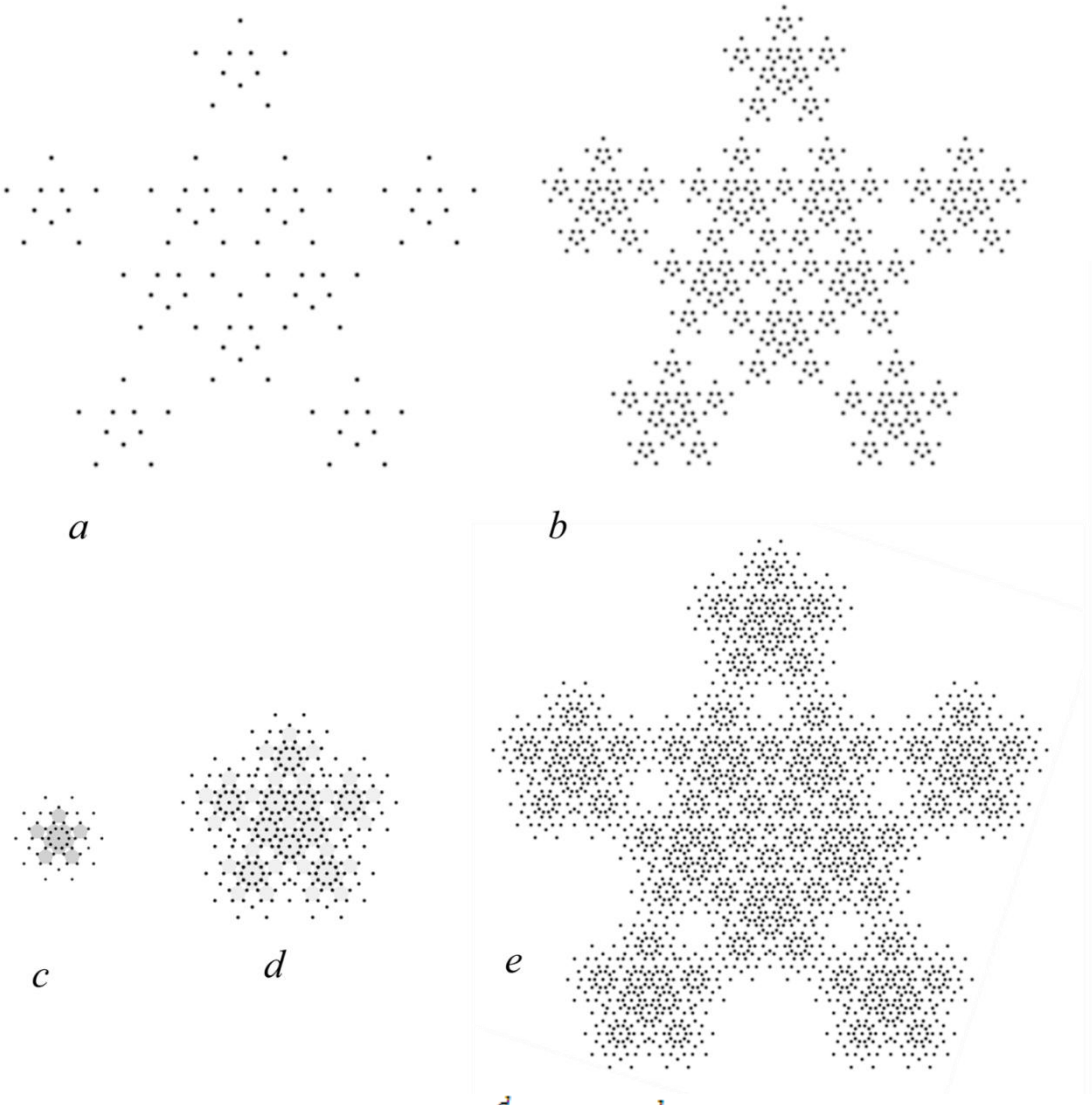
Можно предположить, что такая связь возможна либо при ограниченном числе шагов, либо при строгом самоподобии фрактала.

Пусть число шагов ограничено величиной k (мы рассматриваем предфрактал порядка k), тогда можно показать, что:

$$^{i}N_j = {}^{d}N_{k-j+1}$$

Здесь индексы изменяются в пределах $^{i}c_i = {}^{d}c_{k-j+1}$.

Неопределенными остаются нулевые звезды (исходный размер). Для того, чтобы точки в дефляционном и инфляционном варианте совпадали, нужно масштабировать тот или другой вариант, это отражается в размерах нулевых звезд.



Построение предфрактала ${}^{d}\mathbf{0}w\mathbf{3}w\mathbf{2}w\mathbf{0}b$ методом дефляции:
a – ${}^{d}\mathbf{0}w\mathbf{3}w$, b – ${}^{d}\mathbf{0}w\mathbf{3}w\mathbf{2}w$, e – ${}^{d}\mathbf{0}w\mathbf{3}w\mathbf{2}w\mathbf{0}b$.
Построение предфрактала ${}^{i}\mathbf{0}b\mathbf{0}b\mathbf{2}w\mathbf{3}w$ методом инфляции:
c – ${}^{i}\mathbf{0}b\mathbf{0}b$, d – ${}^{i}\mathbf{0}b\mathbf{0}b\mathbf{2}w$, e – ${}^{i}\mathbf{0}b\mathbf{0}b\mathbf{2}w\mathbf{3}w$

Пример эквивалентных записей:
${}^{d}01121\mathbf{31} \leftrightarrow {}^{i}01312\mathbf{11}$
${}^{d}wwbwbb \leftrightarrow {}^{i}bbbwbw$.

Это соответствие взаимное, а зная относительные записи можно восстановить абсолютные записи фрактала.

Как можно связать записи собственно фракталов, то есть связать бесконечные ряды итераций? При дефляционной записи мы знаем исходный каркас, который все более измельчается. В инфляционной записи мы знаем детали, но неопределенным остается этот исходный каркас. Поэтому, для строго самоподобного фрактала можно записать связь:

$${}^{d}0w(N_1c_1N_2c_2 \dots N_kc_k) = {}^{i}0w(N_kc_kN_{k-1}c_{k-1} \dots N_1c_1).$$

Заметим, что совпадение будет наблюдаться только в том случае, когда число шагов каждого предфрактала будет кратно *k*.

На рисунке показаны два варианта построения предфрактала ${}^{d}0w3w2w0b$ (в инфляционной записи: ${}^{i}0b0b2w3w$): *a*) строится каркас ${}^{d}0w3w$; *b*) затем по полученным точкам размещаются центры звезд в τ^2 меньшие, чем обобщенные звезды 1 шага (${}^{d}0w3w2w$); *e*) затем по полученным точкам располагаются центры звезд того же размера, что и в предыдущем шаге, но противоположной ориентации (${}^{d}0w3w2w0b$). Построение того же предфрактала методом инфляции: *c*) вначале получаем кластер звезд ${}^{i}0b0b$; *d*) затем такие кластеры располагаем по вершинам в τ^2 раз большей обобщенной звезды (${}^{i}0b0b2w$); *e*) затем полученный кластер располагаем по вершинам звезды в τ^3 больше звезды предыдущего этапа (${}^{i}0b0b2w3w$). На рисунках показаны только вершины звезд, темным цветом выделены ядра наименьших звезд.

Библиографический список

1. Шлык, В.А. Великий кочевник Бенуа Мандельброт / В.А. Шлык // Вестник Южно-Уральского Универститета. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – № 6. – С. 54–71.

2. Шредер, М. Фракталы, хаос, степенные законы / М. Шредер. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – 528 с.

3. Penrose, R. Pentaplexity: A Class of Nonperiodic Tilings of the Plane / R. Penrose // Eureka. – 1978. – 39. – Pp. 16–22.

4. Shechtman, D. Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational / D. Symmetry, I. Shechtman, D. Blech, Gratias, and J.W. Cahn // Phys. Rev. Lett. – 1984. – Vol. 53. – N 20. – Pp. 1951 – 1953.

5. Галиулин, Р.В. Кристаллографическая геометрия / Р.В. Галиулин. – М.: Наука, 1984. – 136 с.

6. Henley, C.L. Sphere packing and local environments in Penrose tiling / C.L. Henley // Phys. Rev. B. – 1986. – 34(2). – Pp. 797–816.

7. Polyakov, A.A. Presentation of Penrose tiling as set of overlapping pentagonal stars / A.A. Polyakov // Journal of Physics: Conference Series. – 2008. – Vol. 98. – 012025.

8. Поляков, А.А. Описание паркета Пенроуза посредством взаимоперекрывающихся пятиугольных звезд / А.А. Поляков // Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов: труды XII Российской конф., Екатеринбург: Уральский центр академического обслуживания. – 2008. – Т. 1. – С. 242–245.

9. Polyakov, A.A. Fractal structures of regular pentagonal stars in Penrose tiling / A.A. Polyakov // Russian Metallurgy (Metally). – 2012. – I. 8. – Pp. 719–722.

К содержанию

УДК 669.112.227.1:538.915

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТИПА МАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ НА ЭНЕРГИЮ РАСТВОРЕНИЯ УГЛЕРОДА В ГЦК-ЖЕЛЕЗЕ

Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев

В программном пакете WIEN2k проведено первопринципное моделирование равновесной структуры и свойств ГЦК-железа. Произведено вычисление энергий растворения атомов углерода для антиферромагнитного однослойного (АФМ1) и антиферромагнитного двухслойного (АФМД) состояний ГЦК железа.

Ключевые слова: первопринципное моделирование, ГЦК-железо, примеси углерода, WIEN2k.

Легирование примесями, повышает прочность железа, а также влияет на магнитные, электрические и упругие свойства. Обычно легирование осуществляется растворением атомов замещения (хром, марганец, никель [1–2]) или атомов внедрения (углерод, водород [3–8]). Система железо-углерод является основой большинства конструкционных материалов. Внедрение всего лишь 1 ат. % углерода радикально повышает прочность железа. Железо является полиморфным металлом [9, 10]: при нагревании выше 911 °С низкотемпературное α-железо с ОЦК решеткой превращается в γ-железо с ГЦК решеткой. Углерод растворяется в обеих фазах железа, так что при температурах выше 723–911 °С существует аустенит – раствор углерода в γ-Fe, ниже этого интервала возникает феррит – раствор углерода в α-Fe [10]. Растворимость углерода в γ-Fe довольно высока – до 2 масс. %. Напротив, α-железо растворяет очень мало углерода.

Растворение углерода в ГЦК-железе представляет собой эндотермическую реакцию (протекает с поглащением тепла). Экспериментальные значения энергии растворения приведены в ряде работ [11–13], из анализа которых можно сделать вывод, что она лежит в интервале от 0,36 до 0,42 эВ.

ГЦК фаза железа стабильна в температурной области, выше точки Кюри α-Fe. Её следует рассматривать как парамагнетик с магнитным моментом 0,6 μ_b [14–15]. Моделирование парамагнитного состояния методами зонной теории довольно затруднительно, поэтому возникает вопрос, какая модель его лучше всего описывает. В нашей предыдущей работе [3] моделирование проводилось в немагнитном (НМ) и антиферромагнитном двухслойном состоянии (АФМД), причём АФМД состояние лучше воспроизводило экспериментальные результаты. Точку зрения, что АФМД состояние лучше всего подходит для описания парамагнитного ГЦК-железа, поддерживают Медведева и Бухвалов [16–17]. В работе [17] Медведевой, получено, что АФМД состояние лежит ниже по энергии, чем НМ, ферромагнитное (ФМ) и АФМ1, поэтому и является наиболее стабильным. В работе [16] в программном пакете SIESTA проводилось моделирование растворения углерода в АФМД состоянии ГЦК железа, энергия составила 0,55 эВ.

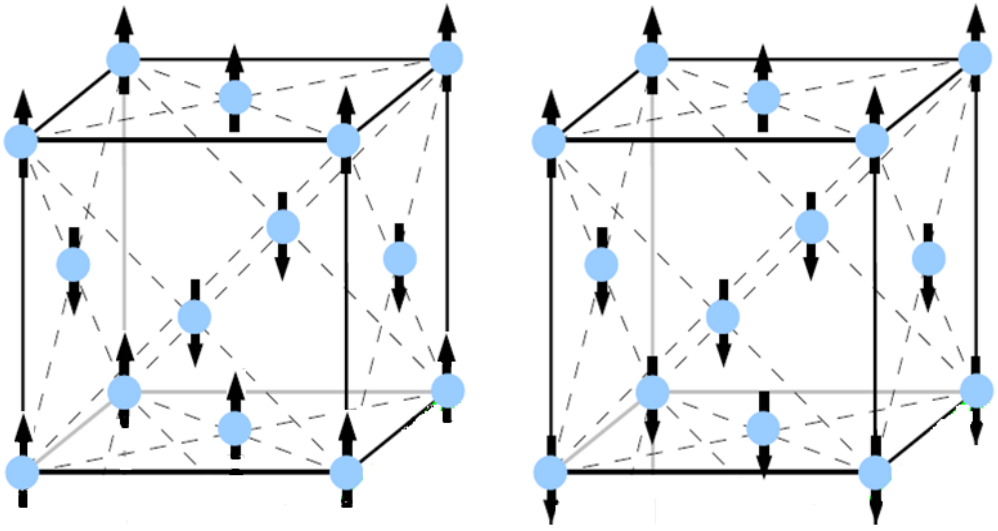


Рис. 1. Антиферромагнитное состояние, слева АФМ1, справа АФМД

Однако ряд авторов [18–19], считают, что антиферромагнитное однослойное (АФМ1) состояние, также подходит для описания парамагнитного ГЦК железа. В работе [18] проводилось исследование ГЦК железа методом FLAPW. Было найдено, что основное состояние является антиферромагнитным, но две антиферромагнитные структуры имеют практически неразличимые энергии в точки минимума, хотя АФМД имеет больший объём, который лучше согласуется с экспериментальным значением. В работе Хэпбурна [19], однако, показано, что оба магнитных состояния АФМД и АФМ1 (рис. 1) подходят для описания парамагнитного ГЦК железа. По данным этой работы энергия растворения углерода в АФМ1 составила 0,263 эВ и 0,323 эВ в АФМД состоянии, что неплохо согласуется с экспериментальными значениями. Следует отметить, что вывод базируется на расчётах псевдопотенциальными методами, в которых происходит учёт только валентных электронов. Эти методы хорошо подходят для описания чистых веществ, а не для растворения атомов, в которых происходит изменение давления в системе, в следствие чего необходимости учитывать в описании остовные и полуостовные уровни. Отсутствие учёта этих уровней приводит к менее точным результатам. Поэтому необходимо провести рассмотрение растворения углерода в АФМ1 и АФМД состояние, полнопотенциальными методами. Также необходимо учесть, что в АФМ1 и АФМД состояниях наблюдается тетрагональное искажение решётки, тетрагональное состояние лежит ниже по энергии чем кубическое. Однако не было проведено исследования, которое однозначно определило, что при моделировании необходимо использовать тетрагональное железо, а не кубическое. Поэтому в данной работе рассмотрено АФМ1 и АФМД, в кубическом и тетрагональном состояниях.

В данной работе расчёты проводись первопринципным полнопотенциальным методом LAPW, с учетом обобщенного градиентного приближения PBE-GGA в программном пакете WIEN2k, обеспечивающим высокую точность расчета полной энергии при минимальном количестве подгоночных параметров. Расчёты проводились на мощном вычислительном комплексе Торнадо [20]. Параметры моделирования, а также матрица железа, в которой растворялся одиночный атом углерода взяты из предыдущей работы [3]. В нашей работе использована ГЦК-суперячейка, состоящая из 32 атомов с параметрами Rmt(Fe)=2,0 a.e., Kmax=5 a.e.-1. Для определения геометрических параметров необходимо использование N_k=64 точки в схеме Монхорста-Пака[17], а чтобы гарантировать точность вычисления полной энергии в 1мРб, необходимо его увеличить до N_k=343. Графит моделировался с параметрами решётки, полученными из рентгеноструктурных данных (a = 2,462 Å, c = 6,656 Å [21]). В расчете использовались оптимизированные параметры Kmax = 5 a.e.$^{-1}$, N_k = 300, Rmt(C) = 1,2 a.e.

Для определения энергии растворения углерода относительно фазы графита использовалась формула:

$$\Delta H = E(Fe_{32}C) - E(Fe_{32}) - E(C)$$

где $E(Fe_{32}C)$ – энергии отрелаксированной суперячейки, состоящей из 32 атомов железа и одного атома углерода, находящегося в октапоре, $E(Fe_{32})$ – энергия суперячейки состоящей из 32 атомов железа, а E(C) – энергия одного атома углерода в решётке графита.

Для получения равновесных параметров решётки ГЦК-железа проведена атомно-силовая релаксация системы и объемная минимизация энергии. В данной работе получено, что растворение одиночного атома C в кубическом АФМ1 ГЦК-железе, увеличивает параметр решётки с 3,49 Å до 3,525 Å, что совпадает с работами [17–18, 21], и расталкивает ближайшие атомы железа на 6,3 %. И в кубическом и в тетрагональном АФМ1 железе происходило образование ферромагнитного октаэдра в первом окружении [17] и ферромагнитного куба во втором (рис. 2). В тетрагональном АФМ1 железе отношение c/a составило 1,06, что совпало с работами [16–17]. Из-за большей стабильности в кубическом и тетрагональном АФМД состоянии не произошло переконфигурации спинов в суперячейке (не образовался ферромагнитный октаэдр).

В таблице приведено сравнение энергии растворения углерода полученной в нашей работе, с данными других работ, среди которых и экспериментальные данные для парамагнитного железа [11–13].

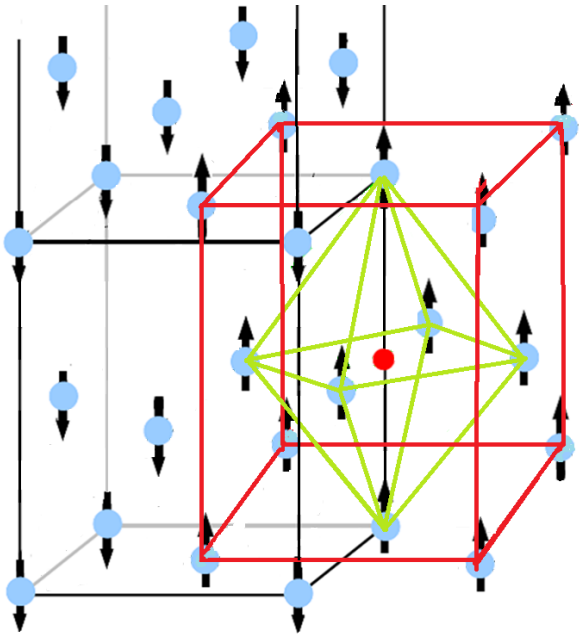


Рис. 2. Ферромагнитный октаэдр и ферромагнитный куб

Таблица

Значения энергии растворения атома
(результаты представлены для концентрации 3 ат. % углерода)

Статья	Состояние	Энергия, эВ
[11]	эксп. (парамагнитное)	0,42
[12]	эксп. (парамагнитное)	0,36
[13]	эксп. (парамагнитное)	0,42
[19]	АФМ1-т	0,263
Данная работа	АФМ1-к	–0,32
Данная работа	АФМ1-т	0,41
[16]	АФМД-т	0,55
[19]	АФМД-т	0,323
Данная работа	АФМД-к	0,34
Данная работа	АФМД-т	0,47

Из анализа таблицы видно, что магнитные состояния типа АФМ1-т, АФМД-к и АФМД-т подходят для описания энергии растворения углерода в ГЦК-железе, в то время как АФМ1-к приводит к значительной ошибке в величине рассчитанной энергии. Из всего вышесказанного можно сделать вывод о наличии сильного влияния магнитной структуры на свойства моделируемого ГЦК железа.

Таким, образом, в результате проведенных исследований:

1) были найдены: энергия растворения приходящаяся на один атом углерода (при концентрации 3 ат.%);

2) растворение одиночного атома C в кубическом АФМ1 ГЦК-железе, увеличивает параметр решётки с 3,49 Å до 3,525 Å, и расталкивает ближайшие атомы железа на 6,3 %;

3) при растворении одиночного атома C в кубическом и тетрагональном АФМ1 железе происходит образование ферромагнитного октаэдра в первом окружении и ферромагнитного куба во-втором;

4) для описания энергии растворения углерода в ГЦК-железе, подходят АФМ1-т, АФМД-к и АФМД-т состояния железа.

Библиографический список

1. Мирзоев, А.А. Первопринципные расчеты энергии смешения и магнитных моментов компонентов сплавов Fe-Mn, Fe-Cr и Fe-Ni с ОЦК и ГЦК решетками / А.А. Мирзоев, М.М. Ялалов, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 10. – С. 84–94.

2. Мирзаев, Д.А. Устойчивость решетки аустенита высоконикелевого сплава железа по отношению к мартенситному превращению / Д.А. Мирзаев, Е.А. Каблиман, А.А. Мирзоев // «Физика металлов и металловедение». – 2012. – Т. 113, № 8. – С. 816–820.

3. Ридный, Я.М. Ab-initio моделирование влияния ближнего окружения примесей углерода на энергию их растворения в ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5, № 2. – С. 108–116.

4. Мирзаев, Д.А. О равновесной концентрации вакансий в сплавах железа с водородом / Д.А. Мирзаев, А.А. Мирзоев, К.Ю. Окишев, А.Д. Шабуров, Г.Е. Рузанова, А.В. Урсаева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – № 11. – С. 97–104.

5. Урсаева, А.В. Ab initio моделирование взаимодействия водорода с точечными дефектами в ОЦК-железе / А.В. Урсаева, М.С. Ракитин, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 10. – С. 114–119.

6. Урсаева, А.В. AB initio-моделирование комплексов водород-вакансия (VHn) в ОЦК-железе / А.В. Урсаева, А.А. Мирзоев, Г.Е. Рузанова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2011. – № 36. – С. 51–55.

7. Мирзаев, Д.А. Образование водород-вакансионных комплексов в альфа-железе / Д.А. Мирзаев, А.А. Мирзоев, К.Ю. Окишев, А.Д. Шабуров, Г.Е. Рузанова, А.В. Урсаева // «Физика металлов и металловедение». – 2012. – Т. 113, № 10. – С. 923–926.

8. Чирков, П.В. Межчастичный потенциал в системе железо-углерод и проблема мартенситного перехода / П.В. Чирков, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5. – № 1. – С. 114–118.

9. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия / Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев. – М.: Металлургия, 1982. – 632 с.

10. Курдюмов, Г.В. Превращения в железе и стали / Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. – М.: Наука, 1977. – С. 236.

11. Могутнов, Б.М. Термодинамика сплавов железа / Б.М. Могутнов, И.А. Томилин, Л.А. Шварцман. – М.: Металлургия, 1984. – 206 с.

12. Gustafson P. Thermodynamic evaluation of the Fe-C system / P. Gustafson // Scandinavian Journal of Metallurgy. – 1985. – V. 14, Iss. 5. – Pp. 259–267.

13. Lobo, J.A. Thermodynamics of carbon in austenite and Fe-Mo austenite / J.A. Lobo, G.H. Geiger // Metallurgical Transactions A. – 1976. – Vol. 7, № 8. – Pp. 1359–1364.

14. Acet, M. The Role of the Nature of Magnetic Coupling on the Martensitic Transformation in Fe-Ni / M. Acet, E.F. Wassermann, K. Andersen et al. // Journal de Physique IV France. – 1997. – Vol. 7, № C5. – Pp. 401–404.

15. Weiss, R.J. Components of the Thermodinamic Functions of Iron / R.J. Weiss, K.J. Tauer // Physical Review. – 1956. – Vol.102. – № 6. – Pp. 1491–1495.

16. Boukhvalov, D.W. Magnetism and Local Distortions near Carbon Impurity in g-Iron / D.W. Boukhvalov, Y.N. Gornostyrev, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein // Physical Review Letters. – 2007. – Vol. 99. – Pp. 247205.

17. Medvedeva, N.I. Magnetism in bcc and fcc Fe with carbon and manganese / N.I. Medvedeva, D.V. Aken, J.E. Medvedeva // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2010. – Vol. 22. – P. 316002.

18. Herper, H.C. Ab initio full-potential study of the structural and magnetic phase stability of iron / H.C. Herper, E. Hoffmann, P. Entel // Physical Review B. – 1999. – Vol. 60. – Pp. 3839–3848.

19. Hepburn, D.J. First-principles study of helium, carbon, and nitrogen in austenite, dilute austenitic iron alloys, and nickel / D.J. Hepburn, D. Ferguson, S. Gardner, G.J. Ackland // Physical Review B. – 2013. – Vol. 88. – P. 024115.

20. URL: http://supercomputer.susu.ac.ru/computers/tornado/.

21. Jiang, D.E. Carbon dissolution and diffusion in ferrite and austenite from first principles / D.E. Jiang, E.A. Carter // Physical Review B. – 2003. – Vol. 67. – P. 214103.

К содержанию

УДК 546.26

СТРУКТУРА ЭКЗОЭДРАЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ С АТОМАМИ СЕРЫ

С.А. Созыкин, В.П. Бескачко

В связи с проблемой функционализации углеродных нанотрубок рассматриваются закономерности структурообразования экзоэдральных адсорбционных комплексов S_n-(7,7) в их основном состоянии при последовательном увеличении концентрации атомов серы. В рамках теории функционала электронной плотности и с использованием периодических граничных условий изучается фрагмент УНТ, содержащий 112 атомов углерода и n=4÷9 атомов S. Показано, что энергетически наиболее выгодные конфигурации атомов серы при n=4÷6 могут рассматриваться как конфигурации свободных кластеров серы S_n, слегка деформированные полем трубки. Начиная с n=6 обнаруживается тенденция к образованию ленточных структур шириной в 2 атома серы, стремящихся при увеличении n ориентироваться поперек оси трубки. Во всех рассмотренных случаях атомы серы находятся на расстояниях от поверхности трубки порядка 0,28 нм и более, что исключает возможность образования прочных (ковалентных) химических связей с углеродным каркасом.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, экзоэдральный комплекс, атомная структура, компьютерное моделирование, расчеты из первых принципов.

Практически с момента открытия углеродных нанотрубок (УНТ) стали появляться исследования, направленные на модификацию их физико-химических свойств [1]. Оказалось, что подобной модификации можно добиться путем адсорбции атомов различной химической природы на поверхности нанотрубок. Это пробудило интерес к экзо- и эндоэдральным комплексам УНТ. По этой причине, а также в связи практическими приложениями [2, 3], нами ранее были изучены механические [4, 5] свойства индивидуальных нанотрубок, а также структура [6-8], механические [7, 9, 10] и электрические [9, 11] свойства комплексов УНТ с рядом химических элементов. Среди полученных результатов отметим определение закономерностей структурообразования в эндоэдральных комплексах с участием щелочных металлов во всем интервале их концентраций вплоть до предельно возможных [8]. Показано, например, что в окрестности предельной концентрации атомы лития упорядочиваются в трубчатую структуру, схожую со структурой золотых нанотрубок [12–14]. Гораздо меньше информации известно об экзоэдральных комплексах УНТ с атомами-акцепторами – галогенами и халькогенами, хотя такие комплексы с серой наблю-

дались экспериментально еще в 1994 году [15]. Теоретически обсуждались лишь комплексы с малой [16] концентрацией серы. В настоящее время не ясно, как происходит структурообразование в процессе последовательного заполнения внешней поверхности нанотрубки атомами серы, то есть в условиях, реализующихся на опыте. В настоящей работе делается попытка проследить этот процесс с помощью компьютерных экспериментов.

При теоретическом изучении электронных свойств углеродных нанотрубок применялись различные подходы [17–19], наиболее распространенным среди которых является ab-initio метод функционала электронный плотности. Все приведенные в работе результаты получены с использованием этого метода, реализованного в пакете SIESTA [20]. Выбирались обменно-корреляционный функционал Каперлея и Алдера (CA) и базисный набор DZP.

Как показал опыт решения подобных задач [8], с имеющимися у нас вычислительными ресурсами (вычислительный кластер ЮУрГУ Торнадо – 473,64 Тфлоп пиковой производительности) за обозримое время счета доступна для рассмотрения модель УНТ (7,7), имеющая диаметр d и длину l около 1 нм и содержащая n_0= 112 атомов углерода. Модель помещалась в параллелепипед с размерами $a \times a \times l$, ось трубки проходила через центры квадратных граней. Имитация бесконечно-длинной трубки получалась с помощью периодических граничных условий, размер a выбирался достаточно большим ($a \cong$ 10 нм), чтобы взаимодействием трубки со своими изображениями можно было пренебречь.

На предварительном этапе расчетов проводилась оптимизация геометрии индивидуальной нанотрубки. После оптимизации длины связей C-C () оказались в диапазоне 0,143–0,144 нм, что хорошо согласуется с длинами связей в графене (0,142 нм). На следующем этапе вблизи поверхности УНТ помещалось n атомов серы и проводилась оптимизация геометрии полученной системы. Для каждого n рассматривалось несколько стартовых конфигураций атомов серы и из них определялась энергетически наиболее выгодная. Стартовые конфигурации отличались друг от друга степенями компактности и связности. В некомпактных и несвязных конфигурациях атомы статистически равномерно размещаются по поверхности трубки, находясь на больших, порядка $2l_{CC}$ и больше, расстояниях друг от друга. Предельно компактные и связные конфигурации отвечают плотным поверхностным упаковкам атомов S. При создании стартовой конфигурации мы не заботились о том, что такие упаковки актуально могут и не существовать по химическим соображениям. В процессе оптимизации атомы S могли испытывать существенные перемещения – порядка длины связей C-C, так что оптимальная конфигурация могла заметно отличаться от стартовой, см. например, рис. 1.

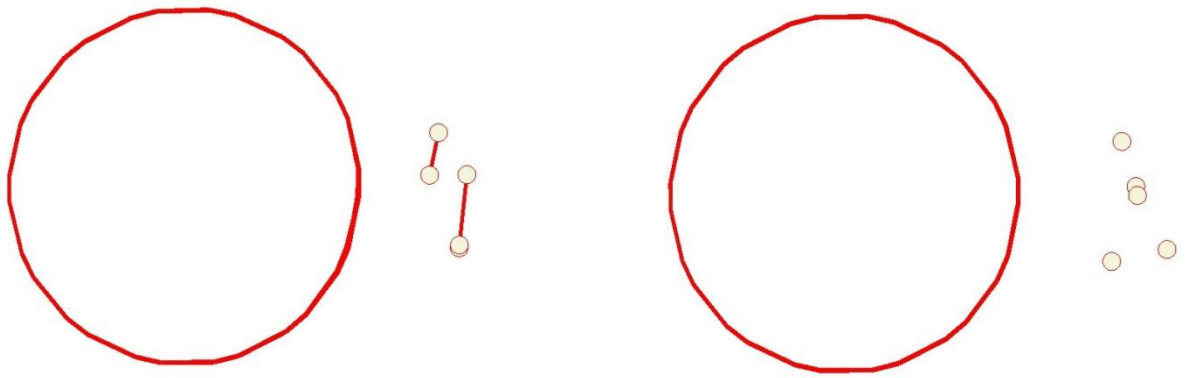


Рис. 1. Стартовая (слева) и оптимизированная (справа) структура комплекса УНТ (7,7) при *n=5* атомов серы

В предыдущей работе [21] мы рассмотрели случаи, когда $n = 1,2,3$. Было установлено, что одиночный атом серы предпочитает располагаться над серединой С-С-связи каркаса нанотрубки на расстоянии 0,189 нм от атомов углерода, образующих эту связь. Это расстояние заметно больше, чем длина ковалентной С-S-связи в сероуглероде CS_2 (0,155 нм) и очень близко к длине связи S-S в димерах и тримерах серы (0,189 нм [22] и 0,192 нм [23], соответственно).

Для случая адсорбции *n* = 4 атомов серы на поверхности УНТ было рассмотрено 5 стартовых конфигураций. После оптимизации каждой из них оказалось, что наименьшей энергией обладала цепочечная конфигурация (см. рис. 2), в которой атомы серы находились на расстоянии 0,28 нм от стенки нанотрубки, а 3 кратчайших расстояния S-S составляли (в порядке следования от одного конца цепочки к другому) 0,197, 0,220 и 0,197 нм. Два валентных угла S-S-S близки друг к другу и равны примерно 108°. Заметим, что длины двух «коротких» связей близки к межатомными расстояниями в димере и тримере серы. Кроме того, как показывают расчеты [24, 25], две подобные конфигурации (плоские, с симметрией) встречаются среди 8 равновесных конфигураций свободного кластера, хотя и не являются для него наиболее выгодными энергетически. В них длины «коротких» связей совпадают и равны 0,194 нм, а различаются только «длинные» связи (0,208 и 0,224 нм) и валентные углы (110° и 104°, соответственно). Таким образом, полученная нами структура из атомов серы может рассматриваться как результат небольшой деформации одной из равновесных конфигураций свободного кластера. Другими словами, можно сказать, что при формировании метананотрубки более важны взаимодействия между атомами серы, чем взаимодействия S-УНТ. Заметим также, что несвязные стартовые конфигурации приводили в процессе оптимизации к структуре, обладающей большей энергией (выше минимальной на 0,5–1,9 эВ).

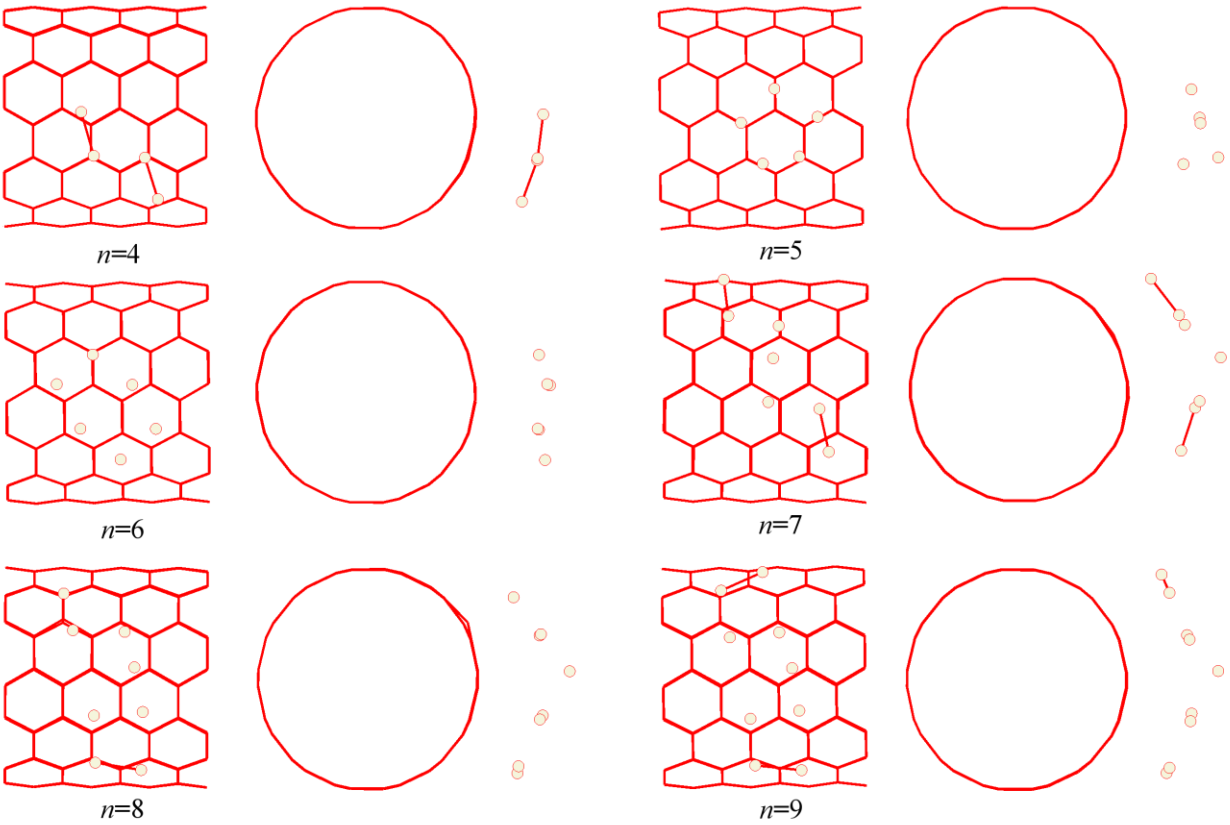


Рис. 2. Наиболее энергетически выгодные конфигурации при различном количестве *n* атомов серы

Среди 4 найденных равновесных конфигураций экзоэдрального комплекса УНТ с $n = 5$ атомами серы наименьшей энергии соответствовала структура, в которой атомы серы образуют пятиугольник, атомы которого расположены на расстояниях от 0,28 до 0,41 нм от стенки УНТ. Длины связей в пятиугольнике лежат в диапазоне от 0,204 до 0,224 нм. Расчеты свободных кластеров [24, 25] показывают, что наиболее устойчивыми являются 2 замкнутые линейные конфигурации атомов серы - в виде пятиугольников. В первой из них одна из вершин пятиугольника «отогнута» от плоскости, содержащей оставшиеся 4 атома, а вторая конфигурация похожа на первую, только упомянутая плоскость слегка «скручена». Последняя конфигурация весьма похожа на ту, что получена нами, с той только разницей, что некоторые связи в кластере, взаимодействующем с трубкой, несколько длиннее (2,24 нм против 2,14 нм). Таким образом, предположение о превалировании взаимодействий S-S по сравнению с взаимодействиями S-УНТ оправдывается и в этом случае.

Для случая адсорбции $n = 6$ атомов серы минимальной энергии соответствовала структура, в которой сера образует ленту 3x2 атома. Расстояние от атомов до стенки УНТ находилось в диапазоне от 0,29 до 0,35 нм. Расстояния между ближайшими атомами серы находится в диапазоне

от 0,202 до 0,219 нм. Подобную конфигурацию также можно можно получить из равновесных конфигураций свободного кластера [24, 25] небольшой деформацией длин связей и валентных углов.

Тенденция к образованию «ленточных» конфигураций поддерживается при дальнейшем увеличении числа адсорбированных атомов S. При n = 7 формируется вытянутая структура шириной не более одной длины связи. Здесь атомы серы располагаются на расстояниях от 0,27 до 0,40 нм от стенки нанотрубки, а длины связей S-S лежат в диапазоне от 0,197 до 0,222 нм. Рассмотрение комплексов с n = 8 и 9 атомами S ничего качественно нового не добавляет: формируется лента с шириной в одну связь S-S и расстояния от атомов серы до стенки нанотрубки остается в том же диапазоне, что и при меньших концентрациях. Можно заметить только, что при увеличении концентрации атомов серы лента стремится ориентироваться перпендикулярно к оси нанотрубки.

Выводы

Таким образом, исследование модели экзоэдрального комплекса S_n-(7,7) позволяет утверждать, что:

1) в основном состоянии (состоянии с наименьшей энергией) атомы серы образуют вблизи поверхности УНТ компактные конфигурации, слабо связанные с трубкой, поскольку они находятся на расстояниях от ее поверхности порядка 0,28 нм и более, что исключает возможность образования прочных (ковалентных) химических связей;

2) при n=4÷6, то есть при концентрации серы 4–5 ат. % конфигурации атомов серы могут рассматриваться как конфигурации свободных кластеров серы S_n, слегка деформированные полем трубки;

3) начиная с n=6, обнаруживается тенденция к образованию атомами серы ленточных структур шириной в 2 атома, стремящихся при увеличении n ориентироваться поперек оси трубки.

Библиографический список

1. Елецкий, А.В. Сорбционные свойства углеродных наноструктур / А.В. Елецкий // Успехи физических наук. – 2004. – Т. 174. – С. 1191–1231.

2. Yuan, L. Improvement of cycle property of sulfur-coated multi-walled carbon nanotubes composite cathode for lithium/sulfur batteries / L. Yuan, H. Yuan, X. Qiu, L. Chen,W. Zhu // Journal of Power Sources. – 2009. – Т. 189. – Pp. 1141–1146.

3. Demoncy, N. Filling carbon nanotubes with metals by the arc-discharge method: the key role of sulfur / N. Demoncy, O. Stéphan, N. Brun, C. Colliex, A. Loiseau, H. Pascard // Eur. Phys. J. B. – 1998. – Т. 4. – Pp. 147–157.

4. Бескачко, В.П. Механические свойства однослойных углеродных нанотрубок / В.П. Бескачко, С.А. Созыкин, Е.Р. Соколова // Все материалы. Энциклопедический справочник. – 2010. – № 7. – С. 19–23.

5. Созыкин, С.А. Квантово-химическое моделирование процессов деформации хиральных углеродных нанотрубок / С.А. Созыкин, Е.Р. Соколова, К.А. Тельной, В.П. Бескачко, Г.П. Вяткин // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5. – № 1. – С. 95–99.

6. Созыкин, С.А. Взаимодействие углеродных нанотрубок (7,7) и (8,8) с внедренными атомами / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2010. – № 9 (185). – С. 87–91.

7. Тельной, К.А. Структура и механические свойства фторированных углеродных нанотрубок / К.А. Тельной, С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2012. – № 34. – С. 191–194.

8. Sozykin, S.A. Structure of endohedral complexes of carbon nanotubes encapsulated with lithium and sodium / S.A. Sozykin, V.P. Beskachko // Molecular Physics. – 2013. – Т. 111. – № 7. – Pp. 930–938.

9. Созыкин, С.А. Зависимость электрического сопротивления углеродной нанотрубки с металлическим типом проводимости от механического нагружения и интеркалирования серой / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 32 (249). – С. 115–119.

10. Созыкин, С.А. Механические свойства комплексов углеродной нанотрубки (7,7) с одиночными атомами Li, Na, S и Se / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2012. – № 34. – С. 182–185.

11. Созыкин, С.А. Электрические свойства комплексов углеродной нанотрубки (7,7) с одиночными атомами Li, Na, S и Se / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2012. – № 34. – С. 113–119.

12. Миронов, Г.И. Исследование структурных элементов золотых нанотрубок в модели Хаббарда / Г.И. Миронов, Е.Р. Филиппова // Физика металлов и металловедение. – 2012. – Т. 113. – № 1. – С. 11.

13. Миронов, Г.И. Исследование золотых нанотрубок хиральностей (4,3) и (5,3) в модели Хаббарда / Г.И. Миронов, Е.Р. Филиппова // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – № 8. – С. 1600–1605.

14. Филиппова, Е.Р. Теоретическое исследование структурных элементов одностенной золотой нанотрубки хиральности (5, 3) в модели Хаббарда / Е.Р. Филиппова, Г.И. Миронов // Физика низких температур. – 2011. – Т. 37. – № 6. – С. 644–650.

15. Dujardin, E. Capillarity and Wetting of Carbon Nanotubes / E. Dujardin, T. W. Ebbesen, H. Hiura, K. Tanigaki // Science. – 1994. – V. 265. – I. 5180. – Pp. 1850–1852.

16. Lu, X. Selected absorption behavior of sulfur on single-walled carbon nanotubes by DFT / X. Lu, C. Sun, F. Li, H.-M. Cheng // Chemical Physics Letters. – 2008. – Vol. 454. – N 4–6. – Pp. 305–309.

17. Арутюнова, Т.Э. Энергетический спектр и корреляционные функции кластеров углеродных нанотрубок хиральности (5,5) / Т.Э. Арутюнова, Г.И. Миронов, А.И. Мурзашев // Физика твердого тела. – 2012. – Т. 54. – № 9. – С. 1797–1807.

18. Мурзашев, А.И. Изучение электронных свойств ионизированных углеродных нанотрубок в модели Хаббарда / А.И. Мурзашев // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2010. – Т. 53. – № 10. – С. 47–51.

19. Мурзашев, А.И. Энергетический спектр и оптические свойства одностенных углеродных нанотрубок / А.И. Мурзашев, Е.О. Шадрин // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 7. – С. 62–69.

20. Soler, M. The SIESTA method for ab initio order- N materials / M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. Garc, J. Junquera, P. Ordej, S. Daniel // J. Phys.: Condens. Matter. – 2002. – 2745. – Pp. 2745–2779.

21. Созыкин, С.А. Неэмпирическое моделирование свойств эндо- и экзоэдральных комплексов углеродных нанотрубок: дис. ... канд. физ.-мат. наук / С.А. Созыкин. – Челябинск, 2013. – 158 с.

22. Смирнов, Б.М. Свойства димеров / Б.М. Смирнов, А.С. Яценко // Успехи физических наук. – 1996. – Т. 166. – С. 226–245.

23. McCarthy, M.C. The Rotational Spectrum and Geometrical Structure of Thiozone / M.C. McCarthy, S. Thorwirth, C.A. Gottlieb, P. Thaddeus // J. American Chemical Society. – 2004. – V. 126. – Pp. 4096–4097.

24. Raghavachari, K. Structures and stabilities of sulfur clusters / K. Raghavachari, C. McM. Rohlfing, J.S. Binkley // J. Chem. Phys. – 1990. – 8. – Pp. 5862–5874.

25. Wong, M.W. Quantum-Chemical Calculations of Sulfur-Rich Compounds / M. W. Wong // Top Curr Chem. – 2003. – T. – C. 1–29.

К содержанию

УДК 532.6:51

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ СВОБОДНОГО ИСПАРЕНИЯ КАПЛИ ЖИДКОСТИ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЕЙ

В.Г. Речкалов

Приводится математическая модель процессов свободного испарения капли жидкости в воздухе и схема организации вычислительного процесса. Отмечены некоторые сложности реализации предлагаемого алгоритма и предлагаются методы их разрешения.

Ключевые слова: моделирование, метод конечных разностей, капля, жидкость, испарение.

Введение

Методом конечных разностей моделировались процессы испарения капли жидкости в воздушной среде. Процесс предполагался квазистационарным, и целью моделирования считалось нахождение его параметров методом установления. Скоростью движения границы раздела сред вследствие уменьшения объема капли в результате ее испарения мы пренебрегали.

Форма капли определяется из решения уравнения Лапласа для свободной поверхности жидкости.

Все уравнения математической модели приведены для осесимметричной задачи в ортонормированной цилиндрической системе координат.

Уравнения Навье-Стокса для несжимаемой жидкости [1, 2, 3].

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial r}+w\frac{\partial u}{\partial z}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P_{изб}}{\partial r}+\eta\left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}-\frac{u}{r^2}\right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t}+u\frac{\partial w}{\partial r}+w\frac{\partial w}{\partial z}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P_{изб}}{\partial z}+\eta\left(\frac{\partial^2 w}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial w}{\partial r}+\frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right)+\beta\left(T-T_0\right)g \quad (2)$$

Уравнение неразрывности:

$$\mathrm{div}\bar{V}=\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{u}{r}+\frac{\partial w}{\partial z}=0 \quad (3)$$

Уравнение теплопередачи для стационарного состояния:

$$\theta\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)-\frac{\partial T}{\partial r}u-\frac{\partial T}{\partial z}w=0 \qquad (4)$$

где u и w – проекции скорости; r и z – цилиндрические координаты; $P_{изб}$ – избыточное над гидростатическим давление; η – коэффициент кинематической вязкости жидкости; β – температурный коэффициент объемного расширения жидкости; T – температура; T_0 – температура окружающей среды в удалении от капли; ρ – плотность жидкости; θ – температуропроводность жидкости; g – ускорение свободного падения.

Введем новые переменные:

$$\omega=\left(\frac{\partial w}{\partial r}-\frac{\partial u}{\partial z}\right)$$ – вихрь или ротор, (5)

ψ – функция тока,

$$ru=-\frac{\partial\psi}{\partial z};\quad rw=\frac{\partial\psi}{\partial r} \qquad (6)$$

С учетом введенных переменных первые три уравнения преобразуются к виду:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+u\frac{\partial\omega}{\partial r}+w\frac{\partial\omega}{\partial z}-\frac{u\omega}{r}=\eta\left(\frac{\partial^2\omega}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\omega}{\partial r}+\frac{\partial^2\omega}{\partial z^2}-\frac{\omega}{r^2}\right)-\frac{g}{\rho_0}\frac{\partial\rho}{\partial r} \qquad (7)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}-\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=r\omega \qquad (8)$$

Граничные условия для функции тока и ротора

Для функции тока вдоль всей границы принимаем $\psi = 0$.

Ротор на оси симметрии равен нулю. Значения ротора на верхней границу на каждом шаге итерации вычисляется по формуле (5).

На поверхности капли ротор вычисляется по формуле:

$$\omega=\frac{1}{\mu}\frac{\partial\sigma}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial s}+2\frac{V_t}{R} \qquad (9)$$

где μ – коэффициент динамической вязкости жидкости; σ – коэффициент поверхностного натяжения; s – длина дуги контура капли; V_t – скорость жидкости на границе раздела фаз; R – кривизна меридиана капли.

Граничные условия для уравнения теплопередачи

Значение температуры на верхней границе считается заданной и постоянной.

На оси капли $\frac{\partial T}{\partial r} = 0$ (10)

На поверхности капли считается заданным тепловой поток:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} n_r + \lambda \frac{\partial T}{\partial z} n_z = -q \tag{11}$$

где λ – коэффициент теплопроводности жидкости; q – удельная плотность теплового потока к поверхности капли; n_1 и n_2 – направляющие векторы цилиндрической системы координат.

Процессы, протекающие в газовой фазе, моделируются теми же уравнениями динамики (7, 8) и уравнением теплопередачи (4). К этим уравнениям добавляется уравнение диффузии пара:

$$D\left(\frac{\partial^2 \rho_n}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \rho_n}{\partial r} + \frac{\partial^2 \rho_n}{\partial z^2}\right) - \frac{\partial \rho_n}{\partial r} u - \frac{\partial \rho_n}{\partial z} w = 0 \tag{12}$$

где D – коэффициент диффузии газа; p_n – плотность пара.

Граничные условия в газовой фазе

Температура на поверхности капли берется из решения задачи для жидкой фазы. Для точек на оси справедливо условие аналогичное условию (10). На всей остальной границе температура принимается равной температуре в лаборатории.

Плотность пара на поверхности капли принимается равной плотности насыщенного пара при соответствующей температуре. Испарение капли в эксперименте происходило в специальной камере с прозрачными непоглощающими боковыми стенками, поэтому на боковой границе должно выполняться условие: $\frac{\partial \rho_n}{\partial r} = 0$. Такое же условие выполняется на оси области. Истечение пара в эксперименте происходило через нижнюю или верхнюю границу камеры. Поэтому на верхней и нижней границе области плотность пара принимается равной плотности пара в лаборатории.

Для функции тока также вдоль всей границы принимаем $\psi = 0$.

Для ротора граничные значения для всей границы, за исключением криволинейной поверхности капли, вычисляются по формуле (5). Вдоль оси симметрии ротор равен нулю.

На криволинейной поверхности ротор вычисляется по формуле:

$$\mathrm{rot}\bar{V} = \omega = \frac{\partial V_t}{\partial r} - \frac{V_t}{R} \tag{13}$$

Схема алгоритма

Решение выполняется отдельно для жидкой и газовой фазы.

Шаг 1. Решение задачи для жидкой фазы при заданной постоянной плотности теплового потока на поверхности капли. Начальное значение плотности теплового потока назначается на основе экспериментальных данных или произвольно.

Шаг 2. Решение задачи для газовой фазы при заданных значениях температуры и скорости течения на поверхности капли. Значение температуры и скорости течения берется из решения для жидкой фазы. При этом воздух и пар считались смесью идеальных газов. При расчетах учитывалась зависимость теплоемкости, теплопроводности и вязкости от температуры и состава смеси на основе эмпирических данных.

Шаг 3. Решение задачи для жидкой фазы при заданных значениях плотности теплового потока и силах вязкого трения на границе раздела фаз.

Пункты 2 и 3 повторяются. Если расчетные значения на границе раздела фаз для двух последовательных повторений отличаются на малую величину, то решение считается найденным.

При реализации данного алгоритма мы столкнулись с целым рядом затруднений, разрешению которых и посвящена данная статья.

Особенности реализации

Первая проблема, с которой пришлось столкнуться – необходимость аппроксимации функции температуры на поверхности капли гладкой функцией. Основной причиной возникновения конвекции в испаряющейся жидкости является зависимость поверхностного натяжения жидкости от температуры. Касательные напряжения на поверхности рассчитываются по формуле:

$$\mathrm{rot}\bar{V} = \omega = \frac{\partial V_t}{\partial r} - \frac{V_t}{R}, \qquad (14)$$

где σ – поверхностное натяжение; T – температура на поверхности; s – длина дуги образующей поверхности капли; B – температурный коэффициент поверхностного натяжения.

Формула (14) предполагает вычисление производной от температуры по длине дуги на каждом шаге итерации.

Характерные особенности температурной зависимости хорошо аппроксимируется двумя кубическими параболами на двух интервалах (простейший сплайн).

$$T_{аппр} = \begin{cases} a_1x^3 + b_1x^2 + c_1x; при x \in [0,a] \\ a_2x^3 + b_2x^2 + c_2x + d_2; при x \in (a,L] \end{cases}$$

Коэффициенты уравнений и величины интервалов определяются из условия минимума суммы квадратов отклонений аппроксимирующей кривой от расчетной.

Среднеквадратичная относительная ошибка аппроксимации температуры 0,07 %

Следующая проблема, с которой пришлось столкнуться – это проблема запуска процесса вычислений. В самом начале работы программы наблюдается резкий рост значений функций ротора и тока в нескольких особенно «плохих» нерегулярных узлах вблизи криволинейной границы капли. Это приводит к неограниченному росту скоростей и появлению особенностей у температурного поля. В некоторых случаях проблему удается решить уменьшением шага итерации по времени. Изменением шага удается уменьшить количество «плохих» точек, но полностью избавиться от них невозможно. Особенно много плохих точек возникает при использовании мелких сеток: 200×200 и 300×300.

Наиболее радикальным средством решения этой проблемы является плавное приложение нагрузки. Мы использовали два варианта этого метода. В первом случае мы постепенно увеличивали величину плотности теплового потока к поверхности капли, начиная с некоторой малой величины, до достижения требуемого значения. Во втором случае мы поступали аналогичным образом с температурным коэффициентом поверхностного натяжения. Оба метода эффективно работают и приводят к одному и тому же решению в установившемся режиме. Важно, что подобную процедуру достаточно выполнить один раз. Если в дальнейшем понадобится выполнить расчет при других граничных условиях, достаточно использовать одно из уже имеющихся решений в качестве начального состояния капли, чтобы избежать приграничного расхождения функций.

После решения задачи для жидкой фазы мы получаем значения температуры и скорости в узлах на поверхности границы раздела фаз. Эти значения используются при расчетах в газовой фазе в качестве граничных условий. Для переноса этих значений на другую сетку, которая используется в дальнейших расчетах мы использовали степенную аппроксимацию с определением коэффициентов по методу наименьших квадратов.

Расчеты в газовой сфере (шаг 2), обладая собственной спецификой, выполняются в два этапа. На первом этапе выполняется предварительный расчет с использованием блочно-регулярной сетки. На втором этапе производится более подробный расчет на мелкой равномерной сетке в относительно малой области, окружающей каплю.

Одной из проблем, связанных с расчетами в газовой фазе, является проблема граничных условий. Естественно считать состояние атмосферы вдали от испаряющейся капли невозмущенным. В этом случае предполагается, что движение газа на границах области отсутствует а плотность пара испаряющейся жидкости равна среднему значению этой величины в лаборатории. Температура на границе области также может считаться равной температуре в лаборатории.

Однако это допущение тем точнее, чем больше размеры области по сравнению с размерами испаряющейся капли. С другой стороны, чем большую мы выбираем область для расчетов, тем больше получаем неизвестных. С другой стороны наиболее точные и подробные значения расчетных величин в данной задаче нас интересуют в основном на поверхности капли и вблизи нее.

Данная проблема частично решается за счет использования при расчетах блочно-регулярных сеток. Ячейки самой мелкой сетки вблизи поверхности капли неразличимы. Использование блочно-регулярной сетки позволило существенно сократить количество неизвестных при расчетах в газовой фазе.

Скорость расчетов при использовании блочно-регулярной сетки была достаточно большой для того, чтобы визуально наблюдать развитие конвективных процессов во времени. Для капли воды были выполнены расчеты при различной влажности воздуха в лаборатории. Обнаружено различное направление конвективных вихрей при низкой и высокой влажности воздуха.

Вычисления первого шага моделирования в газообразной среде заканчиваются определением значений температуры, функции тока и плотности пара вдоль прямоугольной границы.

Дальнейшие расчеты выполняются в малой области на равномерной мелкой сетке, что позволяет получить детальный характер функций массового и теплового потоков на поверхности раздела фаз.

Заключение

Особенности моделирования процессов испарения капли жидкости методом конечных разностей в большой степени определяются важной ролью в этих процессах явлений на криволинейной границе раздела фаз с одной стороны, и нерегулярным характером расположения узлов сетки вдоль этой границы с другой стороны. На поверхности протекают процессы испарения жидкости, поглощения тепла, возникают поверхностные силы, ответственные за конвективные течения внутри жидкости. В то же время нерегулярный характер расположения узлов сетки на границе раздела затрудняет, а в некоторых случаях даже делает невозможным расчет значе-

ний некоторых величин (поверхностный градиент температуры) на поверхности. Для решения данной проблемы в нашей работе использовалась аппроксимация гладкими функциями. Поскольку при решении задачи приходилось использовать последовательно три различные сетки, для переноса информации с одной сетки на другую также использовалась аппроксимация.

Отличительной чертой нашей работы является и то, что широко использовались эмпирические зависимости поверхностного натяжения от температуры для жидкости и коэффициента теплоемкости, теплопроводности, температуропроводности и вязкости от температуры и состава газа для газовой фазы. Для использования этих зависимостей, большая часть которых представлена в табличной форме, мы также использовали аппроксимацию.

Выбор аппроксимирующей функции для каждого случая определялся индивидуально.

Особенности расчетов в газообразной фазе проистекали из противоречия между необходимостью рассматривать процессы в достаточно большой области и потребностью иметь наиболее точные и подробные значения выходных функций на границе раздела фаз. Для разрешения данного противоречия мы разделили процедуру вычисления параметров на два этапа. На первом этапе, используя блочно-регулярную сетку, мы получили общую картину в большой области. На втором этапе эту картину детализировали в области непосредственно прилегающей к границе раздела фаз.

Конечно, нельзя здесь не сказать и процедуре начального запуска процесса вычислений. Особенность, с которой мы столкнулись, конечно имеет общий характер для всех динамических моделей. Наличие «плохих» нерегулярных точек на криволинейной поверхности и вблизи нее, характерных для метода конечных разностей, еще более затрудняет успешный старт программы вычислений. Задание мягкого постепенного приложения в нашем случае тепловой нагрузки может считаться общим методом решения подобных проблем.

На основе выполненных расчетов для воды и толуола были получены значения температуры и давления на поверхности жидкости и произведена оценка искажения формы испаряющейся капли в соответствие с методикой, описанной в [6]. Сравнение расчетных искажений с экспериментальными данными, полученными в соответствии с методиками, приведенными в статьях [4, 5], дали удовлетворительные результаты.

Для толуола и воды были определены погрешности в определении поверхностного натяжения, связанные с искажением формы капли, которые оцениваются соответственно в 2,5 % и 0,5 %.

Библиографический список

1. Седов, Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1. / Л.И. Седов. – М: Наука, 1983. – 528 с.

2. Бараш, Л.Ю. Испарение и динамика лежащей на подложке капли: дис. … канд. ф.-мат. наук. – М., 2009.

3. Берковский Б.М. Вычислительный эксперимент в конвекции / Б.М. Берковский, В.К. Полевиков. – Мн.: Университетское, 1988. – 167 с.

4. Речкалов, В.Г. Определение радиуса кривизны в вершине лежащей капли по наблюдениям картин интерференции / Г.П. Пызин, В.Л.Ушаков, В.Г. Речкалов, В.П. Бескачко // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2009. – Вып. 1. – № 22 (155) – С. 91–96.

5. Речкалов, В.Г. Компьютерная обработка изображения в методе определения коэффициента поверхностного натяжения жидкости по форме поверхности капли / В.Г. Речкалов, В.Л. Ушаков, Г.П. Пызин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2010. – Вып. 3. – № 30(206) – С. 83–88.

6. Речкалов, В.Г. Моделирование процесса измерения поверхностного натяжения по форме поверхности капли при наличии погрешностей формы и положения державки капли / В.Г. Речкалов // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Том. 5. – №1 – С. 88–94

К содержанию

УДК 532.6 + 531.715.1

НЕМОНОТОННЫЙ ХАРАКТЕР ИСПАРЕРИЯ ЛЕЖАЩЕЙ КАПЛИ

В.Л. Ушаков, Г.П. Пызин

По результатам проведенных экспериментов с испаряющейся каплей воды установлено, что скорость ее испарения носит немонотонный характер. Степень немонотонности зависит от температуры окружающей среды. Сделана попытка обосновать немонотонность скорости испарения присутствием градиента давления пара над поверхностью капли, вызванного различной кривизной фазовой границы капли.

Ключевые слова: испарение лежащей капли; скорость испарения; давление пара; интерференционные метод.

Введение

Испарение – эндотермический процесс, при котором поглощается теплота фазового перехода – теплота испарения, затрачиваемая на преодоление сил молекулярного сцепления в жидкой фазе и на работу расширения при превращении жидкости в пар. Скорость испарения определяется поверхностной плотностью потока пара, проникающего за единицу времени в газовую фазу с единицы поверхности жидкости. При наличии над жидкостью относительно плотной газовой среды испарение замедляется вследствие того, что скорость удаления молекул пара от поверхности жидкости в газовую среду становится малой по сравнению со скоростью испускания их жидкостью. При этом у поверхности раздела фаз образуется слой парогазовой смеси с практически насыщенный паром. Парциальное давление и концентрация пара в данном слое выше, чем в основной массе парогазовой смеси. Нарушение термодинамического равновесия между жидкостью и паром, содержащимся в парогазовой смеси, объясняется скачком температуры на границе раздела фаз. Однако обычно этим скачком пренебрегают и считают, что парциальное давление и концентрация пара у поверхности раздела фаз соответствуют их значениям для насыщенного пара, имеющего температуру поверхности жидкости.

Если жидкость и парогазовая смесь неподвижны и влияние свободной конвекции в них незначительно, удаление образовавшегося при испарении пара от поверхности жидкости в газовую среду происходит в основном в результате молекулярной диффузии и появления потока парогазовой смеси, направленного от поверхности жидкости в газовую среду.

При исследовании испарения лежащей капли и оценке зависимости давления насыщенного пара над лежащей каплей считают, что плотность пара над всей поверхностью капли постоянна [1], тогда изменение скорости испарения капли будет монотонным и при всех равных прочих условиях, будет зависеть от радиуса капли.

Данные рассуждения верны только для сферических капель и достаточно близко соответствует очень маленьким лежащим каплям воды (r << 1 мм), которые по форме действительно близки к сфере.

Совершенно другую форму приобретает лежащая капля больших размеров. Она существенно отличается от сферы. На рис. 1 приведена форма лежащей капли воды с радиусом кривизны в вершине $r =$ 7,54 мм и объёмом $V =$ 84,7 мм^3.

Рис. 1. Форма лежащей капли воды капли с высотой $h = 2{,}27$ мм и радиусом основания $R = 4{,}37$ мм (фото)

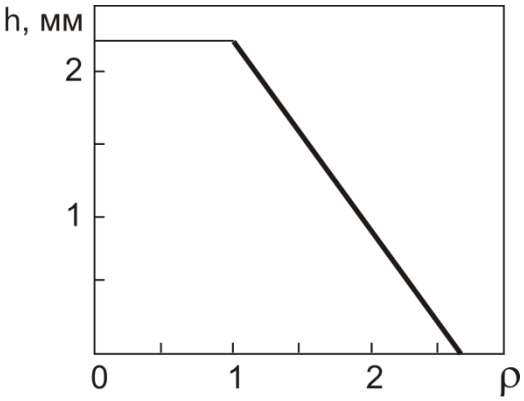


Рис. 2. Зависимость приведенной кривизны ρ поверхности капли от высоты капли

Ранее нами была предложена методика [2] наблюдения параметров формы капли в процессе ее испарения, обладающая высокой разрешающей способностью и безинерционностью. Она позволяет регистрировать изменение высоты капли с точностью до десятых долей длины волны света оптического диапазона ($\lambda \sim 0{,}7$ мкм) и определять радиус кривизны капли в ее вершине с точностью до десятых долей миллиметра [3].

Используя уравнение Лапласа, преобразуем это уравнение к виду:

$$\frac{r}{r_1} + \frac{r}{r_2} = 2 + \beta \cdot \frac{z}{r}, \qquad (1)$$

где $\beta = \dfrac{g \cdot \delta \cdot r^2}{\sigma}$ – безразмерный коэффициент,

g – гравитационная постоянная,

δ – плотность жидкости,

z – координата точки на поверхности капли (начало координат расположено в вершине капли, ось Z направлена вниз, ось X направлена вправо),

r – радиус кривизны в вершине капли,

r_1 – меридиональный радиус кривизны поверхности капли в т. (x, z),

r_2 – окружной радиус кривизны поверхности капли в т. (x, z).

Оценим геометрию капли.

Левая часть уравнения (1) – суть, удвоенная кривизна поверхности капли в точке (x, z) умноженная на r. В точке с координатами (0,0) она равна $2 \cdot \rho = 2 \cdot r$. Преобразуем (1) к виду:

$$\rho = 1 + \frac{\beta}{2} \cdot \bar{z}, \tag{2}$$

где $\rho = \frac{r}{2 \cdot r_1} + \frac{r}{2 \cdot r_2}$ (назовем приведенной к r кривизной в точке с координатой z),

$\bar{z} = \frac{z}{r}$ (приведенная к r координата z).

Из (2) видно, что кривизна линейно увеличивается от вершины к основанию капли. Для определения численных значений ρ необходимо найти β.

Как было указано выше, с использованием методов голографической интерферометрии, мы можем определить радиус кривизны r в вершине капли. Тогда, используя численный метод Адамса-Башфорта-Мултона, можно построить поверхность лежащей капли в зависимости от β. Подобрав наилучшее совпадение расчетного профиля капли с реальным профилем (рис. 1) можно определить значение β и σ. Была разработана программа для расчета β, использующая параметры профиля капли.

Для капли на рис. 1 значение $\beta = 11{,}1$ при относительной высоте $z = h / r = 2{,}27/7{,}54 = 0{,}301$. Таким образом, перепад кривизны по высоте капли составляет (с учетом, что в вершине капли $z = 0$, у основания $z = 0{,}301$):

$$\rho = 1 + \frac{\beta}{2} \cdot z = 2{,}67. \tag{3}$$

Согласно формуле Лапласа, выражающей избыток давления пара над искривленной поверхностью жидкости (например, поверхностью лежащей капли):

$$\Delta P = \sigma \cdot \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right). \tag{4}$$

Преобразуем это выражение к виду (см. (2)):

$$\Delta P = \frac{2 \cdot \sigma \cdot \rho}{r}. \tag{5}$$

С учетом (3) можно говорить что ΔP пропорционально ρ и давление пара над фазовой границей капли (рис. 1) в вершине меньше, чем у ее основания, см. рис. 2.

В абсолютном выражении градиент давления составит лишь 2 % от общего давления, но при меньших размерах капли этот градиент будет расти. Наличие градиента давления вдоль поверхности капли приведет к

миграции молекул пара от краев капли к ее центру и увеличению давления пара в области вершины капли и ее окрестностей. Качественный анализ такой ситуации дает возможность предположить, что это приведет к замедлению скорости испарения капли. В дальнейшем, поскольку испарение в области окрестности вершины капли замедлилось, а диффузия паров воды во внешнее пространство продолжается, давление пара в означенной области упадет, что приведет к повышению скорости испарения капли.

Возникает механизм, который может привести к немонотонному характеру скорости испарения лежащей капли, т.е. скорость испарения капли будет то увеличиваться, то уменьшаться.

Эксперимент

Методика эксперимента, изложенная в [4], позволяет регистрировать изменение высоты вершины лежащей капли в процессе ее испарения.

Будем считать, что скорость испарения капли есть отношение текущего объема V_S капли высотой h к времени t ее испарения.

Экспериментально получена зависимость изменения высоты вершины лежащей капли от времени (рис. 3). Очевиден линейный характер этой зависимости (капля в течение всего эксперимента сохраняла радиус основания постоянным).

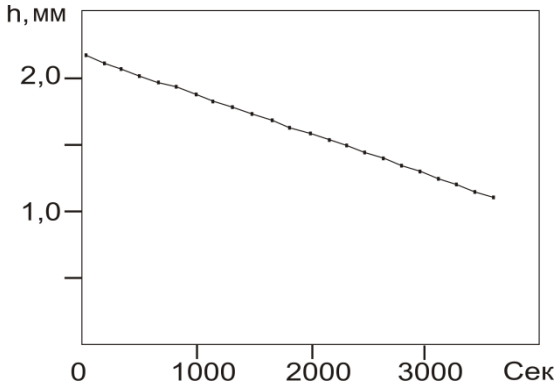


Рис. 3. Экспериментальный график
зависимости высоты капли от времени испарения

Аналогичные результаты были получены и в работе [5].

Используя программу для расчета β и данные эксперимента (рис. 3) мы произвели расчет изменения объема капли от времени. Результаты приведены на рис. 4.

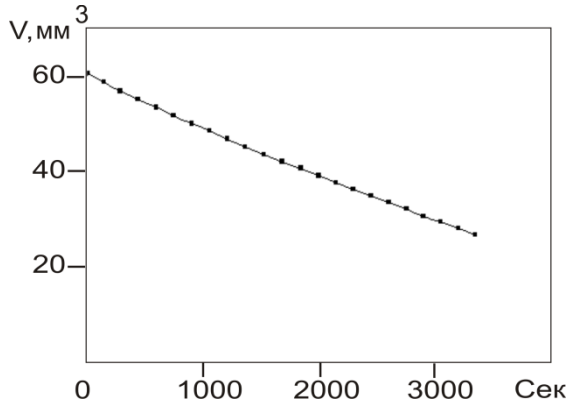


Рис. 4. Расчетный график зависимости
объёма капли от времени испарения

Как видно из рис. 4, изменение объема капли также можно считать линейно изменяющимся во времени.

Полученные результаты были сведены в один график (рис. 5) зависимости изменения объема капли от ее высоты. С некоторыми допущениями можно сказать, что эта зависимость линейна.

Следовательно, отношение V_S / t пропорционально h / t и, определяя изменение высоты капли, мы определяем изменение ее объема.

Таким образом, мы получили инструмент измерения скорости испарения капли в зависимости от времени ее испарения.

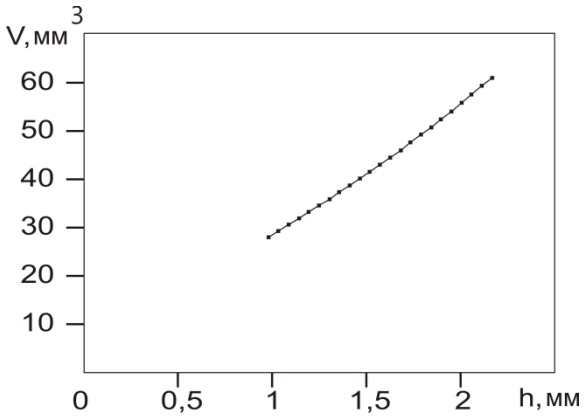


Рис. 5. Расчетный график зависимости
объёма капли от высоты в вершине капли

На рис. 6 приведена схема эксперимента, позволяющего на основе известных соотношений интерферометрии выразить изменение высоты капли Δh только через изменение интенсивности $I(t)$ в центре интерферограммы (рис. 7).

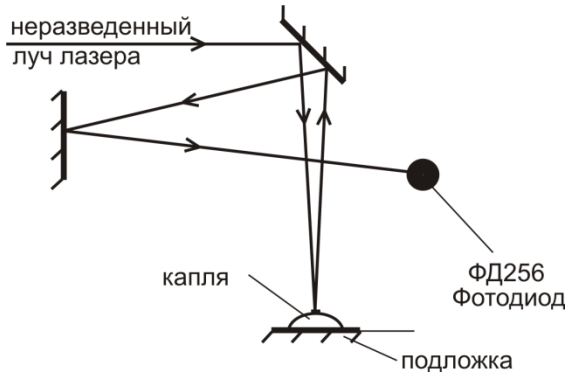


Рис. 6. Новая схема эксперимента

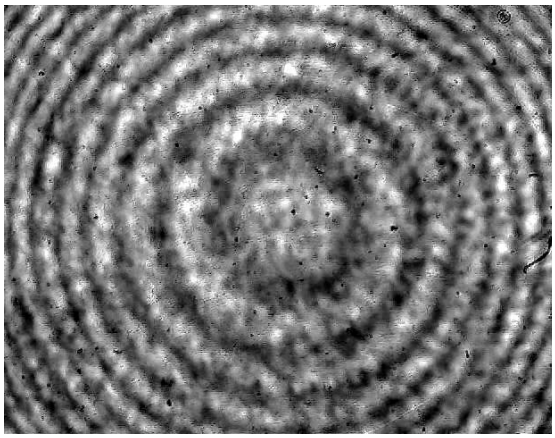


Рис. 7. Интерферограмма капли

Анализ расчетной схемы приводит к следующему выражению для Δh:

$$\Delta h = n \cdot \lambda, \tag{6}$$

где Δh – изменение высоты капли в ее вершине,

n – число максимумов (или минимумов) интерференционной картины, прошедших через фотодиод,

λ – длина волны излучения лазера (для He-Ne лазера ЛГН-215 λ=632,8 нм).

Поскольку при такой схеме эксперимента регистрируется интенсивность света только в небольшой области в центре интерферограммы (нет необходимости регистрировать и обрабатывать всю интерферограмму), регистрацию данных можно производить на высокой скорости.

Например, для гелий-неонового лазера, можно уверенно регистрировать изменение высоты капли с шагом 20–40 нм и скоростью выборки до 5 кГц.

Измерения скорости испарения капли от времени проводились при различной температуре окружающей среды. Были приняты меры для устранения конвективных потоков воздуха в зоне испаряющейся капли. Эксперимент проводился с использованием зеленого полупроводникового лазера мощностью ~ 2 мВт.

В ходе эксперимента регистрировалось изменение интенсивности в середине интерферограммы, что позволило получить информацию об изменении высоты лежащей испаряющейся капли согласно (6). На рис. 8 приведены фрагменты регистрируемой в процессе эксперимента интенсивности света в центре интерферограммы.

Можно визуально заметить, что скорость испарения (расстояние между максимумами) носит циклический характер. Частота волн повышается до третьей строки рис. 8, затем снова начинает уменьшаться.

Математическая обработка результатов эксперимента также показывает цикличность скорости изменения высоты капли, что с учетом рис. 5 позволяет говорить о немонотонном характере скорости испарения капли.

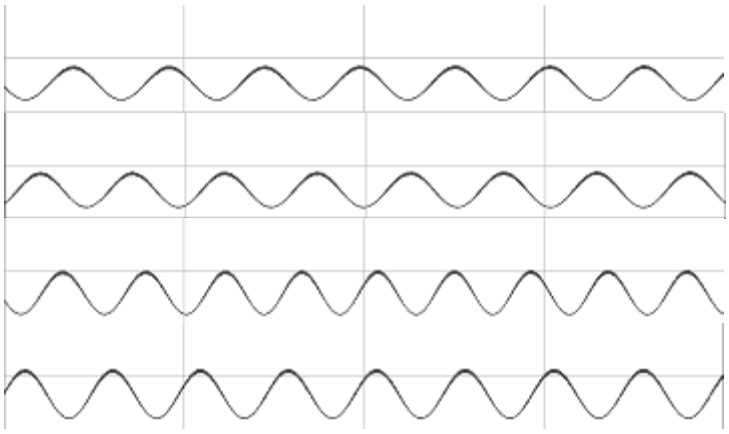


Рис. 8. Изменение интенсивности света
центра интерферограммы при уменьшении высоты капли
в процессе ее испарения

Вид спектра в низкочастотной области, вблизи частоты $f_{исп}$ ~1 Гц, показан на рис. 9. Это результат обработки изменения частоты следования полос интерферограммы от времени (рис. 10).

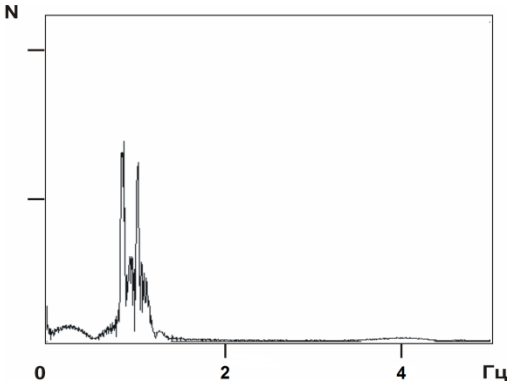


Рис. 9. Фурье-спектр $I(t)$ в области низких частот вблизи $f_{исп}$

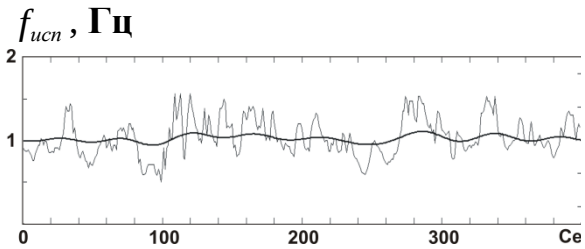


Рис. 10. Зависимость частоты следования полос интерференции, $f_{исп}$, от времени. Гладкая кривая – результат Фурье-фильтрации

Частота $f_{исп}$ определялась как величина обратная временному промежутку следования максимумов интенсивности (см. рис. 8) на интерферограмме. Для более точного позиционирования максимумов, экспериментальные данные (рис. 8) заменялись рядом Фурье с отбрасыванием членов высокого порядка для сглаживания кривой в области максимумов.

Фурье анализ (рис. 9) позволил увидеть, что испарение капли происходит то с одной скоростью (первый пик), то с другой скоростью (второй пик). Следует отметить, что эксперимент показал сближение этих пиков при понижении температуры окружающей среды с 24 ^{o}C до 18 ^{o}C вплоть

до полного их слияния (скорость испарения перестала носить немонотонный характер). На рис. 10 также видна цикличность частоты следования полос интерференции. Полученные результаты позволяют говорить о немонотонном характере испарения капли.

Заключение

Сделана попытка интерпретировать немонтонный характер испарения капли как следствие неоднородности параметров газовой среды на фазовой границе жидкость-газ.

В области низких частот $f_{исп}$ на диаграмме Фурье-спектра распределения скоростей испарения капли имеется широкий пик со сложной структурой. Структура этого пика может говорить о немонотонном характере скорости испарения лежащей капли.

Необходимо провести дальнейшие исследования скорости испарения капли в большем диапазоне температуры и влажности окружающей среды.

Библиографический список

1. Коренченко, А.Е. Численное моделирование свободных колебаний лежащей капли / А.Е. Коренченко, А.Ж. Илимбаева, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 4. – № 10(227). – С. 72–76.

2. Пызин, Г.П. Определение радиуса кривизны в вершине лежащей капли по наблюдениям картин интерференции / Г.П. Пызин, В.Л.Ушаков, В.Г. Речкалов, В.П. Бескачко // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2009. – Вып. 1. – № 22(155) – С. 91–96.

3. Пызин, Г.П. Оценка параметров интерферограмм, необходимых для определения радиуса кривизны в вершине лежащей капли / Г.П. Пызин, В.Л. Ушаков, В.Г. Речкалов, В.П. Бескачко // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2010. – Вып. 3. – № 30(206) – С. 95–100.

4. Ушаков, В.Л. Методика наблюдения малых движений поверхности лежащей капли в процессе ее испарения / В.Л. Ушаков, Г.П. Пызин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2013. – Т. 5. – № 2. – С. 117–122.

5. Пызин, Г.П. Измерение радиусов кривизны лежащих капель воды в процессе их испарения методом интерферометрии / Г.П. Пызин, В.Л. Ушаков, В.Г. Речкалов // Вестник ЮУГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2009. – Вып. 1. – № 22(155). – С. 87–90.

К содержанию

УДК 538.9 + 669.017:544.16

АТОМИСТИЧЕСКОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАТЕРИАЛОВ

А.А. Мирзоев

В обзоре обсуждена роль компьютерного моделирования в физическом материаловедении. Рассмотрены основы квантовой теории конденсированных сред. Обсуждены основные программные пакеты, используемые для моделирования. Дан краткий обзор применения компьютерного моделирования для исследования структуры металлов и сплавов и различных процессов в них.

Ключевые слова: атомистическое компьютерное моделирование, ab initio, конструкционные материалы.

Последние десятилетия были ознаменованы прорывом в создании теоретических основ и развитии алгоритмов и программ, позволившим говорить о создании первопринципного квантово-механического моделирования материалов на атомном уровне. Цель настоящей статьи – дать обзор основных методов компьютерного моделирования материалов, проиллюстрированный примерами исследований проведенных в последнее десятилетие на кафедре общей и теоретической физики ЮУрГУ.

Цели и задачи атомистического моделирования материалов. В настоящее время мало кто сомневается, что большая часть физики конденсированного состояния, химии и биологии может быть выведена из уравнений квантовой механики для системы электронов и ионов [1]. Квантовая механика доказала свою состоятельность, объяснив широкий круг явлений, таких как энергетические уровни атомов и молекул, природу ковалентной связи, различие металлов и изоляторов. Развитие квантово-механических расчетов [2] электронной структуры кристаллов (теория функционала электронной плотности, за которую В. Кон в 1998 г. удостоен Нобелевской премии) привело к возможности расчета большинства физических свойств материалов (параметры решетки, упругие константы, магнитные свойства, энергии основного состояния различных фаз). Такие методы, единственной требуемой информацией для которых является задание типов (атомных номеров) атомов, входящих в состав рассматриваемого вещества, принято называть ab initio (первопринципными) методами. При этом самым важным является возможность не просто моделирования, а прогнозирования свойств материалов, причем даже в необычных условиях (в центре Земли [3], например, при недоступных в экспериментальных лабораториях значениях температур и давлений).

Обзор используемых приближений. Для предсказания атомной и электронной структуры конденсированных тел требуется рассчитать полную кван-

тово-механическую энергию системы, и затем минимизировать ее по электронным и ядерным координатам. Расчеты полной энергии системы могут быть проведены только при использовании ряда определенных приближений.

Квантовомеханическое состояние любой системы описывается зависящим от времени уравнением Шредингера (УШ):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r,R)}{\partial t} = \hat{H} \cdot \Psi(r,R), \qquad (1)$$

где $\Psi(r,R)$ – волновая функция, зависящая от положения ионов R и электронов r; $\hat{H}$ – оператор Гамильтона:

$$\hat{H} = -\sum_{I=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2M_I} \frac{\partial^2}{\partial \bar{R}_I^2} - \sum_{i=1}^{n} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \bar{r}_i^2} - \sum_{I=1}^{N} \sum_{i=1}^{n} \frac{Z_I e^2}{\left|\bar{R}_I - \bar{r}_i\right|} + \frac{1}{2} \sum_{I=1}^{N} \sum_{\substack{J=1 \\ J \neq I}}^{N} \frac{Z_I Z_J e^2}{\left|\bar{R}_I - \bar{R}_J\right|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{e^2}{\left|\bar{r}_i - \bar{r}_j\right|}. \qquad (2)$$

Здесь M_i и Z_i – масса и заряд ионов, m и e – масса и заряд электронов. Первое и второе слагаемое – это кинетическая энергия ионов и электронов, третье, четвертое и пятое слагаемые – это потенциальная энергия ион-электронного, ион-ионного и электрон-электронного кулоновского взаимодействия.

Приближение Борна-Оппенгеймера. Из-за огромной разницы в массе между электронами и ядрами (при равенстве сил, действующих между частицами), электроны практически мгновенно реагируют на смещения ядер. По этой причине можно считать электроны движущимися в постоянном поле ионов, а ионы – медленно реалаксирующими в квазистационарном электронном газе (приближение Борна-Оппенгеймера). Движение ионов и электронов при этом становятся независимыми, и общая задача (1) сводится к последовательному решению задач для ионных и электронных степеней свободы:

$$\begin{cases} M_I \ddot{\bar{R}}_I = -\dfrac{\partial E}{\partial \bar{R}_I} \\ \hat{H}_{BO}(\bar{R},\bar{r}) \cdot \Psi(\bar{r}) = E(\bar{R}) \Psi(\bar{r}) \end{cases}, \qquad (3а),\ (3б)$$

где $\hat{H}_{BO}$ – электронный гамильтониан Борна – Оппенгеймера:

$$\hat{H}_{BO} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial \bar{r}_i^2} - \sum_{I=1}^{N} \sum_{i=1}^{n} \frac{Z_I e^2}{\left|\bar{R}_I - \bar{r}_i\right|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{e^2}{\left|\bar{r}_i - \bar{r}_j\right|}. \qquad (4)$$

Непосредственное решение системы (3) методом прямого компьютерного моделирования носит название «первопринципная молекулярная динамика» (ab-initio МД) [4]. Данный метод способен определять структуру жидкого или аморфного металла или релаксацию структуры вблизи дефектов в кристаллических материалах.

Основная проблема для реализации этой процедуры заключена в определении электронной структуры (3б) – решении уравнения Шредингера для системы электронов. Именно недостаточные быстродействие и точность этой части расчетов долгое время являлись препятствием для распространения «первопринципных» методов расчета.

Теория функционала плотности (ТФП). Даже в приближении Борна-Оппенгеймера многочастичная электронная задача по-прежнему остается неразрешимой. К счастью, существует возможность дальнейшего упрощения задачи, которая позволяет проводить расчеты полной энергии системы с достаточной точностью и эффективностью. Идея состоит в сведении многочастичной задачи о поведении плотного электронного газа в решетке к задаче о движении одного электрона в эффективном поле ионов $V_{ef}(r)$ [2], которое пытаются выбрать так, чтобы по возможности учесть эффекты взаимодействия электронов между собой. Эти эффекты – двоякого рода. Во-первых, это сильное электростатическое взаимодействие с другими валентными электронами, описываемое эффективным потенциалом Хартри V_x(r). Во-вторых, квантовомеханический принцип Паули заставляет электроны с параллельными спинами держаться порознь, и тем самым понижает кулоновское взаимодействие на величину, называемую обменной энергией. Эти статические эффекты описываются приближением Хартри-Фока. Кроме того, однако, существуют динамические корреляции даже между электронами с антипараллельными спинами, которые дают вклад в т.н. корреляционную энергию. Важным событием последних двух десятилетий стало открытие, что эти сложные обменные и корреляционные явления могут быть достаточно точно описаны путем добавления локального обменно-корреляционного потенциала $V_{xc}(r)$ [6] к потенциалу Хартри V_x(r). Получаемая при этом система самосогласованных уравнений Кона-Шэма, сводящая электронную задачу к одночастичной получила название теории функционала плотности (ТФП).

Система уравнений Кона-Шэма имеет вид:

$$\left[-\nabla^2 + V_{ef}(\vec{r})\right]\Psi_i(\vec{r}) = E_i\Psi_i(\vec{r}) \tag{5}$$

$$V_{ef}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + V_x(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \tag{6}$$

где:

$$V_x(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{n(\vec{r}')}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|};$$

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}\left[n(\vec{r})\right]}{\delta n(\vec{r})}; \tag{7}$$

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N}\left|\Psi_i(\vec{r})\right|^2$$

здесь $E_{xc}\left[n(\vec{r})\right]$ – обменно-корреляционная энергия электронного газа, рассматриваемая как функционал плотности электронов в данной точке.

Главной проблемой при построении V_{ef}(r) является определение вида обменно-корреляционного функционала $E_{xc}\left[n(\vec{r})\right]$. Для конкретных расчетов чаще всего пользуются приближением локальной плотности (ПЛП) [2]. В этом приближении энергия E_{xc} может быть записана следующим образом:

$$E_{xc}\left[n(\vec{r})\right] = \int \varepsilon_{xc}\left[n(\vec{r})\right]n(\vec{r})d\vec{r}\ ,$$

где $\varepsilon_{xc}[n(r)]$ – обменно-корреляционная энергия на одну частицу в однородном электронном газе, имеющем плотность n(r). Тем самым задача об обмене и корреляции в неоднородном электронном газе сводится к задаче расчета энергии E_{xc} для однородного электронного газа, которая решается уже гораздо легче. ПЛП является точным в пределе плавно меняющейся плотности электронов и особенно хорошо работает в случае металлов.

Квантовое компьютерное материаловедение. В результате указанных достижений к настоящему времени стали доступны для моделирования системы, состоящие из нескольких сотен атомов, что достаточно для исследования ограниченного, но весьма важного круга задач физического материаловедения как кристаллических, так и неупорядоченных систем, к числу которых относятся кристаллические и жидкие металлы и сплавы, аморфные полупроводники и металлические наночастицы. Кроме того ab-initio моделирование выполняет еще одну важную функцию – обеспечивает инженерные программы реалистическими входными параметрами, а также уточняет используемые в них модели. По этой причине уже возникло несколько мировых центров квантового материаловедения, обслуживающих интересы мировых металлургических, автомобильных и авиационных концернов. Среди них можно отметить кафедру материаловедения и металлургии Кембриджа (Великобритания), возглавляемую проф. Г. Бхадешия, Институт перспективных исследований им. Макса Планка (Дюссельдорф, Германия) и особенно его отдел компьютерного дизайна материалов, возглавляемый проф. Йоргом Негебауером, лаборатория вычислительной металлургии (Graduate Institute of Ferrous Technology,Pohang, Южная Корея), работающая на металлургический концерн POSCO, Центр компьютерного материаловедения Национальной лаборатории ВМФ США (проф. M. Mehl), Аналогичные работы по компьютерному моделированию функциональных материалов в течении 20 лет проводятся на кафедре общей и теоретической физики ЮУрГУ [5–8,11–14]. В качестве одного из примеров прикладных материаловедческих задач, выполненных в нашей группе, укажем на расчеты энергии смешения $E_{см}$ в сплавах Fe-Cr, где было обнаружено существование при низких содержаниях хрома области отрицательных энергий смешения [5]. Этот интересный результат, получивший эспериментальное подтверждение [6], стимулировал изучение энергии смешения в ОЦК и ГЦК-сплавах систем Fe-Mn и Fe-Ni [7].

Другим примером может служить моделирование структуры и свойств расплавов цезия и рубидия, очень реакционных, а потому сложных для экспериментального исследования материалов. Моделирование атомной и электронной структуры расплавов проводилось в широком интервале температур – от точки плавления до околокритической области перехода металл-неметалл. Были рассчитаны температурные зависимости плотности электронных состояний, электропроводности, фононных спектров и пара-

метров структуры [8]. В результате исследований было показано, что переход металл-неметалл в расплавах Cs и Rb происходит по механизму распада однородной структуры расплава на группы тесно связанных кластеров, состоящих из небольшого числа (2–3) атомов.

Многомасштабное компьютерное моделирование материалов. Следует отметить, однако, что платой за высокую точность прогнозирования свойств материалов при ab initio расчетах является ограниченность размера (до нескольких сотен атомов) и временной шкалы (до 10^{-12}с) модели. Даже быстрый прогресс ресурсов суперкомпьютерных кластеров не сможет снять данное ограничение. По этой причине возникает необходимость в одновременном моделировании материала на нескольких уровнях пространственно-временной шкалы (многомасштабное моделирование). Идея очевидна – мы можем, начиная с атомного уровня, рассчитывать входные данные для модели следующего уровня, тем самым резко повысив достоверность всего прогноза (рис. 1).

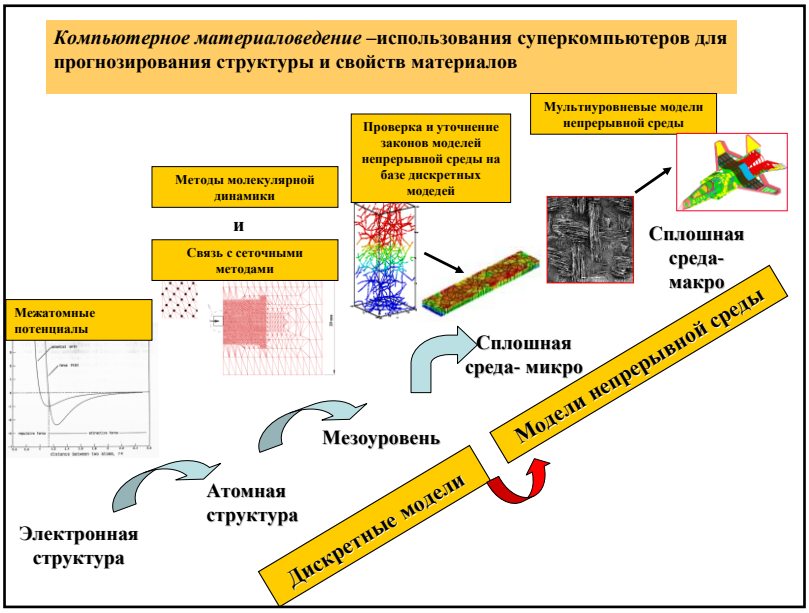


Рис. 1. Иллюстрация схемы многомасштабного моделирования в материаловедении

Начало использования многомасштабного подхода для предсказательного атомистического моделирования материалов и, в особенности, функциональных материалов датируется концом 90-х годов (см., например, [9]), и эти исследования дали толчок многочисленным публикациям на эту тему в последние годы (см. недавний обзор [10]). Современные эффективные и точные методы расчета «из первых принципов» энергетичес-ких параметров взаимодействий, а также достаточная мощность современных компьютеров со средствами параллельной обработки, позволяет проводить расчеты электронной структуры и термодинамических свойств достаточно сложных систем. Комбинируя первопринципные методы расчета с моде-

лированием атомных структур на основе статистической физики (метод Монте-Карло или фазовых полей) или молекулярной динамики, можно получить описание сплавов при конечных температура фактически на том же уровне точности и надежности, как и в первопринципных подходах.

В настоящее время в нашей группе ведутся работы по многомасштабному моделированию растворения водорода в сплавах на основе железа с целью решения проблемы водородного охрупчивания железа и сталей [11–17]. Суть проблемы в том, что благодаря малому размеру атомов водорода, они проникают вглубь металла на стадиях выплавки и термообработки из паров воды атмосферы. При охлаждении изделий растворимость водорода в железе стремительно падает, и он выделяется в виде микропузырьков, создавая микропоры и микротрещины, резко снижающие прочность изделий. Данную проблему можно решить очень простым и удобным способом, если суметь создать в объеме металла ловушечные центры, которые бы удерживали водород в атомарном виде, не позволяя ему выделяться в виде пузырьков газа. В качестве таких ловушек могут быть использованы точечные (вакансии, примеси), так и протяженные (дислокации, межзеренные и межфазные границы) дефекты кристаллической структуры.

Заключение. Последние десятилетия стали временем значительного прогресса, как в теории, так и в развитии соответствующих вычислительных алгоритмов в компьютерной физике конденсированных сред и квантовой химии. Эти достижения, совпав по времени с революционным прогрессом компьютерных технологий, позволили впервые ставить и решать реальные материаловедческие задачи. Отметим, что роль компьютерного моделирования в физике неупорядоченных систем двояка: во-первых, позволяет исследовать сложные проблемы, где получение простых аналитических оценок невозможно, а во-вторых, является важной составной частью современного эксперимента. В результате возникла новая научная дисциплина – компьютерное материаловедение, которая пока еще является разделом физики, но имеет все шансы быстро превратиться в одну из перспективных инженерных наук. Можно сказать, что развивающиеся технологии компьютерного моделирования на атомарном уровне (вычислительная квантовая механика, молекулярная динамика и механика, моделирование свойств на атомном и суб-атомном уровне) стали мостом, связывающим фундаментальную физику и инженерное материаловедение.

Библиографический список

1. Физика твердого тела / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – М.: Мир, 1979. Т. 1. – 309 с.

2. Вычислительные методы микроскопической теории металлических расплавов и нанокластеров / Б.Р. Гельчинский, А.А. Мирзоев, А.Г. Воронцов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2011. – 200 с.

3. Alfè, D. Structure and dynamics of liquid Iron under Earth's core conditions / D. Alfè, G. Kresse, M.J. Gillan // Physical Review B. – 2000. – V. 61. – P. 132–142.

4. Car, R. Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory / R. Car, M. Parrinello // Physical Review Letters. – 1985. – Vol. 55. – № 22. – Pp. 2471–2475.

5. Мирзоев, А.А. Расчет энергии смешения сплавов Fe-Cr первопринципными методами компьютерного моделирования / А.А. Мирзоев, М.М. Ялалов, Д.А. Мирзаев // Физика металлов и металловедение. – 2004. – Т. 97. – № 4. – С. 11–16.

6. Filippova, N.P. Mossbauer Study of Irradiation-Accelerated Short-Range Ordering in Binary Fe-Cr Alloys / N.P. Fillipova, V.A. Shabashov, A.L. Nikolaev // The Physics of Metals and Metallography. – 2000. – V. 90. – Pp. 145–152.

7. Мирзоев, А.А. Первопринципные расчеты энергии смешения и магнитных моментов компонентов сплавов Fe-Mn, Fe-Cr и Fe-Ni с ОЦК и ГЦК решетками / А.А. Мирзоев, М.М. Ялалов, Д.А. Мирзаев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 10(227). – С. 84–94.

8. Mirzoev, A.A. Analysis of the electronic structure of liquid rubidium by the methods of ab initio molecular dynamics, linear muffin-tin orbitals and recursion / A.A. Mirzoev, A.N. Sobolev, et al // Journal of physics-condensed matter. – 2008 Vol. – 20. – № 11. – P. 114104.

9. Rudd, R.E. Concurrent coupling of length scales in solid state systems / R.E. Rudd, J.Q. Broughton // Physical Status Solidi (b). – 2000. – Vol. 217. – P. 251–291.

10. Elliott, J.A. Novel approaches to multiscale modelling in materials science / J.A. Elliott // International Materials Reviews. – 2011. – Vol. 56. – №. 4. – Pp. 207–225.

11. Мирзаев, Д.А. О равновесной концентрации вакансий в сплавах железа с водородом / Д.А. Мирзаев, А.А. Мирзоев, К.Ю. Окишев, А.Д. Шабуров, Г.Е. Рузанова, А.В. Урсаева // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2012. – № 11 (270). – С. 97–104.

12. Урсаева, А.В. Ab initio-моделирование комплексов водород-вакансия (VHn) в ОЦК-железе / А.В. Урсаева, А.А. Мирзоев, Г.Е. Рузанова // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Металлургия». – 2011. – № 36 (253). – С. 51–55.

13. Урсаева, А.В. Ав initio моделирование взаимодействия водорода с точечными дефектами в ОЦК-железе / А.В. Урсаева, М.С. Ракитин, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 10 (227). – С. 114–119.

14. Урсаева, А.В. Ав initio моделирование взаимодействия водорода с точечными дефектами в ОЦК-железе / А.В. Урсаева, М.С. Ракитин, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 10 (227). – С. 114–119.

15. Урсаева, А.В. Влияние водорода на энергию образования вакансии в ОЦК-железе / А.В. Урсаева, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Металлургия». – 2010. – № 34 (210). – С. 39–42.

16. Урсаева, А.В. Выбор оптимальных параметров для построения максимально точной модели ОЦК-железа / А.В. Урсаева, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2010. – № 9 (185). - С. 97–101.

17. Мирзаев, Д.А. К теории влияния малых добавок палладия на растворимость водорода в железе и флокенообразование в сталях / Д.А. Мирзаев, И.В. Кашуков, А.А. Мирзоев, К.Ю. Шабуров // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2009. – № 10. – С. 66–73.

К содержанию

УДК 669.017.3 + 669.112.227.34

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ УГЛЕРОДА В МАРТЕНСИТЕ СИСТЕМЫ ЖЕЛЕЗО-УГЛЕРОД

А.А. Мирзоев, П.В. Чирков

Исследовалось образование тетрагональности мартенсита в сплавах Fe-C. Получены параметры термодинамической теории упорядочения методом минимизации энергии и методом молекулярной динамики с использованием межатомных потенциалов взаимодействия.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, EAM потенциал, тетрагональность мартенсита, порядок-беспорядок.

При резком охлаждении ГЦК фазы системы Fe-C, наблюдается специфическое низкотемпературное превращение, получившее название мартенситного превращения. Это превращение лежит в основе закалки стали, так как именно с образованием мартенсита связано резкое повышение твердости и прочности, которое часто составляет практическую цель закалки. Исследование кристаллической решетки мартенсита, впервые проведенное Г.В. Курдюмовым и др. [1], показало, что мартенситу присуща тетраго-

нальная решетка, которую следует рассматривать как несколько растянутую вдоль одного направления решетку α-железа (ОЦК). Параметры решетки мартенсита *a* и *c* при комнатной температуре оказались линейно зависящими от концентрации углерода.

К. Зинер обратил внимание [2], что в ОЦК решетке железа атомы образуют неправильный октаэдр, в котором одна пространственная диагональ короче двух других. Когда атом углерода попадает в октапору *α*-железа, он сильнее раздвигает ближайшие атомы. Тогда растяжение решетки происходит только вдоль одного направления. В ОЦК решетке имеются октапоры, у которых направление малой диагонали ориентировано вдоль осей X, Y и Z. Соответственно следует различать поры типа X, Y и Z. Когда атом углерода находится в поре Z, то он растягивает решетку в направлении оси Z. Если атом углерода находится в поре X, он будет растягивать решетку в направлении оси X и т.д.

Таким образом, тетрагональность мартенсита обусловлена тем, что атомы углерода в ходе перестройки структур при мартенситном превращении преимущественно попадают в поры одного типа. Если атомы углерода равномерно распределены между порами трех типов, то решетка остается кубической, а состояние называется неупорядоченным. В том же случае, когда атомы заполняют только поры одного типа, например Z, возникает одноосное растяжение и появляется тетрагональность, такое состояние называется упорядоченным.

Сначала К. Зинером [2], а затем А.Г. Хачатуряном [3] была развита статистическая теория упорядочения атомов углерода в порах одного типа. Идея её заключается в том, что избыток атомов C в октапорах одного, например, Z-типа по сравнению с хаотическим распределением создает анизотропную деформацию кубической решетки или «эффективное» напряжение, которое заставляет упругие диполи ориентироваться вдоль оси Z. Согласно данной теории свободная энергия системы при заданных температуре и концентрации углерода имеет вид:

$$F(c,\eta) = F(c,0) - \frac{1}{3}Nc^2\lambda_0\eta^2 + \frac{kT}{3}\left[2(1-\eta)\ln(1-\eta) + (1+2\eta)\ln(1+2\eta)\right], \quad (1)$$

где η - параметр порядка, отражающий избыток атомов углерода в октаэдрических порах Z по сравнению с порами X или Y, N – число атомов в решетке железа, λ_0 -параметр деформационного взаимодействия, c – концентрация углерода в атомных долях, T – температура, k – постоянная Больцмана.

При использовании условия минимума $F(c,\eta)$ как функции параметра порядка η, удается найти зависимость параметра порядка от температуры и концентрации углерода c:

$$\tau = \frac{kT}{\lambda_0 \cdot c} = \frac{\eta}{\ln\left[(1+2\eta)/(1-\eta)\right]}, \quad (2)$$

где τ - обобщенный параметр, характеризующий внешние условия процесса упорядочения. На рис.1 показан вид зависимости параметра порядка от параметра τ, где в области 1–2 абсолютно стабильна тетрагональная фаза, 2–3 изображает метастабильность упорядоченной фазы, в области 3–4 упорядоченная фаза абсолютно нестабильна, а в 4–5 стабильна неупорядоченная фаза с кубической решеткой. Из графика следует, что температура T_c перехода порядок-беспорядок равна:

$$T_c = 0{,}36\frac{c\lambda_0}{k}, \qquad (3)$$

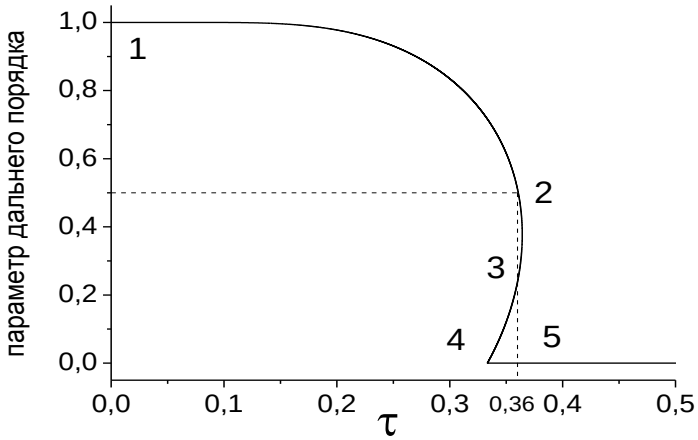


Рис. 1. Зависимость параметра порядка η от параметра τ в соответствии с (2)

Из выражения (2) следует, что график, аналогичный рис. 1, получится и для зависимости η от $(1/c)$. Следовательно, если при фиксированной температуре T_0 моделировать перераспределение атомов С в мартенсите, постепенно увеличивая содержание углерода, то при концентрации:

$$c_c = \frac{kT_0}{0{,}36\lambda_0} \qquad (4)$$

произойдет тетрагональный переход.

Стоит отметить, что основным параметром данной теории является величина λ_0. Однако в различных работах [3, 4] оценки данного параметра имеют сильное расхождение, от –2,73 до –10,77 эВ/атом, обусловленное выбором метода и параметров расчета.

В последнее время для исследования свойств железа и его сплавов широкое применение нашли различные методы компьютерного моделирования [5–8]. В работе [9] с использованием потенциалов погруженного атома (EAM) было исследовано взаимодействие двух атомов углерода в ОЦК решетке железа, а также найдены химический и упругий вклады.

Для определения параметра взаимодействия λ_0 мы предлагаем использовать атомистическое моделирование методом молекулярной динамики, реализованным в программном пакете LAMMPS [10]. При этом были выбраны EAM потенциалы Т. Лау и др. [11], Ш. Бекар [12] и потенциал аналитический потенциал кратной связи (ABOP) [13].

Параметр λ_0 определялся вытекающим из (1) соотношением:

$$\lambda_0 = 3\frac{E_z - E_{xyz}}{Nc^2},$$

где E_{xyz} – внутренняя энергия кристалла кубического мартенсита, где атомы С равномерно распределены между октапорами различного направления, а E_z -энергию упорядоченного состояния, когда весь углерод занимает поры типа Z.

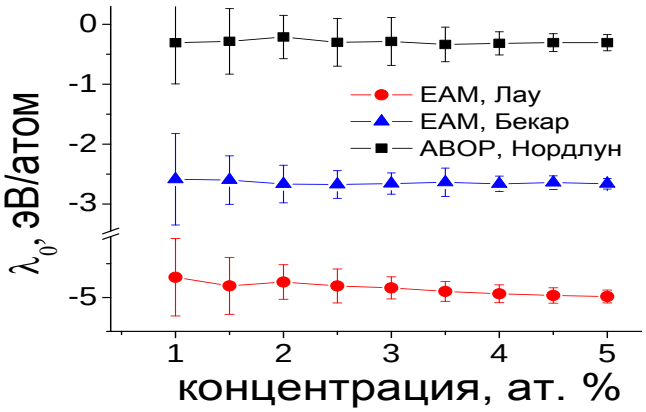


Рис. 2. Концентрационная зависимость параметра взаимодействия $\lambda_2(0)$ атомов С в мартенсите

Расчет энергий E_{xyz} и E_z производился методом минимизации энергии, ОЦК решетка железа представляла собой 30x30x30 трансляций элементарной ячейки, углерод случайно распределялся по октапорам, при этом минимально возможное расстояние между ближайшими атомами углерода было выбрано равным параметру решетки, т.к. согласно данным *ab initio* расчетов [Бекар] атомы углерода в ОЦК решетке железа на малых расстояниях испытывают отталкивание. Энергии E_{xyz} и E_z усреднялись по 100 случайным конфигурациям, значения параметра λ_0 при различных концентрациях углерода представлены на рис. 2. λ_0 слабо зависят от концентрации, что согласуется с теорией Зинера-Хачатуряна, где данный параметр является постоянной величиной. Полученное значение λ_0= –5,55 эВ/атом для потенциала Лау, лучше всего согласуется с работой [4], где было получено значение –5,65 эВ/атом.

При расчете величины E_z были получены концентрационные зависимости параметров решетки (рис. 3). Для потенциала Бекар наблюдается слабая зависимость от содержания углерода, а результаты, полученные с потенциалом Лау, лучше всего согласуются с экспериментальными данными [1].

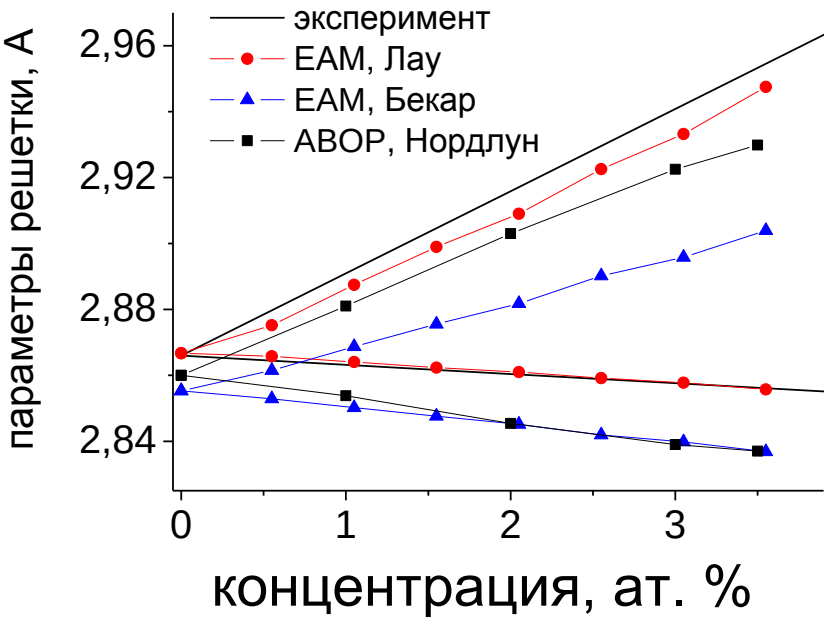


Рис. 3. Концентрационная зависимость параметров решетки при *T=750* К

Таким образом, классические межатомные потенциалы позволяют адекватно описать образование мартенсита в системе железо-углерод, что подтверждается как согласием результатов расчета с экспериментальными, так и с теоретическими работами. В связи с этим, в дальнейшем считаем целесообразным использование потенциала Лау для исследования кинетики перехода порядок-беспорядок.

Библиографический список

1. Курдюмов, Г.В. Превращения в железе и стали / Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. - М.: Наука, 1977. - 236 с.

2. Zener, C. Theory of Strain Interaction of Solute Atoms / C. Zener // Phys. Rev. - 1948. - V. 74. – Iss. 6. - Pp. 639–647.

3. Хачатурян, А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов / А.Г. Хачатурян. – М.: Наука, 1974. – 384 с.

4. Udyansky, A. Orientational Ordering of Interstitial Atoms and Martensite Formation in Dilute Fe-based Solid Solutions / A. Udyansky, J. Pezold, A. Dick, J. Neugebauer // Phys. Rev. B. – 2011. – V. 83. – Iss. 18. – 184112.

5. Ридный, Я.М. *Ab Initio* моделирование влияния ближнего окружения примесей углерода на энргию их растворения в ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5. - № 2. – С. 108–116.

6. Верховых, А.В. *Ab Initio* моделирование энергии формирования границы Ззерна в ОЦК-железе / А.В. Верховых, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5. - № 1. – С. 76–81.

7. Старухин, В.А. Влияние гибридизации эффективного парного потенциала на расчетные характеристики жидкого железа / В.А. Старухин, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2012. – № 34. – С. 120–129.

8. Урсаева, А.В. *Ab Initio* моделирование еомплексов водород-вакансия (VH_N) в ОЦК-железе / А.В. Урсаева, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 36 (253). – С. 51–55.

9. Чирков, П.В. Межчастичный потенциал в мистеме железо-углерод и проблема мартенситного перехода / П.В. Чирков, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5. – Вып. 1. – С. 114–118.

10. Plimton, S. Fast Parallel Algorithm for Short Range Molecular Dynamics / S. Plimton // Journal of Computational Physics. – 1995. – V. 117. – Iss. 1. – P. 1–19.

11. Lau, T. Many-Body Potential for Point Defect Clusters in Fe-C Alloys / T. Lau, C.J. F. Ёorst // Phys. Rev. Lett. – 2007. – V. 98. – Iss. 21. – 215501.

12. Becquart C. Atomistic modeling of an Fe system with a small concentration of C / C. Becquart, J. Raulot, G. Bencteux, C. Domain, M. Perez, S. Garruchet, H. Nguyen // Comp. Mat. Sc. – 2007. – V. 40. – Iss. 1. - P. 119–129.

13. Henriksson, K.O.E. Simulations of Cementite: an Analytical Potential for the Fe-C System / K.O.E. Henriksson, K. Nordlun // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 79. – Iss. 14. – 144107.

К содержанию

УДК 543.51: 546.72

ОЦЕНКА СТЕПЕНИ ЗАПОЛНЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ СПЛАВА $FE_{82,6}C_{17,3}S_{0,1}$ МЕТОДОМ ТПД

А.В. Гусев

Произведена оценка степени заполнения поверхности сплава $Fe_{82,6}C_{17,3}S_{0,1}$ его компонентами методом температурно-программируемой десорбции.

Ключевые слова: температурно-программируемая десорбция, поверхность, сплавы на основе железа, углерод, сера.

Многие свойства материалов определяются химическим составом и взаимным расположением атомов в поверхностном слое. Образование поверхностного слоя часто сопровождается изменением по сравнению с объемными значениями концентрации компонентов сплава или примесных элементов. Причем эти изменения могут быть настолько значительными, что оказыва-

ются определяющими для физико-химических свойств поверхности. Это является одной из причин, по которым проблема изучения поверхностной сегрегации в трехкомпонентных сплавах актуальна и в настоящее время [1].

Сплавы на основе железа имеют большое практическое значение. При этом с учетом широкого использования рассматриваемых сплавов в металлургическом производстве, особую ценность приобретают высокотемпературные исследования указанных материалов. Кроме того, на фоне большого количества работ, рассматривающих объемные структуру, состав и свойства железа и сплавов на его основе [2, 3], наблюдается отсутствие подобной информации об их поверхностном слое.

Экспериментальный метод температурно-программируемой десорбции (ТПД) является одним из основных инструментов для высокотемпературного исследования поверхности сплавов [4, 5], так как его основу составляет процесс термической десорбции в вакуум компонентов сплава с поверхности нагретого металла.

С помощью масс-спектрометра в условиях высокого вакуума ($\approx 10^{-5}$Па) регистрировались потоки десорбции различных компонентов с поверхности металла. Причем эта регистрация велась как при его нагреве с постоянной скоростью (≈7К/с), так и при последующем охлаждении (рис. 1). Для получения информации о поверхностных фазах сплава в ТПД эксперименте фиксировали спектры десорбции частиц, состоящих из компонентов одной поверхностной фазы, а также молекул, образованных из компонентов контактирующих поверхностных фаз. Так в сплавах Fe-C-S измеряли потоки десорбции частиц для следующих линий спектра масс: 12 а.е.м. (C); 28 ($CO+N_2$); 32 ($S+O_2$); 56 (Fe), 64 (S_2+SO_2); и 76 (CS_2). В дальнейшем полученные зависимости перестраивались в координатах удобных для последующего анализа (рис. 2).

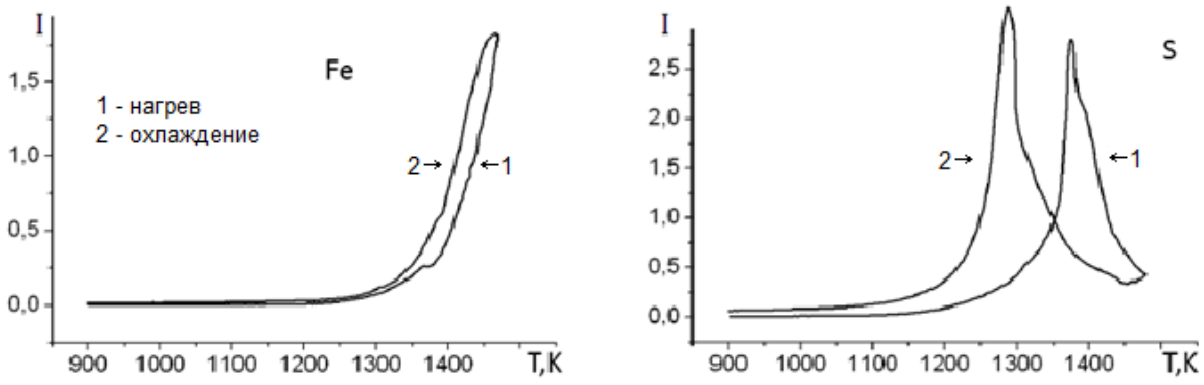


Рис. 1. Примеры ТПД-спектров компонентов сплава Fe-C-S, полученные при нагреве и последующем охлаждении металла

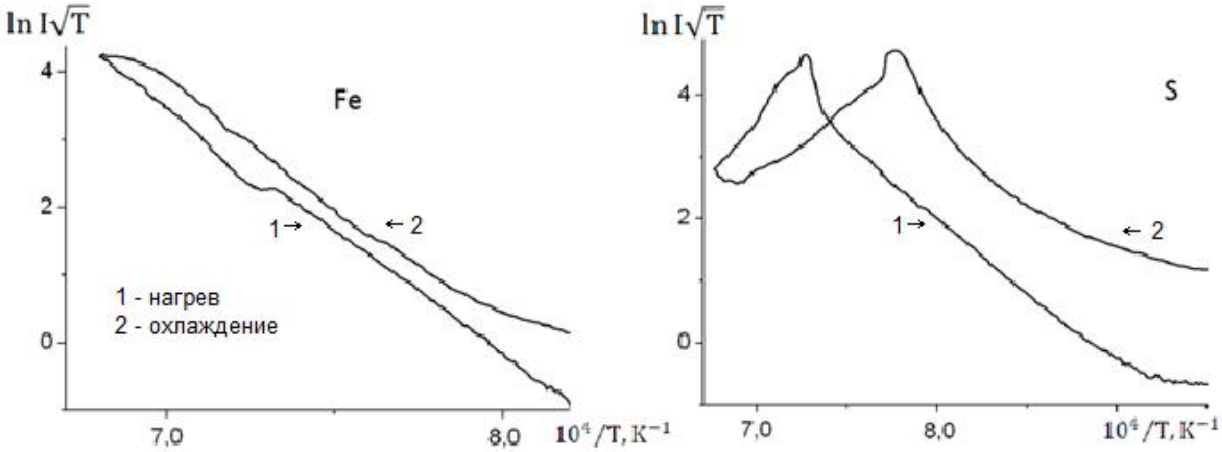


Рис. 2. Примеры ТПД-спектров компонентов сплава Fe-C-S, полученные при нагреве и последующем охлаждении металла в координатах, удобных для дальнейшего анализа.

В ходе обработки полученных данных выяснилось, что примеси N, O и S десорбируются в виде атомов и молекул, а частицы C^+, преимущественно, являются осколочными при ионизации углеродсодержащих молекул электронами. Обнаруженная частичная корреляция между температурной зависимостью потока осколочных атомов углерода и углеродсодержащих молекул не позволяет использовать ТПД спектры атомов углерода для анализа поверхностной фазы графита в рассматриваемых сплавах. В тоже время в приликвидусной области температур одинаковый характер этой зависимости для атомов C и молекул сероуглерода дает возможность оценки заполнения поверхности углеродом с использованием ТПД спектра молекул CS_2, и кинетического уравнения ассоциативной термодесорбции:

$$I = \alpha\sigma\sqrt{\frac{m}{T_0}}AN_1^{X_1}N_2^{X_2}C\exp\left[-\frac{E}{kT}\right],$$

Так согласно этому уравнению, интенсивность измеряемого сигнала I пропорциональна поверхностной концентрации N^X компонента сплава. Другие параметры данного уравнения сокращаются, если для данного компонента записать отношения величин I при одинаковой температуре, т.е. провести экстраполяцию измеряемых сигналов к одной температуре:

$$a_i^{(2,1)} = \frac{I_i^{(2)}}{I_i^{(1)}} = \left[\frac{N_i^{(2)}}{N_i^{(1)}}\right]^{X_i},$$

$$a_i^{(3,1)} = \frac{I_i^{(3)}}{I_i^{(1)}} = \left[\frac{N_i^{(3)}}{N_i^{(1)}}\right]^{X_i},$$

где $I_i^{(j)}$ – измеряемый сигнал *i*-го компонента для *j*-го состояния поверхности; X_i – порядок десорбции *i*-го компонента.

Получается, что согласно этому кинетическому уравнению, поток десорбции молекул сероуглерода пропорционален поверхностной концентрации атомов углерода и серы:

$$I_{CS_2} \sim N_C^{x_C} N_S^2.$$

Используя уравнение, в которых x_C=1/2 и x_S=1 получаем формулу:

$$a_{CS_2}^{(1,j)} = a_C^{(1,j)} (a_S^{(1,j)})^2,$$

которая позволяет найти коэффициенты $a_C^{(1,j)}$ для углерода с помощью параметров ТПД спектров частиц CS_2 и S.

$$a_C^{(1,j)} = \frac{a_{CS_2}^{(1,j)}}{(a_S^{(1,j)})^2},$$

В дальнейшем эти коэффициенты и используются для расчета степеней заполнения поверхности фазой графита.

Кроме того, анализ ТПД спектров частиц Fe, S и CS_2 позволил выявить три состояния поверхности с постоянной поверхностной концентрацией компонентов сплава в областях температур 1070–1170К, 1250–1370К и 1470–1550К. Первые два состояния относятся к твердому состоянию, а третье соответствует жидкому состоянию сплавов. Для 2-х последовательных состояний поверхности j и k определены отношения потоков десорбции частиц каждого вида при температурах 1250 К и 1450 К. Эти отношения представлены в следующей таблице.

Таблица 1

Отношения потоков десорбции, а							
Fe		C		S		CS_2	
(1,2)	(2,3)	(1,2)	(2,3)	(1,2)	(2,3)	(1,2)	(2,3)
0,8	0,9	3,3	0,5	0,7	7,6	1,6	28,8

Параметры $a_i^{(1,2)}$ соответствуют переходу в интервале температур 1170...1250 К, связанному с интенсивной десорбцией газа адатомов S. Скорее всего, параметры $a_i^{(2,3)}$ обусловлены плавлением поверхностной сульфидной фазы и изменением соотношения островковой фазы графита и серосодержащих поверхностных фаз. Эти параметры использовали для расчета степени заполнения поверхности сплава поверхностными фазами. Полученные результаты приведены в таблице 2.

Таблица 2

Степень заполнения поверхности, %			
	1070–1170 К	1250–1370 К	1470–1550 К
FeS (сульфид железа)	43	56	57
S (адсорбированные атомы серы)	12	14	2
C (углерод)	45	30	41

Результаты расчета показывают, что для первого поверхностного состояния исследованного сплава в интервале от 1050...1170 К характерна высокая степень заполнения углеродом в виде графитовых островков. Очевидно, что адсорбированные атомы серы в гораздо меньшем количестве внедряются в объем фазы графита. Доля, занимаемая поверхностной фазой графита, достигает значения 45 %, при этом адсорбированные атомы серы скрываются под островками графита.

При переходе ко второму поверхностному состоянию обнаружено уменьшение степени заполнения поверхности углеродом. Причем в рассматриваемом сплаве это уменьшение весьма значительно (в 1,6 раза). Возможно, что главной причиной уменьшения количества графитовых островков на поверхности данного сплава является увеличение растворимости углерода в объеме металла при его нагреве в интервале температур от 1000 до 1400 К. В результате происходит растворение углерода из островковой поверхностной фазы в объем металла. При этом освободившаяся поверхность заполняется островками сульфида железа и атомами серы. Степени заполнения поверхности сплава этими элементами, пусть и незначительно, возрастают. В результате чего и наблюдается рост потоков десорбции атомов и железа (в 1,2 раза), и серы (в 1,4 раза) отмеченный на ТПД-спектрах.

При переходе из второго в третье поверхностное состояние, вследствие стимулированной десорбции серосодержащих молекул приповерхностный слой сплава сильно обеднен серой, что приводит к снижению потока диффузии серы к поверхности. Поэтому поверхностная концентрация атомов серы непрерывно снижается вследствие их десорбции, что в соответствии с кинетическим уравнением ассоциативной термодесорбции, приводит к снижению потока десорбции атомов S. Другой причиной снижения концентрации адсорбированных атомов S может быть уменьшение доли диссоциирующих молекул сульфида FeS, которые пополняют поверхность адатомами S. Снижение степени диссоциации сульфида может быть обусловлено и его плавлением в этой области температур ($T_{пл}$ = 1468 К). В результате большая часть серы располагается в островках сульфида, которые в этом состоянии занимают примерно половину поверхности, а доля адатомов серы снижается до 2 ат. %.

Очевидно, что в рассматриваемом сплаве поверхностная фаза графита образуется в результате снижения растворимости углерода при охлаждении сплава и соответствующие островки графита имеют форму башен, растущих послойно снизу. Эти островки являются дисперсными и содержат малое количество адсорбированных атомов серы, которыми пополняется поверхность сплава при диссоциации сульфида.

Библиографический список

1. Зенгуил, Э. Физика поверхности / Э. Зенгуил. – М.: Изд-во Мир, 1990. – 536 с.

2. Воронцов, А.Г. Температурные изменения структуры жидкого железа / А.Г. Воронцов, Д.К. Белащенко // Вестник ЮУрГУ, сер. «Математика. Физика. Химия». – 2005. – Вып. 5. – № 2. – С. 96–99.

3. Чирков, П.В. Межчастичный потенциал в системе железо-углерод и проблема мартенситного перехода / П.В. Чирков, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5. – № 1. – С. 114–118.

4. Вяткин, Г.П. Поверхностная сегрегация и десорбция при фазовых переходах в металлах / Г.П. Вяткин, Т.П. Привалова. – Челябинск: Изд-во ЧГТУ, 1996. – 273 с.

5. Алексеева, Т.О. Поверхностные фазы в поликристаллическом и жидком состояниях сплавов Cu-Ag-Sn / Т.О. Алексеева, А.В. Гусев, С.И. Морозов, Т.П. Привалова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 4. – № 8. – С. 30–33.

К содержанию

УДК 539.23 + 546.26

ПРОЯВЛЕНИЕ КВАНТОВОГО РАЗМЕРНОГО ЭФФЕКТА В ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИИ ТОНКИХ ПЛЕНОК УГЛЕРОДА

В.М. Березин

Методом сканирующего электроннолучевого распыления получена серия тонкопленочных образцов углерода различной толщины. Измерена температурная зависимость удельного поверхностного сопротивления. Получен эффект перехода от полуметаллического характера проводимости к полупроводниковому с уменьшением толщины пленок. Эффект объясняется на основе теории квантового размерного эффекта электросопротивления.

Теория квантовых размерных эффектов (КРЭ) в тонких пленках развита достаточно давно [1, 2, 3]. Известны и некоторые экспериментальные результаты, указывающие на проявления КРЭ [4, 5]. Однако по углеродным пленкам известных данных нет. Упомянутые работы были выполнены в период становления и развития микроэлектроники и интегральной технологии. Минимальный размер элементов микросхем и других устройств в то время составлял 1–10 мкм, что значительно превышает длину волны де Бройля λ_D электронов проводимости. Поэтому КРЭ представляли лишь теоретический интерес.

На современном этапе повышенного интереса к наноструктурам вопрос о возможности проявления КРЭ приобретает особую актуальность. Микроэлектроника уже десять лет как вступила в этап наноэлектроники (минимальный технологический размер стал меньше 100 нм). Тенденция миниатюризации в электронике продолжается. Вместе с тем в последние годы отмечаются отклонения от эмпирических законов Г. Мура, которые могут быть связаны, в том числе, и с размерными эффектами. Открытие углеродных наноструктур, графена вызвало огромный интерес к углеродной пленочной электронике.

Нас будет интересовать КРЭ электросопротивления, поэтому будем рассматривать поведение электронов проводимости с уменьшением толщины d пленочного проводника (полупроводника). Будем считать, что пленка в плоскости X0Y имеет неограниченные размеры – L1, L2 , а по оси Z ее толщина d $\leq \lambda_D$. В полупроводниках и полуметаллах λ_D на несколько порядков больше, чем в металлах, поэтому в дальнейшем будут предполагаться именно эти материалы. Решение уравнения Шрёдингера для прямоугольной бесконечной потенциальной ямы дает выражение одноэлектронной функции [2]:

$$\psi_{(x,y,z)} = \sqrt{\frac{2}{L_1 L_2 d}} \cdot \sin\left(\frac{\pi n z}{d}\right) \cdot e^{i(k_x x + k_y y)} \qquad (1)$$

где n = 1,2,3,…; k_x, k_y – волновые числа электронов проводимости вдоль осей X и Y.

При этом энергетический спектр электронов разбивается на отдельные перекрывающиеся подзоны:

$$E(n,k_x,k_y)=\frac{(\hbar\pi)^2}{2m^*d^2}n^2+\frac{\hbar^2(k_x^2+k_y^2)}{2m^*}, \qquad (2)$$

где m^* – эффективная масса носителя тока.

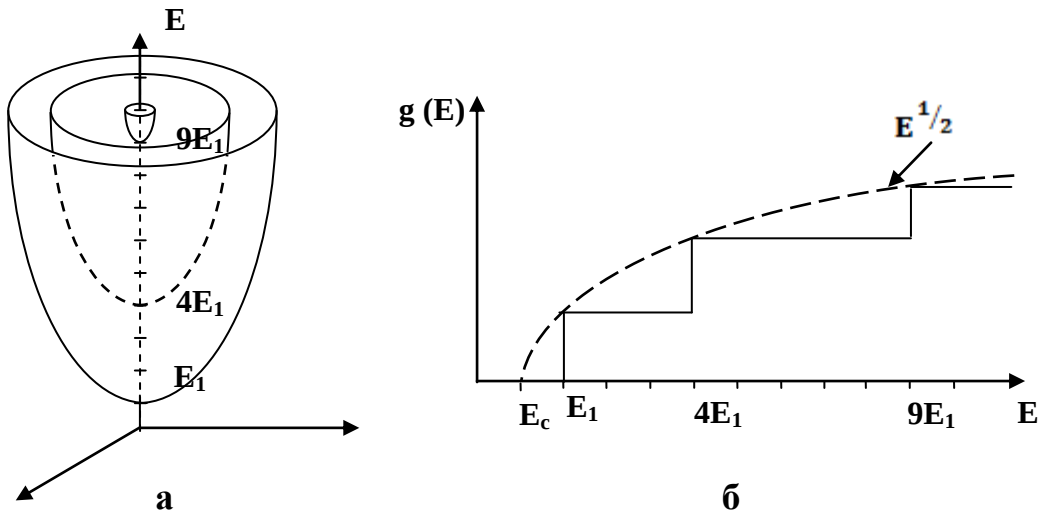


Рис. 1. Структура подзон (а). Плотность электронных состояний (б): сплошная линия – пленка, пунктирная – объемный образец

На рисунке 1а в соответствии с формулой (2) схематически изображены три нижние подзоны для рассматриваемой пленки. Плотность электронных состояний, в этом случае приобретает ступенчатый характер [5]. На рисунке 1б в приближении параболического закона дисперсии показана плотность состояния трех подзон. Энергия Ec – дно зоны проводимости, а энергия E1 относительно Ec определяется выражением [2,5]:

$$E_1=\frac{(\hbar\pi)^2}{2m^*d^2} \qquad (3)$$

Плотность состояния в выше лежащих подзонах, согласно теории, определяется выражением [5]:

$$g(E)=\frac{m^*}{\pi\hbar^2 d}\sqrt{\frac{E_n}{E_1}}, \qquad (4)$$

где $E_n=E_1n^2$.

Для сравнения на рисунке 1б пунктиром показана плотность состояний массивного трехмерного образца.

Квантование энергии и плотности состояний приводит к квантованию концентрации электронов проводимости, что и проявляется как КРЭ при измерении электросопротивления и других кинетических коэффициентов. В частности, на зависимости электросопротивления от толщины пленки могут наблюдаться осцилляции.

В полуметаллах КРЭ изменяет величину перекрытия зоны проводимости и валентной зоны в зависимости от толщины пленки d. Согласно теории [2] при некоторой толщине d0 перекрытие исчезает и образуется запрещенная зона E_g величина, которой также зависит от толщины пленки:

$$E_g(d) = E_0\left[\frac{d_0^2}{d^2} - 1\right], \quad (5)$$

где E0 – перекрытие зон в массивном полуметалле, а d0 определяется выражением $d_0 = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m^*E_0}}$.

Так как электропроводность полуметаллов осуществляется электронами проводимости (e) и дырками (h), для них следует использовать приведенную эффективную массу: $m^* = \frac{\sqrt{m_e^* m_h^*}}{\sqrt{m_e^* + m_h^*}}$. Из формулы (5) видно, что теория фактически предсказывает образование запрещенной зоны при d $<$ d0, что соответствует переходу от металлической проводимости к полупроводниковой. В данной работе сделана попытка экспериментальной проверки этого предсказания в пленках углерода на стекле.

На первый взгляд кажется, что экспериментальная проверка теории КРЭ не представляет трудностей. Однако в действительности это не так. Проблема состоит в получении серии однородных образцов, отличающихся только толщиной. Подробно условия эксперимента и требования к тонкопленочным образцам обсуждаются в [3, 5], где объясняются причины ограниченности экспериментальных подтверждений КРЭ. Наиболее жесткими представляются требования по однородности толщины пленочных образцов и высокой подвижности электронных носителей тока.

Идея эксперимента заключалась в экспериментальном обнаружении перехода полуметалл – полупроводник на серии графеноподобных образцов тонких пленок углерода. Образцы получали электронно-лучевым распылением пироуглерода по опубликованной ранее методике [6, 7]. Данные указанных работ по оптическим свойствам подтверждают графеноподобную структуру полученных углеродных пленок.

Графеноподобная структура образцов позволяет рассчитывать на увеличение подвижности электронов проводимости и обеспечение высокой однородности пленок по толщине. Поверхностное электросопротивление измерялось полуавтоматическим прибором ИУС-3 по стандартной четырех зондовой методики. Температура образцов контролировалась микропечью и термопарой. Схема измерительной установки представлена на рисунке 2

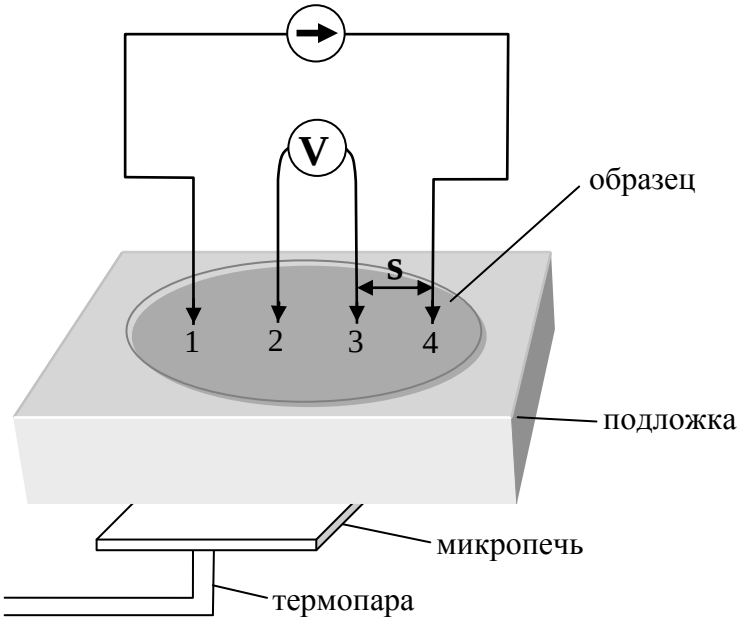


Рис. 2. Схема измерений температурной зависимости электросопротивления

Эквидистантные зонды (s=1 мм) использовались как источник стабилизированного тока (1, 4) и для измерения разности потенциалов (2, 3). Для всех исследуемых тонкопленочных образцов выполнялось условие s>>d, что позволяет применить полуцилиндрическую симметрию для внешнего электрического поля E(r) и вычислить разность потенциалов между зондами 2 и 3:

$$U_{23}=\int_{S}^{2S} E(r)\,dr$$

После подстановки в выражение для поля проводника с цилиндрической симметрией получается выражение:

$$U_{23}=\frac{\ln 2}{\pi d}\rho\, I_{14} \qquad (6)$$

где ρ – удельное электросопротивление пленки, I_{14} – ток задаваемый генератором тока измерительного прибора.

Применяя дифференциальный закон Ома: $\vec{E}=\rho\vec{j}$, из (6) легко получить выражение для поверхностного сопротивления исследуемых пленок:

$$R=\frac{\pi}{\ln 2}\cdot\frac{U_{23}}{I_{14}} \qquad (7)$$

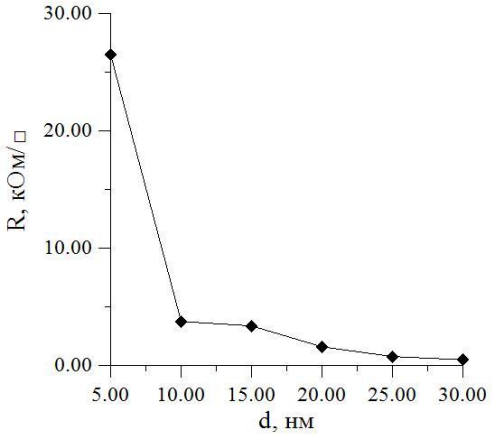


Рис. 3. Зависимость величины поверхностного сопротивления от толщины пленочных образцов

В измерителе поверхностного сопротивления ИУС-3 в полуавтоматическом режиме реализуется выражение (7).

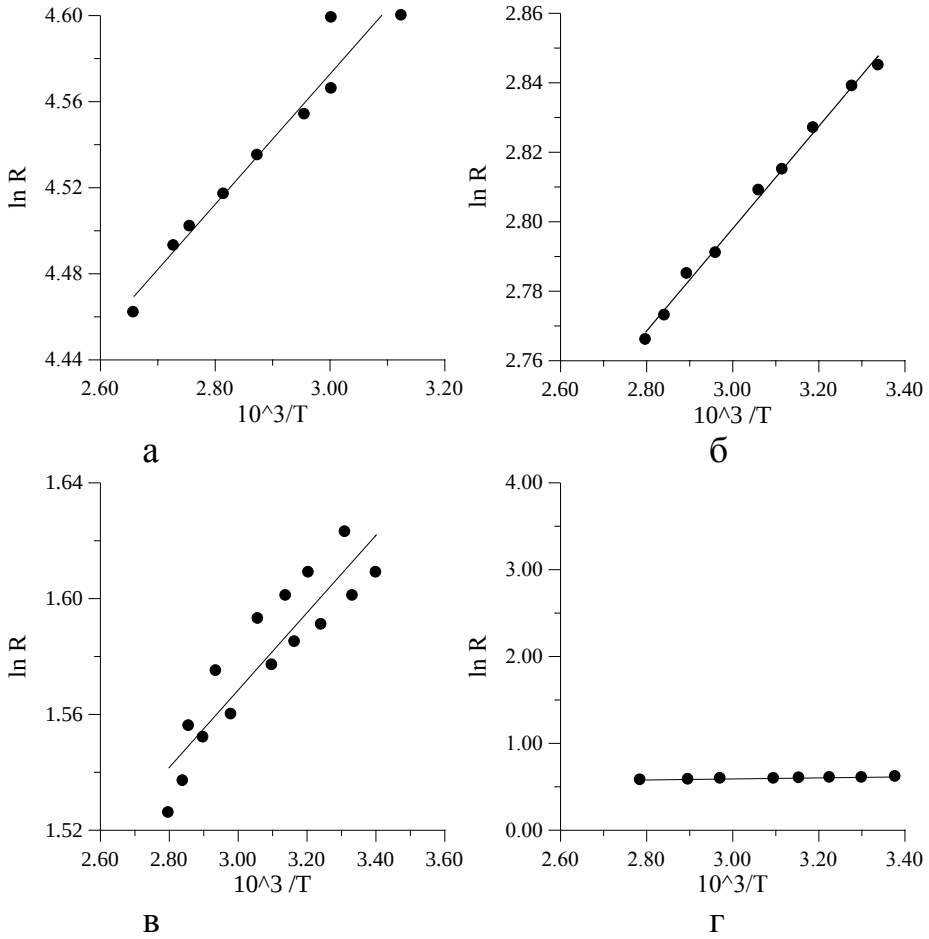


Рис. 4. Температурные зависимости поверхностного сопротивления образцов различной толщины: а – 1,65 нм, б – 3,3 нм, в – 4,95 нм, г – 7,26 нм. Линии проведены по методу наименьших квадратов

На рисунке 3 приведена типичная зависимость поверхностного сопротивления образцов от их толщины. Для выяснения причины резкого увеличения электросопротивления для пленок толщиной < 10 нм были сняты его температурные зависимости (рис.4). Оказалось, что для образцов с d < 10 нм эти зависимости имеют активационный характер, указывающий на наличие запрещенной зоны, в то время как для образцов с d > 10 нм – зависимости имеют полуметаллический характер, свойственный графиту. Причем вычисленные экспериментальные значения энергии активации проводимости закономерно возрастают с уменьшением толщины пленки (рис. 5). С целью сравнения с соответствующей формулой теории (5) на рисунке 5 приведена зависимость $E_g = \frac{c}{d^2}$, где с – константа. Видно, что ход зависимости совпадает.

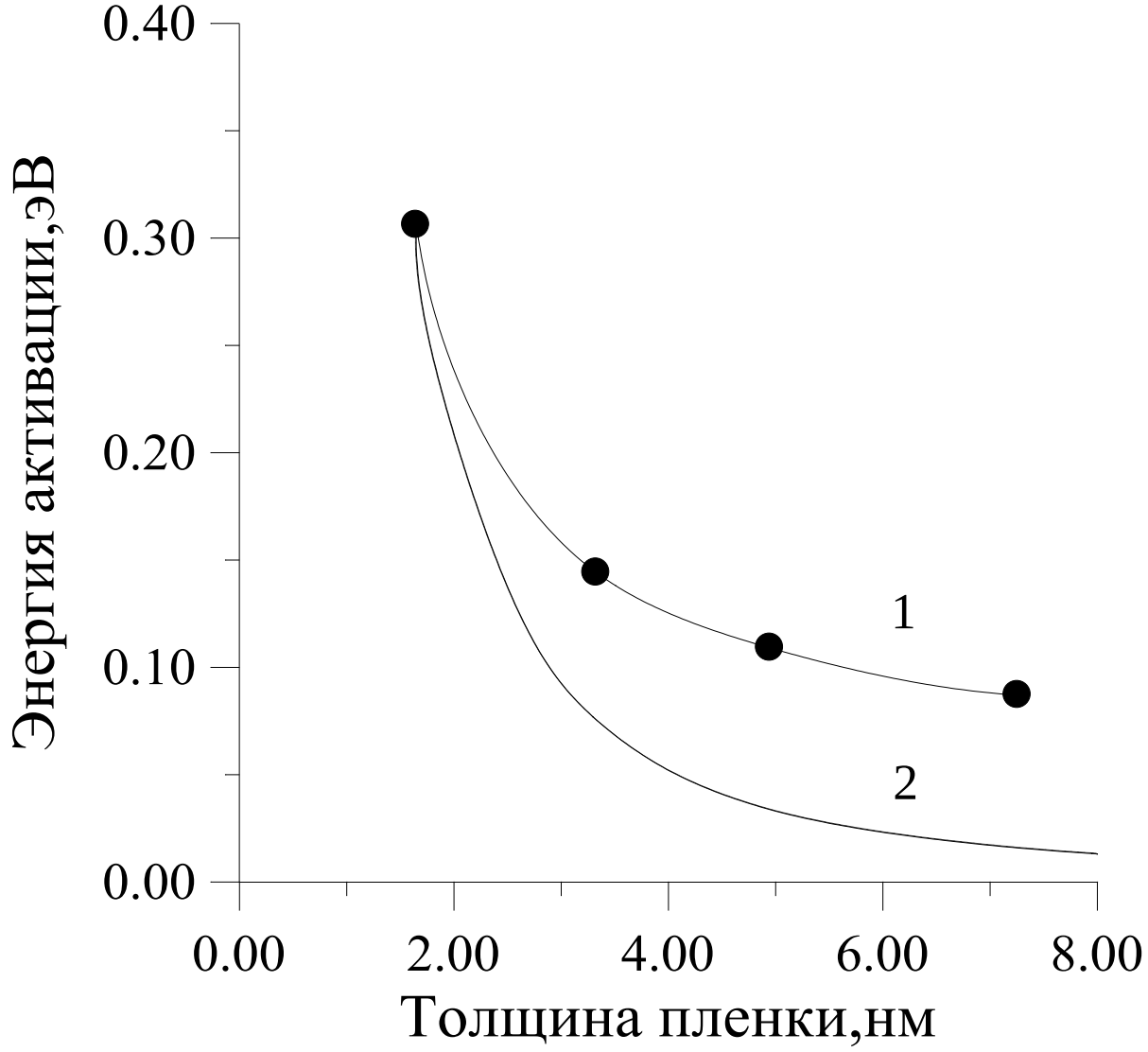


Рис. 5. График зависимости энергии активации от толщины пленки (d):
1 – эксперимент, 2 – теория

Следует заметить, что измерения проводились на воздухе, но поскольку температура нагрева образцов не превышала 1100С, повторяемость результатов в режиме нагрева и охлаждения была хорошей.

В работе методом сканирующего электронно-лучевого распыления получена серия тонкопленочных графеноподобных образцов, формируемых в едином технологическом процессе и отличающихся только величиной толщины. На специально созданной экспериментальной установке измерены температурные зависимости поверхностного сопротивления. Показано, что при толщине пленки ≈ 10 нм наблюдается переход полуметалл-полупроводник, который можно рассматривать как проявление квантового размерного эффекта.

Библиографический список

1. Лифшиц, И.М. Некоторые вопросы электронной теории металлов.I.Классическая и квантовая механика электронов в металлах / И.М. Лифшиц, М.И. Каганов // УФН. – Т. 69. – Вып. 3. – С. 419–458.

2. Сандомирский, В.Б. Квантовый эффект размеров в пленке полуметалла / В.Б. Сандомирский // ЖЭТФ. – 1967. – Т. 52. – Вып. 1. – С. 158–169.

3. Тавгер, Б.А. Квантовые размерные эффекты в полупроводниковых и полуметаллических пленках / Б.А. Тавгер, В.Д. Демиховский // УФН. – 1968. – Т. 96. – С. 61.

4. Огрин, Ю.Ф. Температурная зависимость удельного сопротивления и постоянной Холла размерно-квантованных пленок висмута / Ю.Ф. Огрин, В.Н. Луцкий, М.У. Арифова и др. // ЖЭТФ. – 1967. – Т. 38. – Вып. 4(10). – С. 1218–1224.

5. Аскеров, Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках / Б.М. Аскеров. – М.: Наука, 1985. – 318 с.

6. Троицкий, А.А. Структура и свойства углеродных пленок, полученных электронно-лучевым распылением в вакууме / А.А. Троицкий, В.М Березин, В.С. Лукашев // Вестник Южно-Уральского университета. Серия: «Математика. Механика. Физика». – 2012. – № 34. – С. 130–137.

7. Троицкий, А.А. Электрические и оптические свойства углеродных пленок, осажденных электронно-лучевым методом / А.А. Троицкий, В.М. Березин, В.С. Лукашев // Нано- и микросистемная техника. – 2013. – № 10. – С. 15–19.

К содержанию

УДК 537.39: 537.5

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ НОВОГО ИСТОЧНИКА ЭНЕРГИИ НА БАЗЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО РАЗРЯДА В ПОТОКЕ ЭЛЕКТРОЛИТА

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

Представлена экспериментальная установка и результаты исследования параметров электрического разряда, инициируемого в водно-солевом растворе. С использованием плазменного фокуса как модели протекающих в реакторе установки процессов предложен механизм выделения электрической и тепловой энергии.

Ключевые слова: электрический разряд, плазменный фокус, энергия.

Введение

В последние несколько десятилетий возник повышенный интерес к процессам, протекающим в низкотемпературной плазме и являющимися основой как для исследований, так и для применения в различных технологиях, связанных с превращениями химических элементов, в том числе с выделением энергии [1, 2]. О возможности «холодных» ядерных реакций сообщали Сахаров А.Д. [3], Зельдович Я.Б. [4].

Авторы работы [5, 6] приводят анализ процессов, протекающих в водородной плазме при прохождении через нее больших по величине импульсных токов. В этом случае возникают различного вида неустойчивости, связанные с пинч-эффектом, в частности, пережатия, «шейки». Установлено, что наиболее существенным фактором, влияющим на разогрев плазмы, является электродинамическое ускорение в направлении оси токового шнура его тонкой наружной оболочки (скин-слоя), сопровождающееся образованием мощной ударной волны. При этом может возникать рентгеновское и (или) нейтронное излучение, но экспериментальные исследования пока не подтвердили термоядерную природу его возникновения.

Результаты исследований плазменного фокуса не привели к их использованию при строительстве больших энергетических установок, но показали, что ядерные превращения в веществе могут происходить в плазме достаточного мощного электрического разряда, и их можно использовать в различных технологических целях, например, в металлургической промышленности [7, 8].

Кроме того, ядерные превращения могут сопровождаться выделением энергии и появлением свободных электронов, образующих электрический ток [8]. Но процессы в плазме электрического разряда достаточно сложны и нелинейны и поэтому даже небольшие изменения задаваемых параметров приводят к качественно различным результатам.

Цель данной работы в целом – разработка физических основ создания новых источников энергии. Работа проводилась в несколько этапов. На первом из них была создана экспериментальная установка и проведены экспериментальные исследования, результаты которых подтвердили предположение о возможности применения электрического разряда для разработки нового источника энергии.

Экспериментальная часть

Принципиальная электрическая схема установки с постоянным напряжением U, подаваемым на реактор, представлена на рис. 1. Трёхфазное электрическое напряжение величиной 380 В из электрической сети подаётся на регулируемый тиристорный выпрямитель, который позволяет получить на его выходе постоянное напряжение от 270 до 530 В. Этим напряжением заряжается конденсатор С. Балластное сопротивление Rб ограничивает ток в электрической цепи величиной 50 А, что соответствует максимальному значению тока в случае короткого замыкания цепи внутри реактора Р. Конденсатор периодически разряжается на электроды реактора с образованием электрических разрядов.

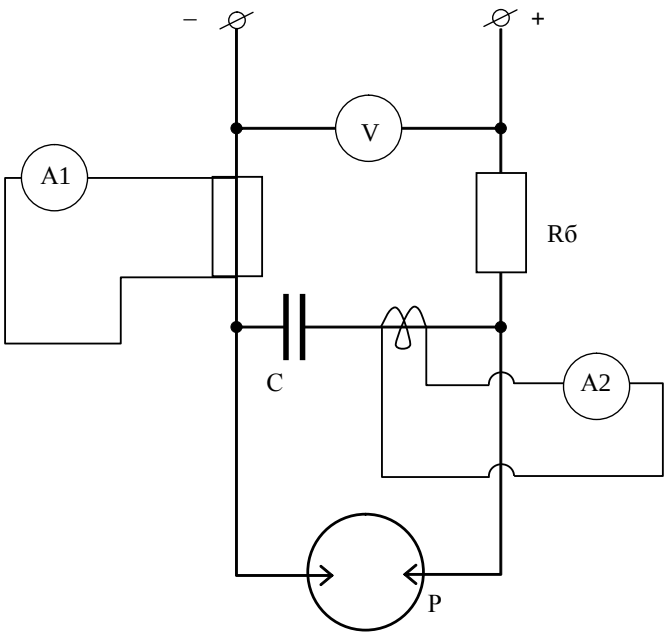


Рис. 1. Электрическая схема установки

Реактор экспериментальной установки имеет форму цилиндра (внутренний диаметр – 30 мм, длина – 100 мм) и изготовлен из оргстекла. В основания цилиндра ввинчены проточные трубчатые электроды внутренним диаметром 8 мм. Обращённые друг к другу концы электродов проточены до диаметра 12 мм. В хвостовой части электродов имеются контактные шпильки для крепления проводов электропитания и штуцеры для подсоединения шлангов подачи раствора электролита, который самотеком поступает из расходной емкости.

В процессе экспериментов изменялись различные параметры: величина тока разряда, скорость и расход подаваемого через реактор раствора электролита, расстояние между электродами, геометрические размеры реакционного пространства, химический состав и концентрация электролита.

Результаты, полученные в первой серии опытов, свидетельствуют о том, что в водном растворе электролита появляются либо новые химические элементы, либо существенно возрастает их концентрация в суспензии элек-

тролита. Было отмечено возникновение нескольких различных режимов электрического разряда, начиная от электроискрового, сопровождающегося громкими щелчками, который может переходить в более плавный дуговой и, наконец, наиболее перспективный для выполнения поставленной задачи режим, характеризующийся свечением от соломенного до красно-розового цвета и «шипящим» звуком.

Последний режим можно, согласно [8], идентифицировать, как возникновение плазмоида, который приводил к резкому изменению структуры электролита – формированию в нем нерастворимого осадка (суспензии). Исследования состава осадков, выделенных из суспензии, показали наличие в них следующих элементов: C, O, Al, Si, P, Al, Mg, Ca, Cr, Fe, Ni и Cu (рис. 2). Вместе с тем элементный анализ электродов и выпаренной из раствора соли NaCl осадок показал отсутствие в этих материалах таких элементов, как Si, P, Al, Ca, Ni, Fe, что позволяет сделать вывод об образовании этих элементов в процессе электрического разряда.

Кроме химических превращений при возникновении в реакторе плазмоида было отмечено появление высокочастотного электрического тока в цепи реактора, который по величине составлял 200–300 А, что на два порядка больше, чем величина постоянного тока, потребляемого установкой из сети. Частота этого тока опытах достигала 100 кГц, а в опытах, проведенных авторами [8] – до 1 ГГц.

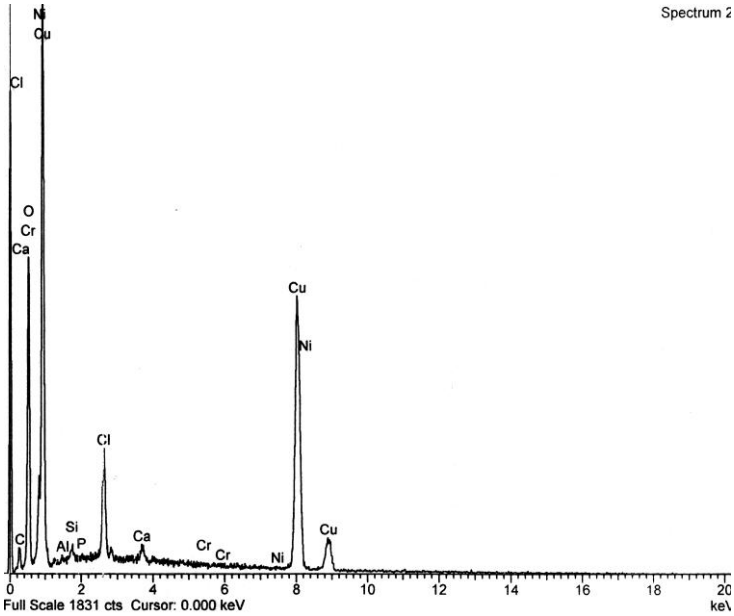


Рис. 2. Рентгеновский спектр испускания образца № 1

Возникновение высокочастотного электромагнитного поля наблюдалось нами также и на установке, выполненной для исследования плазмоида, в которой один из электродов помещался над поверхностью электролита, а острие второго находилось под тонким слоем жидкости. Установлено, что даже при небольшом импульсе тока, создаваемого конденсатором с емкостью C = 100 мкФ и напряжением U = 500 В, над поверхностью электролита возникает плазмоид, создающий электромагнитное поле.

Обсуждение результатов

Полученные результаты позволяют проанализировать механизм протекания физических процессов, приводящих к преобразованию химических элементов и возникновению энергии при ядерных превращениях. Главным фактором, сопутствующим плазмоидному режиму, является высокая частота токов в цепи реактора (до 1 ГГц).

Расчеты, проведенные на основе полученных данных, показали, что максимальная скорость движения электронов в высокочастотном импульсе плазмоида, локализованного вблизи катода, может достигать $(1–10)\cdot10^3$ м/с, а токи высокой частоты определены движением только электронов, поскольку ускорения тяжелых частиц и их средние скорости движении, по крайней мере, на три порядка меньше. Поэтому воздействие пинч-эффекта на электроны несравнимо больше, чем на массивные частицы. В результате соударений и «расталкивания» (терминология согласно [6]) электроны приближаются к токовой оси, в приосевой области образуется сгусток электронов, возникает «перетяжка» токового шнура и разделение электронов и положительных ионов в результате совместного действия электрического и магнитного полей. Таким образом, в плазме возникают малые объемы (реакционные точки – РТ), характеризующиеся высокими значениями плотности массы и заряда, а также потенциальной энергии. В этих условиях преодоление потенциального барьера для взаимодействия ядер не требует высоких температур, как при термоядерном синтезе. Поэтому ядерные реакции могут протекать в РТ плазмы электрического разряда. Об этом свидетельствует выделение большого количества энергии, как в виде теплоты, так и электрического тока.

Наиболее интересным является практический вопрос: как возникают различные режимы взаимодействия в плазме электрического разряда и каким образом можно достичь того или иного режима. Очевидно, что количество РТ в плазмоиде должно быть пропорциональным частоте высокочастотных токов. Если принять, что плазма электролита находится в области плазмоида в течение ~ 0,1 с, а частота – $\sim10^7$ Гц, то число РТ в плазмоиде составляет $\sim10^6$. Совместно эти РТ дают дополнительный ток, который фиксировался в настоящей работе.

С точки зрения организации процесса наиболее сложным является инициирование РТ по всему объему, так как функционирование каждой из них – это сложный процесс, зависящий от ряда факторов: электрического, магнитного и гидродинамического полей, химического состава электролита и т.д. Не менее важным является создание условий для резонансного взаимодействия высокочастотных электромагнитных полей по всему объему плазмоида. Для увеличения амплитуды гармонической (в линейном приближении) электромагнитной волны в объеме реактора под действием внешней электромагнитной волны необходимо совпадение их волновых чисел, что выражается в равенстве фазовых скоростей внутренней и внешней

волны [9]. Внешняя волна может быть создана устройством запуска реактора. Собственная фазовая скорость определяется геометрией реактора, а также свойствами плазмы и может изменяться в широких пределах. Поэтому устройство запуска реактора должно иметь плавную регулировку частоты.

В проведенных испытаниях было отмечено резкое повышение эффективности ее работы на некоторых режимах, которые были достигнуты добавлением к электролиту на основе NaCl поверхностно-активного вещества (ПАВ) ОП-10 в количестве 0,1–0,2 % масс. ПАВ снижает коэффициент поверхностного натяжения раствора и облегчает достижение равномерности распределения РТ по объему плазмоида. В результате на этих режимах количество тепла, выделенного при прохождении раствора через реактор почти в 2 раза больше, чем в отсутствие ПАВ.

Известно, что для протекания реакций синтеза между легкими атомными ядрами, обеспечивающих значительное выделение энергии, необходима высокая температура (~ 10^8 К) и достаточная концентрация частиц в реакционном объеме. Однако уже в работе [10] были проведены теоретические и экспериментальные работы, приближающие исследователей к получению реакций синтеза при более низких температурах, 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 [11, 12]. 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 влияние астрофизического фактора для подпорогой ядерной реакции от агрегатного состояния вещества [11].

Большинство ядер, вступающих в ядерные реакции, не перескакивают через кулоновский барьер, а просачиваются сквозь него в результате туннельного эффекта. Таким образом, вероятность нахождения частицы в той или иной точке пространства всегда отлична от нуля. Авторы [13] 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 [14, 15]. Вопросы согласования разрабатываемого подхода с формулировками 1-го и 2-го законов термодинамики рассмотрены в [13].

Существенную роль начинает играть фаза квантовых колебаний частицы. Подтверждением этого предположения являются экспериментальные данные о том, что при 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 [13] механизм преодоления кулоновского барьера согласуется с результатами [11] 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:

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

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 обусловливает негативное отношение к разработкам, касающихся холодного ядерного синтеза.

Вероятность ядерного взаимодействия частиц, рассчитанная по предлагаемой в работе [13] методике, значительно лучше согласуется с экспериментом, проведенным авторами [2]. Следует отметить также, что многими исследователями, например, авторами работы [6] обнаружено продолжение реакций холодного ядерного синтеза после выключения напряжения в электролитической ячейке, которое длиться 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 [16] 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.

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 про-

пускается электрический ток и в котором возникает «плазмоид» (большая часть реактора занимает плазма, имеющая оранжево-розовую окраску). В плазме наблюдаются ленгмюровские 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 [17]. Это дает основание предполагать, что ленгмюровские 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 [13]. Необходимо, чтобы потенциальная яма была асимметричной. При коллективном движении электронов каждый из них подчиняется обычному уравнению гармонического осциллятора [14] и моделируется функцией

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

где величина a пропорциональна приложенному напряжению, a 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. Используемый часто экспериментальный подход к исследованию трансформации ядер совершенно естественен, потому что традиционная квантовая механика не способна выявит 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. 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.

2. Балакирев, В.Ф. Низкотемпературная трансмутация химических элементов с выделением энергии при электромагнитных воздействиях / В.Ф. Балакирев, В.В. Крымский // Изв. Челябинского научн. Центра. – 2003. – Вып. 4 (21).

3. Сахаров, А.Д. Пассивные мезоны / А.Д. Сахаров // Отчет ФИАН. – 1948.

4. Зельдович, Я.Б. Реакции, вызываемые μ- мезонами в водороде / Я.Б. Зельдович // ДАН. – 1954. – Т. 95. – № 3. – С. 493–499.

5. Филиппов, В.В. Обзор экспериментальных работ, выполненных в ИАЭ им. И.В. Курчатова, по исследовании плазменного фокуса / В.В. Филиппов // Физика плазмы. – 1983. – Т. 9. – Вып. 1. – С. 25–44.

6. Иванов, В.Д. О механизме ускорения дейтонов в плазменном фокусе / В.Д. Иванов // Письма в ЖЭТФ. – 1985. – Т.42. – Вып. 7. – С. 269–271.

7. Патент № 2096846 РФ, МКИ G21 G1/00, H 1/24. Способ получения элементов и устройство для его осуществления / А.В. Вачаев, Н.И. Иванов, А.Н. Иванов, Г.А. Павлова // Бюлл. Изобретений 1997. – № 32. – С. 369.

8. Паньков, В.А. Демонстрационная методика синтеза элементов в плазме электрического разряда / В.А. Паньков, Б.П. Кузьмин // Актуальные проблемы современной науки: сб. науч. тр. – М: изд-во компании «Спутник +», 2008 г. – № 5(44). – С. 112–116.

9. Физический энциклопедический словарь / под ред. А.М. Прохорова. – М.: Советская энциклопедия, 1983. – 928 с.

10. Зельдович, Я.Б. Ядерные реакции в холодном водороде / Я.Б. Зельдович, С.С. Гернштейн // УФН. – 1960. – Т. 71. – Вып. 4. – С. 129–134.

11. Цыганов, Э.Н. Холодный ядерный синтез / Э.Н. Цыганов // Ядерная физика. – 2012. – Т. 75, № 2. – С. 174–180.

12. 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.

13. 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.

14. Канарев, Ф.М. Холодный синтез при плазменном электролизе воды / Ф.М. Канарев, М. Тадахико // Новая энергетика. – 2003. – № 1. – С. 5–10.

15. Ратис, Ю.А. Управляемый «термояд» или холодный синтез? Драма идей / Ю.А. Ратис. – Самара: Изд-во Самарского НЦ РАН, 2009. – 98 с.

16. 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.

17. 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: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – С. 45–48.

К содержанию

УДК 534-8 + 620.179.16

ИЗЛУЧАТЕЛЬ И ПРИЕМНИК УЛЬТРАЗВУКА ДЛЯ БЕСКОНТАКТНОГО КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ТОНКОЛИСТОВЫХ МЕТАЛЛОИЗДЕЛИЙ

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

Проведены исследования по выявлению зависимости основных характеристик ультразвуковых волн Лэмба, возбуждаемых в металлических пластинах «термо-оптическим» излучателем от его геометрических и энергетических параметров. В качестве «термо-оптического» излучателя ультразвука принят нагретый под действием коротких лазерных импульсов участок поверхности металла. Для регистрации возбуждаемых волн Лэмба разработан и изготовлен широкополосный ЭМА-приемник. Полученные результаты исследования рекомендуется использовать при создании приборов для бесконтактного ультразвукового контроля качества тонких металлоизделий.

Ключевые слова: у.з. волны Лэмба, лазерное возбуждение, термо-оптический излучатель, широкополосный ЭМА-приемник.

Введение

В практике ультразвуковой дефектоскопии широко используются методы контроля качества тонколистовых металлоизделий и созданных на их основе композитных материалов с помощью волн Лэмба. Эффективность такого контроля можно существенно повысить, если использовать бесконтактные способы возбуждения и приема ультразвука. Наиболее перспективным из них является генерация волн Лэмба в изделии с помощью наносекундных лазерных импульсов и их регистрация электромагнитно-акустическим (ЭМА) приемником [1–4].

При облучении наносекундными лазерными импульсами листовых металлоизделий нагретая часть поверхности металла становится источником ультразвуковых волн Лэмба. Эффективность такого термо-оптического излучателя (в дальнейшем – ТО-излучатель) определяется теплофизическими свойствами металла, его толщиной и поверхностной плотностью мощности теплового излучения, которая, в свою очередь, зависит от мощности лазерного излучения. Перечисленные параметры ТО-излучателя определяют тип возбуждаемых волн Лэмба, величину амплитуды, форму и длительность ультразвуковых импульсов, а также частоту их заполнения.

В работах [4, 5] бесконтактная регистрации ультразвуковых волн, возбуждаемых в пластине лазерными импульсами, осуществлялась ЭМА-приемником объемных волн. Можно существенно повысить чувствительность такого приемника, если учесть некоторые особенности движения упругих частиц в волнах Лэмба разных номеров [6].

Таким образом, чтобы довести контролирующую аппаратуру, созданную на базе импульсного лазера и широкополосного ЭМА-приемника до внедрения на производстве необходимо:

– разработать и изготовить ЭМА-приемник симметричных и антисимметричных волн Лэмба;

– провести исследования по выявлению зависимости основных характеристик волн Лэмба, возбуждаемых ТО-излучателем, от его геометрических и энергетических параметров, теплофизических свойств и толщины листового металла.

Методика проведения исследований

Для проведения экспериментальных исследований использовалась установка, схема которой показана на рис. 1.

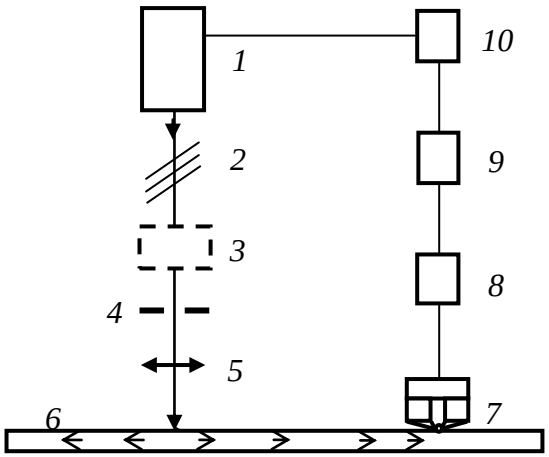


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:
1 – лазер,
2 – оптический аттенюатор,
3 – измеритель мощности,
4 – диафрагма, *5* – линза,
6 – металлическая пластина,
7 – ЭМА-приемник,
8 – усилитель тока,
9 – усилитель напряжения,
10 – цифровой осциллограф

Она состоит из импульсного лазера *1*, оптического аттенюатора *2*, измерителя мощности лазерного излучения *3*, диафрагмы *4*, фокусирующей линзы *5*, исследуемых образцов в виде металлических пластин *6*, ЭМА-приемника волн Лэмба *7*, усилителя тока *8*, усилителя напряжения *9*, цифрового осциллографа *10*.

Нагрев поверхности образца осуществляется импульсным лазером Nd: YAG Brilliant B фирмы QUANTEL с модулируемой добротностью. Длина волны лазерного излучения 1064 нм, длительность и энергия световых импульсов равны соответственно 4-6 нс и 0,85 Дж. Средняя мощность лазера при частоте следования импульсов 10 Гц составляет 8,5 Вт. Диаметр светового пучка 9,5 мм, его расхождение менее чем 0,7 мрад. Для регулирования мощности лазерного излучения используется оптический аттенюатор в виде набора тонких плоскопараллельных стеклянных пластин, расположенных под небольшим углом к лучу лазера. Мощность лазерного излучения измеряется прибором ИМО-2Н. Изменение размеров ТО-излучателя осуществляется с помощью круглых диафрагм и собирающей линзы. Образцами служили металлические (ферромагнитные и неферромагнитные) пластины размерами 270х60 мм и толщиной от 0,6 до 2,5 мм.

Для регистрации возбуждаемых волн Лэмба использовался широкополосный (от 20 до 200 МГц) приемный тракт, состоящий из последовательно соединенных ЭМА-приемника, усилителей тока, напряжения и цифрового осциллографа. Конструкция ЭМА-приемника обеспечивала наиболее оптимальный прием симметричных и антисимметричных ультразвуковых волн. Достигалось это соответствующей ориентацией поляризующего магнитного поля относительно образца (за счет изменения формы концентраторов полюсов постоянного магнита) и расположения высокочастотного индуктора в этом поле. Амплитуда, форма, длительность и частота колебаний в электрических импульсах, наблюдаемых на экране дисплея осциллографа, считаются пропорциональными соответствующим величинам в импульсах волн Лэмба.

Результаты исследований и их обсуждение

1. Зависимость характеристик импульсов волн Лэмба от диаметра и площади ТО-излучателя при его постоянной мощности теплового излучения

Мощность теплового излучения ТО-излучателя P_T связана с мощностью лазерного излучения P_λ через коэффициент отражения *k*. Величина этого коэффициента для большинства сталей равна примерно 60 % [7]. Тогда для нашего случая:

$$P_T = 0,4 \cdot P_\lambda .$$

Лазерный луч мощностью 7,0 Вт направлялся через диафрагму с круглым отверстием на пластину толщиной 0,6 мм. В результате на её поверхности начинает действовать ТО-излучатель с постоянной мощностью теплового излучения 2,8 Вт. В ходе эксперимента диаметр отверстия диафрагмы, а значит и диаметр ТО-излучателя, изменялся от 1,0 до 9,0 мм с шагом 1,0 мм. По полученным осциллограммам были определены зависимости максимальных амплитуд, форма, длительность и частота колебаний импульсов симметричных и антисимметричных волн Лэмба от диаметра и площади ТО-излучателя.

На рис. 2 приведены графики для максимальных амплитуд. Разброс значений амплитуд может быть вызван неравномерным распределением энергии по площади ТО-излучателя, анизотропией тепловых свойств металла, а также погрешностями при аналого-цифровом преобразовании электрического импульса, подаваемого с выхода приемного тракта на вход осциллографа.

Из результатов эксперимента видно, что с увеличением диаметра (площади) ТО-излучателя амплитуды увеличиваются, но происходит это с разными скоростями. Для диаметров от 1,0 до 3,5 мм (площадей от 0,8 до 10 мм^2) темп роста амплитуд значительно больше, чем для диаметров от 3,5 до 9,0 мм (площадь от 10 до 65 мм^2). Кроме того, из графиков следует, что для получения волн Лэмба достаточно большой амплитуды, диаметр ТО-излучателя должен быть не менее 4,0 мм.

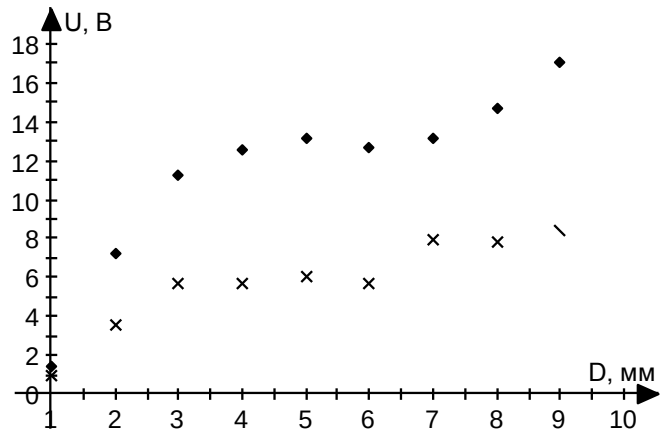


Рис. 2. Зависимость максимальных амплитуд импульсов волн Лэмба от диаметра «термо-акустического» излучателя.
Мощность лазерного излучения 7,0 Вт:
— ■ — симметричные волны, — × — антисимметричные воны

Исследование зависимости формы, длительности и частоты колебаний регистрируемого импульса от диаметра (площади) ТО-излучателя показали, что до 3,0 мм (7,1 мм^2) эти характеристики существенно не изменяется. Порядок этих величин можно оценить из приведенной на рис.. 3а) осциллограммы импульса симметричных волн Лэмба, возбуждаемых ТО-излучателем диаметром 1,0 мм (площадь 0,8 мм^2). Видно, что длительность импульса равна 3,0 мкс, средняя частота колебаний 1,5 МГц.

Дальнейшее увеличение диаметра (площади) ТО-излучателя приводит к изменениям формы и некоторых характеристик регистрируемого импульса. На рис. 3, *б* приведена осциллограмма импульса симметричной волны Лэмба от ТО-излучателя диаметром 9,0 мм (площадь 63,6 мм^2). Видно, что произошло его разделение на два разных по форме и амплитуде импульса. Длительность разделенных импульсов одинакова и равна 2,8 мкс, а средние частоты колебаний отличается примерно в два раза (у первого 0,7 у второго 1,3 МГц). В случае, когда по каким-либо причинам разделение ультразвукового импульса нежелательно, то диаметр ТО-излучателя не должен превышать 3,0 мм.

2. Зависимость характеристик импульсов волн Лэмба от мощности теплового излучения ТО-излучателя с постоянным диаметром

Лазерный пучок мощностью P_λ = 7,0 Вт и диаметром 9,5 мм, направлялся на образец через оптический аттенюатор. В результате на поверхности металла начинает действовать ТО-излучатель такого же диаметра. В ходе эксперимента диаметр оставался постоянным, а мощность теплового излучения изменялась с помощью оптического аттенюатора. Ее величина рассчитывалась по формуле:

$$P_T = 0,4 \cdot P_\lambda^*,$$

где P_λ^* – мощность лазерного излучения, измеренная на выходе аттенюатора. По полученным осциллограммам были определены зависимости макси-

мальной амплитуды, формы, длительности и частоты колебаний импульсов симметричных и антисимметричных волн Лэмба от мощности теплового излучения ТО-излучателя. На рис. 4 приведены графики такой зависимости для максимальных амплитуд симметричных волн. Поскольку диаметр ТО-излучателя больше 3,0 мм, то ЭМА-приемник регистрирует раздвоенный акустический импульс. Результаты, отраженные на рис. 4 относятся к максимуму первого импульса. Из графиков следует, что полученные зависимости почти линейные: чем больше тепловая мощность, тем больше амплитуды. Однако, скорости роста амплитуд при минимальных (до 0,6 Вт) и максимальных мощностях (0,6 до 2,8 Вт) значительно отличаются друг от друга.

На рис. 5 приведена осциллограмма импульсов симметричной и антисимметричной волн Лэмба от ТО-излучателя с максимальной тепловой мощностью – 2,8 Вт. Видно, что длительность и средняя частота колебаний в первом акустическом импульсе равны соответственно 2,8 мкс и 0,7 МГц. Эти же величины во втором импульсе равны соответственно 3,0 мкс и 1,3 МГц. По мере уменьшения мощности теплового излучения, значение этих параметров не изменялось.

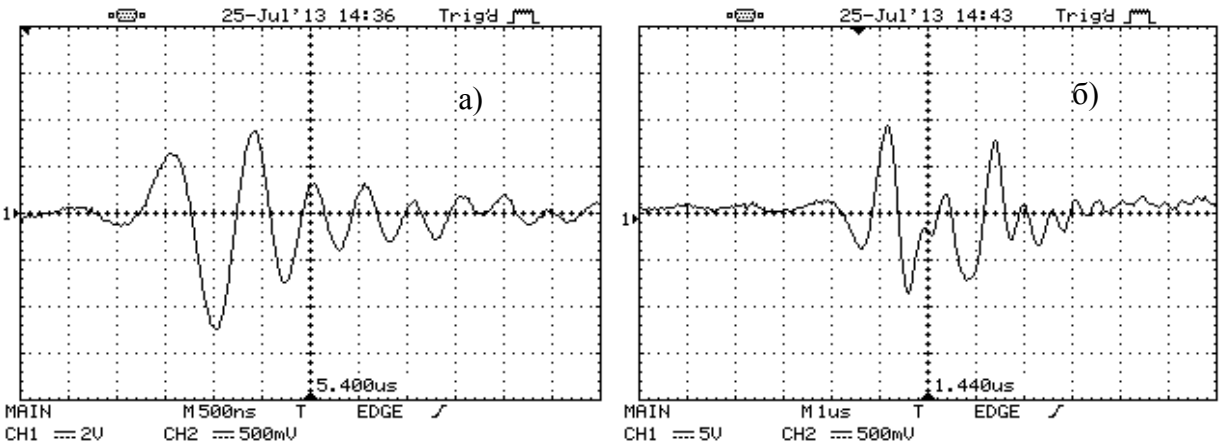


Рис. 3. Импульсы симметричных волн Лэмба генерируемые термо-оптическим излучателем:
а) D = 1,0 мм (S = 0,8 мм^2); б) D = 9,0 мм (S = 63,4 мм^2)

3. Зависимость характеристик импульсов волн Лэмба от поверхностной плотности мощности теплового излучения ТО-излучателя

Лазерный луч мощностью $\langle P_\lambda \rangle$ = 0,28 Вт направлялся на металлическую пластину через собирающую линзу с фокусным расстоянием F = 12,0 см. В результате, на поверхности пластины начинает действовать ТО-излучатель, диаметр которого определяется расстоянием между линзой и поверхностью образца. Перемещением линзы в пределах двойного фокусного расстояния формировались ТО-излучатели с диаметрами от 0,5 до 4,5 мм с шагом 0,5 мм. Измерение диаметров проводилось с помощью светочувствительной бумаги и микрометра.

Средняя плотность мощности теплового излучения рассчитывалась по формуле:

$$\langle q \rangle = \frac{\langle P_T \rangle}{(\pi D^2)/4 \cdot \tau \cdot \nu} = \frac{1{,}6 \cdot \langle P_\lambda \rangle}{\pi D^2 \cdot \tau \cdot \nu} \ ,$$

здесь D –диаметр ТО-излучателя, τ и ν соответственно длительность и частота лазерных импульсов. Потери световой энергии при прохождении лазерного луча через линзу не учитывались.

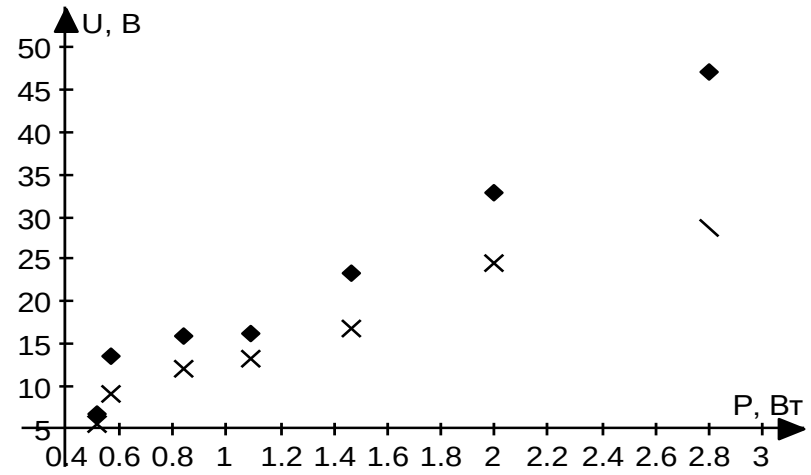


Рис. 4. Зависимость максимальных амплитуд импульсов волн Лэмба от средней тепловой мощности «термо-акустического» излучателя: — ■ — симметричные волны, — × — антисимметричные волны

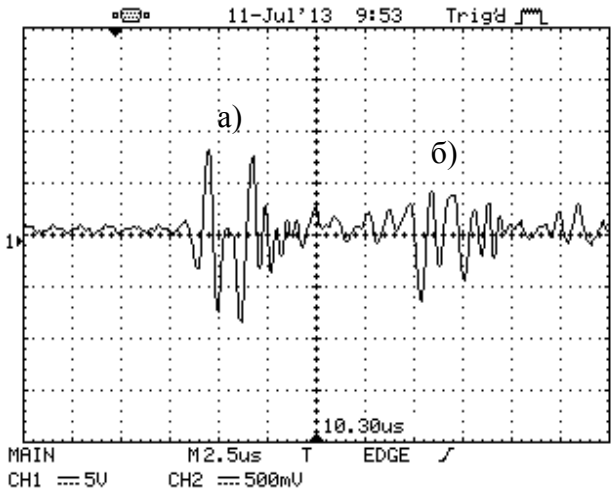


Рис. 5. Импульсы волн Лэмба, генерируемые «термо-оптическим» излучателем, тепловая мощность которого 2,8 Вт (D = 9,5 мм): а) – симметричные волны; б) – антисимметричные волны

По полученным осциллограммам были найдены зависимости характеристик симметричных и антисимметричных волн Лэмба от средней по-

верхностной плотности мощности теплового излучения $\langle q \rangle$. На рис. 6 приведены графики зависимости максимальных амплитуд упругих смещений от $\ln\langle q \rangle$. Логарифмическая шкала выбрана по причине резкого возрастания величины $\langle q \rangle$ при уменьшении диаметра излучателя. Анализ полученной зависимости удобнее проводить вместе с экспериментальным графиком, приведенным на рис. 7.

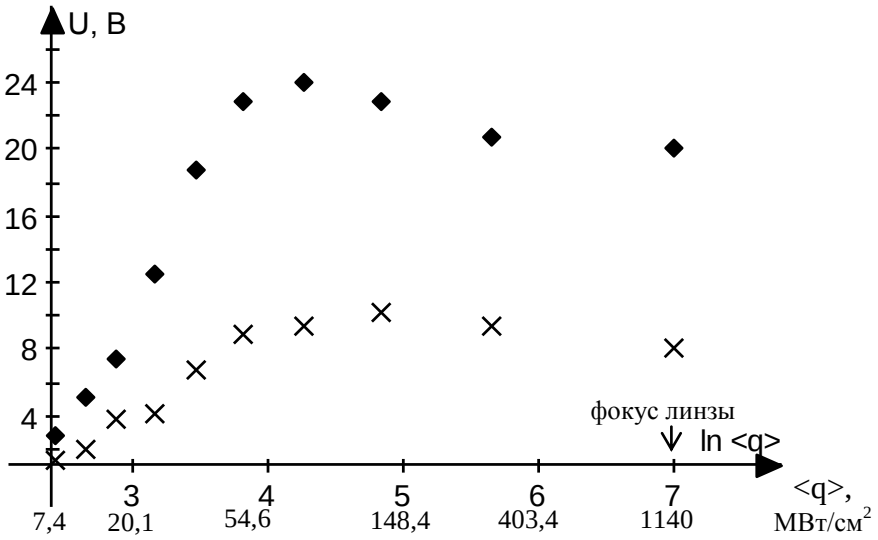


Рис. 6. Зависимость максимальных амплитуд импульсов волн Лэмба от средней поверхностной плотности тепловой мощности «термо-оптического» излучателя. Мощность лазерного излучения 0,28 Вт: — ■ — симметричные волны, — × — антисимметричные волны

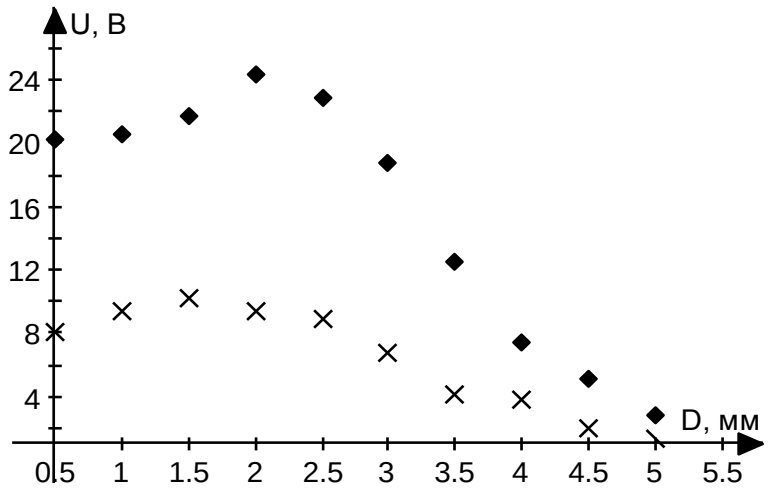


Рис. 7. Зависимость максимальных амплитуд импульсов волн Лэмба от диаметра «термо-оптического» излучателя. Мощность лазерного излучения 0,28 Вт: — ■ — симметричные волны, — × — антисимметричные волны

Из результатов эксперимента следует, что изменение амплитуд в зависимости от $\ln\langle q \rangle$ и диаметра ТО-излучателя почти симметрично относительно фокуса линзы. По этой причине, формировать ТО-излучатели на

поверхности образца с помощью линзы можно как до, так и после её фокуса. Максимумы упругих смещений в импульсах волн Лэмба, при данной мощности лазерного импульса, достигаются при значении поверхностной плотности мощности теплового излучения 126,8 МВт/см^2. Это соответствует диаметру ТО-излучателя 2,0 мм. Увеличение плотности мощности теплового излучения до максимальной (1140 МВт/см^2) или уменьшение диаметра ТО-излучателя до минимального (0,5 мм), снижает амплитуду смещений примерно на 18 %. Причина этого заключается в том, что в механизм лазерной генерации ультразвука включается испарительный процесс и возникающая при этом плазма экранирует поверхность образца от лазерного излучения. Как следует из опыта, при этом начинается заметное разрушение поверхности образца. Зависимость амплитуды смещений от диаметра ТО-излучателя является довольно критичной. Так, его увеличение от 2,0 мм до 4,0 мм приводит к уменьшению амплитуды в три раза. Это соответствует уменьшению $\langle q \rangle$ от 71 до 18 МВт/см^2. Таким образом, для целей дефектоскопии наиболее оптимальной для ТО-излучателя является поверхностная плотность мощности теплового излучения $\langle q \rangle$ от 32 до 71 МВт/см^2. Это соответствует его диаметру D от 2,0 до 3,0 мм.

На рис. 8 и 9 приведены зависимости длительности τ импульсов волн Лэмба и средней частоты $\langle \nu \rangle$ колебаний в них от средней поверхностной плотности мощности теплового излучения $\langle q \rangle$ ТО-излучателя. Анализ полученных зависимостей удобнее проводить вместе с экспериментальными графиками, приведенными на рис. 10.

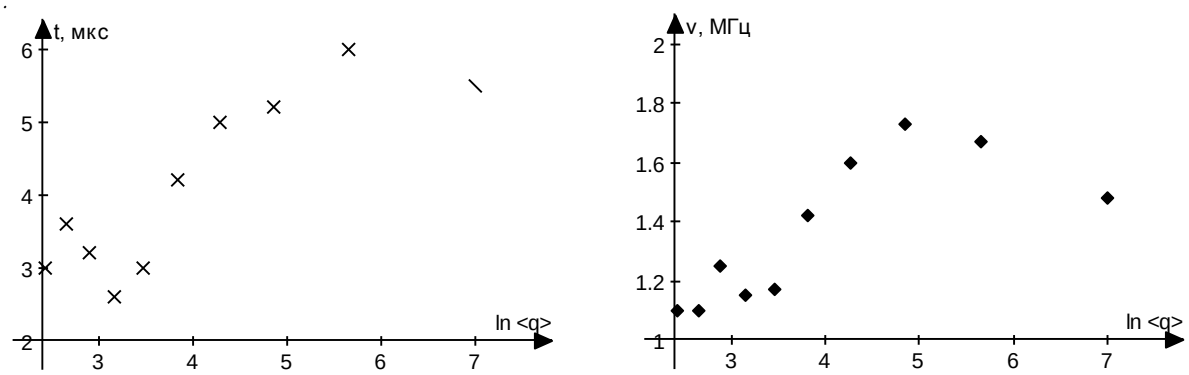
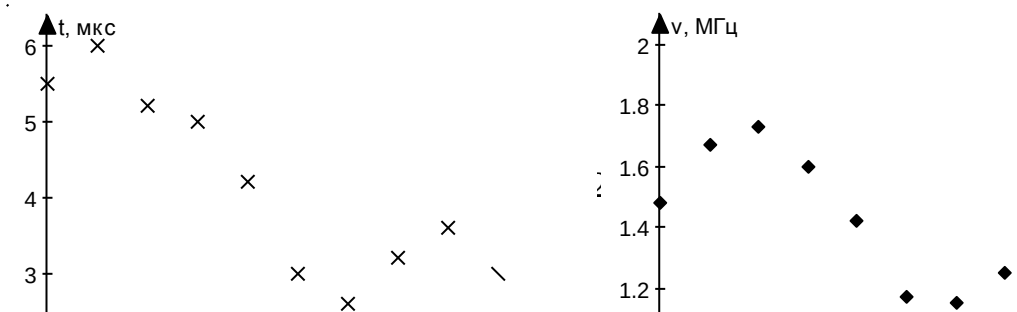


Рис. 8. Зависимость параметров импульсов симметричных волн Лэмба от поверхностной плотности тепловой мощности «термо-оптического» излучателя. Мощность лазерного излучения 0,28 Вт:
— × — длительность, — ■ — средняя частота колебаний



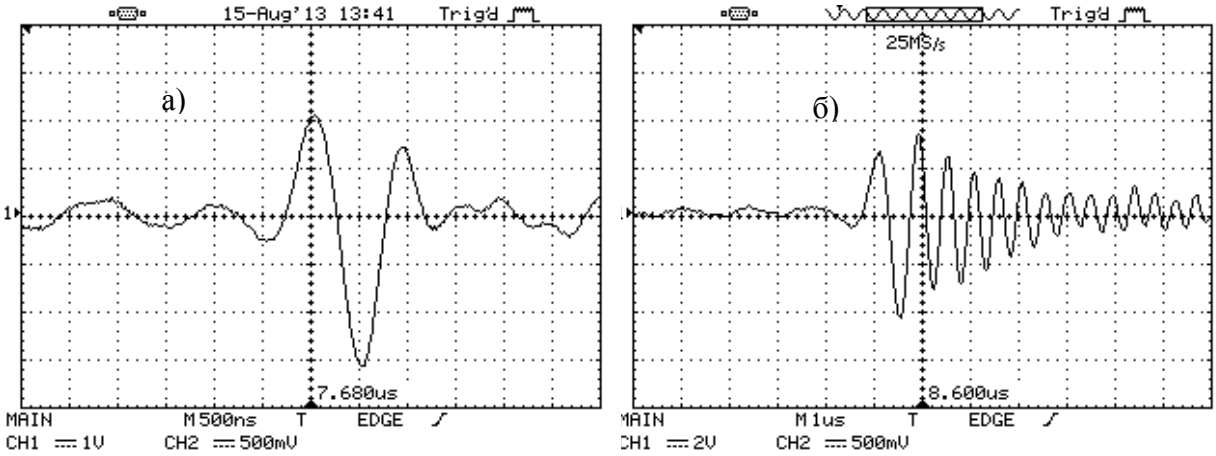


Рис. 10. Импульс симметричной волны Лэмба, генерируемый «термо-оптическим излучателем»:
а) $\langle q \rangle$ = 32 МВт/см^2, (D = 3,0 мм); б) $\langle q \rangle$ = 1140 МВт/см^2, (D = 0,5 мм)

Видно, что с увеличением $\langle q \rangle$ (уменьшением диаметра ТО-излучателя D) частота колебаний в упругих импульсах и их длительность увеличиваются. Излучатели с $\langle q \rangle$ = от 20,0 до 55,0 МВт/см^2 (D = 3$\pm$0,5) мм) генерируют самые короткие импульсы. Частота колебаний в этих импульсах также минимальна. Упругие импульсы, генерируемые ТО-излучателями с $\langle q \rangle$ = от 90,0 до 1140 МВт/см^2 (D = 1$\pm$0,5 мм), имеют максимальные длительности и частоту. На рис. 10 приведены осциллограммы соответствующих импульсов.

Выводы

1. Разработан, изготовлен и испытан в лабораторных условиях широкополосный ЭМА-приемник симметричных и антисимметричных ультразвуковых волн Лэмба, обладающий достаточной для практических целей чувствительностью.

2. С помощью ЭМА-приемника проведены исследования по выявлению зависимостей основных характеристик волн Лэмба, генерируемых в ме-

таллических пластинах ТО-излучателем – нагретой частью металла в зоне поглощения наносекундных лазерных импульсов:

– от диаметра ТО-излучателя при его постоянной мощности теплового излучения;

– от мощности теплового излучения ТО-излучателя при его постоянном диаметре;

– от поверхностной плотности мощности теплового излучения ТО-излучателя.

3. Из полученных результатов, в зависимости от поставленных задач, следуют рекомендации по выбору оптимальных геометрических и энергетических параметров ТО-излучателя ультразвука при создании приборов для контроля качества тонких металлоизделий. Базой таких приборов служит импульсный лазер, с помощью которого формируется ТО-излучатель и широкополосный ЭМА-приемник.

Библиографический список

1. Анализ ультразвуковых волн, возбуждаемых в металлической пластине лазерными импульсами наносекундной длительности / С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров, А.В. Шушарин, Е.В. Голубев // Дефектоскопия. – 2009. – № 4. – С. 35–40.

2. Шушарин, А.В. Экспериментальное исследование волн Лэмба при лазерной генерации / А.В. Шушарин // Дефектоскопия. – 2009. – № 10. – С. 4–15.

3. 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. 46–49.

4. ЭМА-регистрация ультразвуковых волн Лэмба, возбуждаемых лазерными наноимпульсами / С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров, Е.В. Голубев, А.А. Шульгинов.– Дефектоскопия. – 2013. – № 8. – С. 4–8.

5. Петров, Ю.В. Экспериментальное исследование ультразвуковых волн, возбуждаемых в металле лучом лазера / Ю.В. Петров, А.В. Шушарин // Дефектоскопия. – 1994. – № 8. – С. 90–92.

6. Викторов, И.А. Физические основы применения ультразвуковых волн Релея и Лэмба в технике // И.А. Викторов. – М.: Наука, 1966. – 168 с.

7. Таблицы физических величин. Справочник // под ред. И.К. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976. – 1005 с.

К содержанию

УДК 539.162 + 539.165

ОБРАТНЫЙ БЕТА-РАСПАД РАДИОНУКЛИДОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПОТОКОВ НЕЙТРИНО УЛЬТРАНИЗКИХ ЭНЕРГИЙ

А.А. Шульгинов

Проведено экспериментальное исследование процесса бета-распада ^{90}Y с целью обнаружения признаков влияния потоков нейтрино ультранизких энергий на скорость распада. Для концентрации потоков нейтрино использовалась свинцовая линза. Исследование показало: с вероятностью около 90 % можно утверждать, что имеются признаки такого процесса.

Ключевые слова: бета-распад; нейтрино ультранизких энергий; статистический анализ, критерий Роснера.

Реакция обратного бета-распада используется специалистами по физике нейтрино для исследования процессов, происходящих внутри Солнца. При термоядерных реакциях возникает поток нейтрино, способных произвести обратный бета-распад: $^{37}\mathrm{Cl}+\nu_e={}^{37}\mathrm{Ar}+e^-$ или $^{71}\mathrm{G}a+\nu_e={}^{71}\mathrm{G}e+e^-$ [1]. Этот процесс крайне маловероятен. Так, в галлий-германиевом эксперименте, проводимом в Баксанской нейтринной обсерватории ИЯИ РАН, в 50 т галлия под воздействием солнечных нейтрино возникает всего около 2 атомов германия в сутки! Это обусловлено тем, что сечение рассеяния нейтрино на ядрах при энергиях сотни кэВ исключительно мало – $\sigma \sim 10^{-43}$ см^2. Причём, эта реакция пороговая, т.е. минимальная энергия нейтрино, необходимая для неё – 233 кэВ. Главный вопрос о природе нейтрино остаётся открытым: массивны ли эти частицы? Тем не менее, исследователи склоняются к тому, что масса нейтрино не равна нулю. По последним данным сумма масс всех трёх типов нейтрино не более 0,28 эВ [2].

А.Г. Пархомов предложил для исследования космических нейтрино беспороговую реакцию: $^{90}\mathrm{Y}+\nu_e={}^{90}\mathrm{Zr}+e^-$ [3–5]. Иттрий-90 – дочерний изотоп, образующийся при бета-распаде стронция-90. Чтобы отделить электроны, образующиеся при возможных обратных бета-распадах, от тех электронов, которые образуются при спонтанных распадах иттрия-90 и стронция-90, было предложено ослаблять поток бета-частиц с помощью металлических пластинок. Максимальная энергия бета-спектра при распаде ^{90}Sr составляет 0,546 МэВ, а при распаде ^{90}Y – 2,28 МэВ. Поскольку при обратном бета-распаде практически всю энергию распада уносит электрон, то максимальную энергию в спектре бета-частиц будут иметь электроны, возникшие при обратном бета-распаде иттрия. Это позволяет их относительно легко выделить на фоне остальных электронов. К достоинствам этого метода обнаружения обратного бета-распада относится и то, что ^{90}Sr–^{90}Y – чистый бета-источник, который не даёт гамма-фона. Другим

преимуществом предложенного метода является отсутствие энергетического порога, а значит, она может протекать даже при нулевой энергии нейтрино. Сечение взаимодействия частиц с ядрами $\sigma \sim 1/V^2$ в нерелятивистском случае, где V – скорость частицы. Значит, следует ожидать, что при ультранизких энергиях нейтрино (менее 1 эВ) их сечение взаимодействия с ядром возрастёт на много порядков и может достичь значений, при которых эта реакция станет доступной для обнаружения даже несложными детекторами. Кроме того, при малых скоростях движения нейтрино их длина волны де Бройля становится гораздо больше, чем межатомное расстояние в твёрдых веществах. Это приводит к тому, что взаимодействие нейтрино с твёрдыми веществами должно носить макроскопический характер. Следовательно, можно ввести понятие «показатель преломления» для нейтринных волн n. Как показали исследования А.Г. Пархомова [3], для стекла n=0,95, а для свинцово-оловянного сплава n=0,80–0,85. Так как n<1, то плосковогнутая линза из металла должна фокусировать потоки нейтрино ультранизких энергий. Таким образом, на скорость бета-распада могут влиять внешние условия, например, изменяющиеся потоки нейтрино ультранизких энергий, которые могут составлять часть скрытой материи. В работах других исследователей [6–8] было также доказано, что скорость бета-распада некоторых радионуклидов подвержена вариациям различной длительности.

В данной работе поставлена цель – исследовать обратный бета-распад радионуклидов ^{90}Y под воздействием космических потоков нейтрино ультранизких энергий. Согласно гипотезе А.Г. Пархомова вокруг центра Галактики, вокруг Солнца и планет существует нейтриносфера из частиц, движущихся со скоростью от нескольких км/с до нескольких сотен км/с. Потоки этих частиц попадают на Землю и могут быть сфокусированы с помощью параболических зеркал, специальных дифракционных решёток, или фокусирующих металлических линз. Астрофизик Н.А. Козырев для фокусировки потоков частиц использовал зеркало телескопа-рефлектора Крымской астрофизической обсерватории [9]. В данной работе для фокусировки использована свинцовая плосковогнутая линза диаметром d = 82 мм и радиусом кривизны вогнутой поверхности R = 62 мм. Если предположить, что показатель преломления потоков нейтрино для свинца n = 0,8, то фокусное расстояние линзы составляет $f = R/(n–1)$ = 310 мм. Бета-источник – ^{90}Sr–^{90}Y был помещён в предполагаемом главном фокусе свинцовой линзы. Главная оптическая ось линзы была направлена в окно на восток под углом 27° к горизонту и, её ориентация не изменялась в течение всего эксперимента. Поток электронов, образующийся при бета-распаде, проходил через несколько алюминиевых пластин толщиной 0,3 мм. Число пластин было выбрано 4 и 5, исходя из того, чтобы через них проходили только самые высокоэнергетические частицы. Они регистриро-

вались с помощью трубки Гейгера СБМ-20, соединённой с компьютером. Длительность измерений составляла 2–3 суток. Этот детектор чувствителен также и на гамма-частицы, которые создают изменяющийся фон. Исследованию особенностей гамма-фона была посвящена работа [10]. Средний поток бета-частиц, регистрируемых детектором, был примерно равен среднему уровню гамма-фона. Если повысить поток регистрируемых электронов путём уменьшения числа пластин, то детектор будет регистрировать не только электроны, возникающие в результате обратного бета-распада, но и те электроны, которые возникли в результате спонтанного бета-распада иттрия.

Компьютер круглосуточно в автоматическом режиме регистрировал сигналы от трубки Гейгера и обрабатывал их, а также производил запись результатов в файл. Длительность одного измерения составляла 30 с. За каждый i-ый промежуток времени определялось количество сигналов, средний промежуток времени между сигналами Δt_i и коэффициент вариации $v_i = \sigma_i/\Delta t_i$, где σ_i – стандартное отклонение промежутков времени от среднего значения за время i-го промежутка времени. Измерения проводились при наличии линзы и без неё. В качестве исследуемых параметров были выбраны: средняя частота сигналов $f_i = 1/\Delta t_i$ и коэффициент вариации v_i. Число таких измерений за время одной серии составляло 5000–7000. Далее каждая серия разделялась на отдельные выборки по 100 измерений. С помощью критерия Роснера в каждой выборке выделялись выбросы по массивам f_i и v_i. Такой критерий успешно использовался для выделения выбросов флуктуаций проводимости различных металлов [11]. Средняя частота сигналов это энергетическая характеристика процесса, коэффициент вариации это его информационная характеристика, которая показывает быстроту изменения процесса. Если внешнего воздействия нет, то средний коэффициент вариации должен быть равен 1. В этих исследованиях необходимо проверить статистику именно положительных выбросов f_i и v_i в каждой выборке. Если обратный бета-распад происходит в течение коротких промежутков времени (гораздо меньше времени измерения 30 с), то это может вызвать положительный скачок коэффициента вариации v_i, а если этот процесс имеет длительность, соизмеримую с временем измерения, то могут наблюдаться скачки f_i.

Критерий Роснера, использованный для выделения скачков [12 с.557], применяется, когда количество выбросов m заранее неизвестно. Алгоритм критерия Роснера состоит в следующем. По начальной выборке $x_1, x_2, \ldots, x_n$ вычисляют $\bar{x}$, σ_x и параметр $\tau_1 = \max\left(\frac{|x_j - \bar{x}|}{\sigma_x}\right)$. Затем из выборки удаляется то значение, которое более других удалено от среднего $\bar{x}$. Так повторяется k раз, пока $\tau_1 < \tau_2 < \ldots < \tau_k > \tau_{k+1}$. После этого, параметры τ_i

(i = 1…k) сравнивают с критическими значениями $\tau^*_{i,k,n}(p)$, где p – доверительная вероятность, которая была выбрана равной 0,95. Необходимо найти максимальное значение $i_{\max}$, которое удовлетворяет условию: $\tau_{i\max} > \tau^*_{i\max,k,n}(p)$, тогда количество выбросов $m = i_{\max}$. Помимо количества положительных выбросов N в каждой серии измерений были определены их величины относительно критических значений: $\xi_i = \tau_i - \tau^*_{i,k,n}(p)$. Эти величины показывают силу выбросов. Кроме того, были введены дополнительные параметры, характеризующие силу выбросов: $\xi_i^{(1)} = \exp(\xi_i) - 1$ и $\xi_i^{(2)} = \exp(\xi_i) - 1 - \xi_i$.

Анализ результатов измерений показал, что по средней частоте f сигналов с трубки Гейгера никаких статистически значимых различий при наличии линзы и при отсутствии её не обнаружено ни при каком количестве алюминиевых пластин. Результаты статистического анализа коэффициентов вариации приведены в таблице. Из этого следует, что некоторые статистически значимые различия в коэффициентах вариации сигналов обнаружены. P – вероятность того, что $\overline{\xi}$ (с линзой) > $\overline{\xi}$ (без линзы) [12 с. 389].

Таблица

Результаты измерений коэффициента вариации v

№	Число пластин	Наличие линзы	$\overline{\xi}$	σ_ξ	N	P	$\overline{\xi}^{(1)}$	$\overline{\xi}^{(2)}$
1	4	нет	0,86	0,96	47	93%	3,29	2,44
		есть	1,26	1,29	34		7,67	6,41
2	5	нет	1,03	1,18	46	86%	5,18	4,14
		есть	1,35	1,22	26		6,83	5,47

Основные выводы:

1) обнаружены признаки обратного бета-распада иттрия;

2) воздействия потоков нейтрино носят, вероятно, кратковременный характер длительностью гораздо меньше 30 с;

3) свинцовая плосковогнутая линза способна фокусировать потоки нейтрино ультранизких энергий. Показатель преломления нейтрино в свинце оказался близким к значению, полученному А.Г. Пархомовым [3], n = 0,8;

4) для увеличения достоверности результатов необходимо проводить измерения длительностью более трёх суток и более точно определить фокусное расстояние линзы.

Библиографический список

1. Гаврин, В.Н. Российско-американский галлиевый эксперимент SAGE / В.Н. Гаврин // УФН. – 2011. – Т. 181, № 9. – С. 975–984.

2. Thomas, S.A. Upper Bound of 0.28 eV on Neutrino Masses from the Largest Photometric Redshift Survey / S.A. Thomas, F.B. Abdalla, O. Lahav // Physical Review Letters. – 2010. – V. 105, № 3. – P. 031301.

3. Пархомов, А.Г. Космос. Земля. Человек. Новые грани науки / А.Г. Пархомов. – М.: Наука, 2009. – 272 с.

4. Пархомов А.Г. Исследование неслучайных вариаций результатов измерения радиоактивности / А.Г. Пархомов // Атлас временных вариаций природных, антропогенных и социальных процессов. – Т. 3.– М.: Янус-К, 2002. – С. 607–612.

5. Parkhomov, A.G. Bursts of Count Rate of Beta-Radioactive Sources during Long-Term Measurements / A.G. Parkhomov // International Journal of Pure and Applied Physics. – 2005. – V. 1, № 2. – Pp. 119–128.

6. Бауров, Ю.А. Экспериментальные исследования изменений в скорости бета-распада радиоактивных элементов / Ю.А. Бауров, Ю.Г. Соболев, В.Ф. Кушнирук и др. // Физическая мысль России. – 2000. – № 1. – С. 1–7.

7. Шноль, С.Э. 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. 1129–1140.

8. Goleminov, N.G. Possible nuclear activity of dark matter / N.G. Goleminov // Gravitation and cosmology. – 2002. – V. 8. – Pp. 2017–2020.

9. Козырев, Н.А. Избранные труды / Н.А. Козырев. – Л.: Издательство Ленинградского университета, 1991. – 448 с.

10. Шульгинов, А.А. Двумерная функция распределения результатов измерений гамма-фона / А.А. Шульгинов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 2. – С. 68–71.

11. Шульгинов, А.А. Фликкер-шумовая спектроскопия флуктуаций проводимости плёнок платины и пермаллоя / А.А. Шульгинов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2009. – Вып. 1. – № 22. – С. 117–119.

12. Кобзарь, А.И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников / А.И. Кобзарь. – М.: Физматлит, 2006. – 816 с.

К содержанию

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

УДК 544.31.031 + 544.322

МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАСЧЕТ СТАНДАРТНОЙ ЭНТАЛЬПИИ ГИДРАТАЦИИ АНИОНОВ ЭЛЕМЕНТОВ IA И IIA ГРУПП

А.Г. Рябухин, О.Н. Груба

В статье представлены математические модели расчета стандартной энтальпии образования простых анионов в газовой фазе и в водном растворе, стандартной энтальпии гидратации анионов. Возможности моделей проиллюстрированы на примерах галид- и халькогенид-ионов. Сделаны прогнозные вычисления термохимических характеристик. Полученные величины СЭО газообразных анионов позволили рассчитать для атомов галогенов корректные значения сродства к электрону, а для атомов халькогенов первые и вторые сродства к электрону.

Ключевые слова: анион, галиды, халькогены, энтальпия образования иона, энтальпия гидратации, радиус «водного» аниона, сродство к электрону.

Периодическую систему обычно принято делить на периоды и группы, состоящие из подгрупп. Более информативным нам представляется деление с учетом электронного строения ионов.

- **Начальные элементы** $Э_{нач}$. Составляют второй период ($Li^+ \ldots F^-$; $1s^2 \ldots 1s^2 2s^2 p^6$), характеризуют группу в общем: щелочные, щелочноземельные, …, халькогены, галогены.
- **Связующие элементы** $Э_{св}$. Третий период ($Na^+ \ldots Cl^-$; $2s^2p^6 \ldots 2s^2p^6 3s^2p^6$) объединяют свойства подгрупп А и В ($S^{6+}\ 2s^2p^6 3s^2p^6$ – $Cr^{6+}\ 2s^2p^6 3s^2p^6$).
- **Полные электронные аналоги** $Э_{пан}$ в подгруппах. Периоды 4–7:

(1A: $K^+ \ldots Fr^+$; $2s^2p^6 3s^2p^6 \ldots 5s^2p^6 6s^2p^6$;

7A: $Br^- \ldots At^-$; $2s^2p^6 3s^2p^6 4s^2p^6 \ldots 4s^2p^6 5s^2p^6 6s^2p^6$).

Такое деление позволяет предположить, что $Э_{св}$ (тем более $Э_{нач}$) не должны образовывать монотонных зависимостей, основанных на свойствах $Э_{пан}$. Это количественно показано в работе [1] на примере расчета СЭО газообразных катионов щелочных металлов.

Стандартная энтальпия образования газообразных анионов

В работе [1] для проведения вычислений было использовано модифицированное уравнение расчета энтальпии кристаллической решетки. Сущность модификации заключается в замене в расчетном уравнении межструктурного расстояния в кристалле на радиус иона:

$$\Delta_f H^\circ = \Delta H_0 + \Delta H_{вз} = 83{,}581728 \cdot z^2 \cdot f_1 - 103{,}19053 \cdot A_M \cdot кч \cdot z \cdot f_2 \cdot \left(r^\circ\right)^{-1}. \quad (1)$$

Для галид-ионов внешней структуре иона s^2p^6 соответствует кч = 6 и A_M = 1,747565 (NaCl), z = 1; $f_1 = f_{\text{ОЦК}} \cdot f_{\text{ГЦК}} = 2\left(\sqrt{3}-1\right)\frac{1}{2} = 0{,}7320508$, $f_2 = f_{\text{ОЦК}} \cdot f_{\text{ГЦК}} = \frac{1}{3}\sqrt{2} = 0{,}4714045$.

$$\Delta_f H^\circ\left(\Gamma^-, \text{г}\right) = 61{,}186 - 510{,}0564 \cdot \left(r^\circ\left(\Gamma^-\right)\right)^{-1}. \qquad (2)$$

Исходные данные и результаты вычислений приведены в таблице 1.

Таблица 1

Энтальпия образования газообразных галид-ионов

	Γ^-	$r^\circ\left(\Gamma^-\right)$, [2]	$-\Delta_f H^\circ\left(\Gamma^-, \text{г}\right)$, 3, 4]	$-\Delta H_{\text{вз}}$, ур. (2)	$-\Delta_f H^\circ\left(\Gamma^-, \text{г}\right)$, ур. (2)
	1	2	3	4	5
1	Cl^-	1,69182	233,670±0,155	301,484	240,298
2	Br^-	1,81898	219,037±0,199	280,408	219,222
3	I^-	1,98995	195,035±0,176	256,316	195,130
4	At^-	2,05844	187,00±2,51	247,788	(186,602)

Сравнение справочных и расчетных величин показывает хорошее согласие для ионов элементов полных электронных аналогов ($Br^- \ldots At^-$).

В случае полных электронных аналогов анионов халькогенов (z = 2):

$$f_1 = f_{\text{ГЦК}} \cdot f_{\text{ОЦК}} = 2\left(1+\frac{3}{2}\right)^{-1} 3\sqrt{3} = 4{,}156922,$$

$$f_2 = f_{\text{ГЦК}} \cdot f_{\text{ОЦК}} = 2\left(1+\frac{3}{2}\right)\cdot\frac{3}{8}\left(1+\frac{1}{9}\right)^{-1} = 1{,}68750.$$

Тогда окончательно ур. (1) примет вид:

$$\Delta_f H^\circ\left(\text{Хг}^{2-}, \text{г}\right) = -1389{,}7711 + 3651{,}7262\left(r^\circ\right)^{-1}. \qquad (3)$$

Исходные данные и результаты расчетов приведены в таблице 2. Из сравнения величин в колонках 3 и 5 следует хорошее согласие для ионов полных электронных аналогов (Se^{2-}, Te^{2-} и Po^{2-}). Для иона связующего элемента (S^{2-}) расчетные и справочные данные не согласуются, расхождение составляет 41,1. Для иона начального элемента (O^{2-}) расхождение между рассчитанной и экспериментальной величинами составило 188,3 ($\Delta_f H^\circ\left(O^{2-}, \text{г}\right) = 1069{,}218$ [2]).

Стандартная энтальпя образования анионов в водном растворе

В 1923 г. индийский ученый Вазашерна из рефрактометрических измерений растворов солей щелочных и щелочноземельных металлов вычислил радиусы ионов. В 1926 г. Гольдшмидт использовал эти «водные» радиусы как кристаллические и составил первую систему ионных радиусов. Его многочисленные последователи использовали в качестве достоверно известного радиус O^{2-} от 1,32 до 1,46. В результате в разных системах приводятся разные радиусы анионов.

Таблица 2

Энтальпия образования газообразных анионов халькогенов

	$Хг^{2-}$	$r^{\circ}(Хг^{2-})$, [2]	$\Delta_f H^{\circ}(Хг^{2-},г)$, [2]	$\Delta H_{вз}$, ур. (3)	$\Delta_f H^{\circ}(Хг^{2-},г)$, ур. (3)
	1	2	3	4	5
1	S^{2-}	1,78064	619,315±0,167	2050,187	660,416
2	Se^{2-}	1,89371	537,935±0,430	1927,774	538,003
3	Te^{2-}	2,06104	381,555±0,667	1771,263	381,492
4	Po^{2-}	2,13724	318,174±0,753	1708,111	318,340

Любые частицы, имеющие заряд, взаимодействуют с полярными молекулами воды. В электромагнитном поле аниона они ориентируются положительным концом диполя, т.е. выступают в роли катиона с радиусом r_K = 1,383 [2]. Поэтому водные радиусы $r_в$ можно вычислить по уравнению модели эффективных ионных радиусов, используя свойства воды:

$$r_A = \frac{r_K \cdot r_D \cdot r_A^{\circ}}{r_K \cdot r_D - \left(r_A^{\circ}\right)^2}. \qquad (4)$$

Простые анионы имеют внешнее электронное строение s^2p^6, формирующее вокруг себя октаэдрическое окружение, которому соответствует дебаевский радиус $r_D = r_D^{\circ}(NaCl)\cdot\left(1+\sqrt{z^2-1}\right)\cdot f_D$.

Для галид-ионов $r_D = 31{,}45393$, $r_D^{\circ}(\mathrm{NaCl}) = 18{,}159935$; $f_D = \sqrt{3}$.

Водные радиусы, рассчитанные по уравнению (4), галид-ионов приведены в таблице 3, ионов халькогенов – в таблице 4.

В модели гидратации катионов [2] показано, что в любых растворах, для которых принимается $\Delta_f H^{\circ}(\mathrm{H}^+, \text{р-р}) = 0$, необходимо знать его действительное значение. Там же вычислено $\Delta_f H^{\circ}(\mathrm{H}^+, \text{р-р}) = 406{,}025 \pm 0{,}008$, тогда уравнение для расчета энтальпии образования одно- и двухзарядных анионов в водном растворе примет вид:

$$\Delta_f H^{\circ}\left(\mathrm{A}^{z-}, \text{р-р}\right) = 406{,}025 \cdot z + \Delta H_0 + \Delta H_{вз} \text{ или}$$

$$\Delta_f H^{\circ}\left(\mathrm{A}^{z-}, \text{р-р}\right) = 406{,}025 \cdot z +$$

$$+ 83{,}581728 \cdot z^2 \cdot f_1 - 103{,}19053 \cdot A_M \cdot \text{кч} \cdot z \cdot f_2 \cdot r_в^{-1}. \qquad (5)$$

Для ионов галогенов с учетом $f_1 = f_{\text{ГЦК}} \cdot f_{\text{ОЦК}} = \frac{3\sqrt{2}}{4}\left(1+\frac{1}{4}\right) = 1{,}325825;$

$$f_2 = f_{\text{ОЦК}} \cdot f_{\text{ГЦК}} = 4\left(\frac{3\sqrt{3}}{4}-1\right)\cdot\left[\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{3\sqrt{2}}{4}+1\right)\right]^{-1} = 1{,}160941$$

$$\Delta_f H^\circ\left(\Gamma^-, \text{р-р}\right) = = 516{,}840 - 1256{,}130 \cdot r_{\text{в}}^{-1}. \qquad (6)$$

Результаты расчетов по ур. (6) помещены в табл. 3.

Таблица 3

Энтальпия образования галид-ионов в водном растворе

	Γ^-	$r_{\text{в}}$, ур. (4)	$-\Delta_f H^\circ\left(\Gamma^-, \text{р-р}\right)$, [5]	$-\Delta H_{\text{вз}}$, ур. (6)	$-\Delta_f H^\circ\left(\Gamma^-, \text{р-р}\right)$, ур. (6)
	1	2	3	4	5
1	Cl^-	1,81098	167,080±0,088	693,619	176,779
2	Br^-	1,96822	121,50±0,15	638,206	121,366
3	I^-	2,18924	56,90±0,10	573,775	56,935
4	At^-	2,28058	отс.	550,794	33,954

Сравнение величин в колонках 3 и 5 показывает, что данные для полных электронных аналогов хорошо согласуются, для иона связующего элемента наблюдается отсутствие согласия величин (Δ = +9,699). Хорошее согласие данных для Br^- и I^- позволило сделать предсказательное вычисление $\Delta_f H^\circ\left(At^-, \text{р-р}\right) = -33{,}954$.

Для ионов халькогенов $f_1 = f_{\text{ОЦК}} \cdot f_{\text{ГЦК}} = \left(\frac{8}{3\sqrt{3}}-1\right)\frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} = 0{,}587443;$

$f_2 = f_{\text{ОЦК}} \cdot f_{\text{ГЦК}} = \frac{8}{3\sqrt{3}}\cdot\left[1+\left(\frac{\sqrt{2}}{3}\right)^2\right]^{-1} = 0{,}441492$. Тогда ур. (5):

$$\Delta_f H^\circ\left(\text{Хг}^{2-}, \text{р-р}\right) = 615{,}652 - 955{,}3825 \cdot r_{\text{в}}^{-1}. \qquad (7)$$

Исходные данные и результаты вычислений помещены в табл. 4. Сравнение данных строк 2 и 3 (Se^{2-} и Te^{2-}) демонстрирует их хорошее согласие, что подтверждает адекватность модели и позволяет произвести предсказательный расчет для СЭО иона полония в водном растворе $\Delta_f H^\circ\left(Po^{2-}, \text{р-р}\right)$. У аниона связующего элемента (S^{2-}) согласия не наблюдается, как и в случае с расчетами $\Delta_f H^\circ\left(\text{Хг}^{2-}, \text{г}\right)$. Здесь расхождение расчетных и справочных данных составило 57,0.

Таблица 4

Энтальпия образования анионов халькогенов в водном растворе

	$Хг^{2-}$	$r_в$, ур. (4)	$\Delta_f H^\circ(Хг^{2-}, р\text{-}р)$, [6]	$-\Delta H_{вз}$, ур. (7)	$\Delta_f H^\circ(Хг^{2-}, р\text{-}р)$, ур. (7)
	1	2	3	4	5
1	S^{2-}	1,82945	36,40±1,26	522,223	93,428
2	Se^{2-}	1,95263	126,575±2,092	489,280	126,372
3	Te^{2-}	2,13744	168,91±2,092	446,975	168,677
4	Po^{2-}	2,22267	отс.	429,835	185,817

Стандартная энтальпия гидратации анионов

По определению энтальпия гидратации простого аниона:

$$\Delta_г H(A^{z-}) = \Delta_f H^\circ(A^{z-}, р\text{-}р) - \Delta_f H^\circ(A^{z-}, г). \quad (8)$$

К сожалению, в справочной литературе имеется мало данных по $\Delta_f H^\circ(A^{z-}, р\text{-}р)$ и полное отсутствие по $\Delta_f H^\circ(A^{z-}, г)$ при $z > 1$.

Уравнение для расчета энтальпии гидратации простых анионов по форме такое же, как для расчета СЭО простых анионов в водном растворе (ур. (5)), отличаясь только структурными коэффициентами:

$$\Delta_г H^\circ(\Gamma^-) = 500{,}054 - 792{,}0738 \cdot r_в^{-1}. \quad (9)$$

$$f_1 = f_{ОЦК} \cdot f_{ГЦК} = \left(\frac{3}{2}\right)^2 \cdot \frac{1}{2} = 1{,}125; \; f_2 = f_{ОЦК} \cdot f_{ГЦК} = 2\left(\sqrt{3} - 1\right)\frac{1}{2} = 0{,}7320508.$$

Результаты вычислений и исходные данные приведены в таблице 5.

Таблица 5

Энтальпия гидратации галид-ионов

	Γ^-,	$-\Delta_f H^\circ(\Gamma^-, р\text{-}р)$, [5]	$-\Delta_f H^\circ(\Gamma^-, г)$, [3, 4]	$\Delta_г H^\circ(\Gamma^-)$, ур. (8)	$\Delta_г H^\circ(\Gamma^-)$, ур. (9)
	1	2	3	4	5
1	Cl^-	167,080±0,088	233,670±0,155	66,590±0,243	62,681
2	Br^-	121,50±0,15	219,037±0,199	97,537±0,349	97,623
3	I^-	56,90±0,10	195,035±0,176	138,135±0,276	138,251
4	At^-	(33,954)	187,00±2,510	153,046±2,510	152,742

Из сравнения величин в колонках 4 и 5 следует, что для ионов элементов полных аналогов наблюдается хорошее согласие.

Уравнение расчета энтальпии гидратации анионов халькогенов:

$$\Delta_г H(Хг^{2-}) = 1879{,}167 - 4472{,}3772 \cdot r_в^{-1}. \quad (10)$$

$$f_1 = f_{\text{ОЦК}} \cdot f_{\text{ГЦК}} = 3\left(1+\frac{1}{9}\right)\left[\frac{1}{2}\left(1+\frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}}\right)\right]^{-1} = 3{,}191836;$$

$$f_2 = f_{\text{ОЦК}} \cdot f_{\text{ГЦК}} = \left(\frac{3}{2}\right)^2\left[\frac{1}{2}\left(1+\frac{4\sqrt{2}}{3\sqrt{3}}\right)\right]^{-1} = 2{,}066757.$$

Исходные данные и результаты вычислений по ур. (8) и (10) приведены в таблице 6.

Таблица 6

Энтальпия гидратации анионов халькогенов

	$Хг^{2-}$	$\Delta_f H^\circ(Хг^{2-}, г)$ (табл. 2)	$\Delta_f H^\circ(Хг^{2-}, р\text{-}р)$ (табл. 4)	$-\Delta_г H^\circ(Хг^{2-})$ ур. (8)	$-\Delta_г H^\circ(Хг^{2-})$ ур. (10)
	1	2	3	4	5
1	S^{2-}	619,315±0,167	93,428±1,26	525,887±1,427	565,888
2	Se^{2-}	537,935±0,430	126,372±0,430	411,631±2,522	411,272
3	Te^{2-}	381,555±0,667	168,677±0,667	212,815±2,751	213,230
4	Po^{2-}	318,174±0,753	185,817±0,753	132,523	132,995

Из сравнения величин в колонках 4 и 5 следует хорошее согласие у элементов полных электронных аналогов. Согласие результатов расчетов энтальпии гидратации для иона полония (Po^{2-}) со справочным значением носит принципиальный характер, так как в вычислениях $\Delta_г H^\circ(Po^{2-})$ была использована прогнозная величина $\Delta_f H^\circ(Po^{2-}, р\text{-}р)$ (табл. 4).

Сродство к электрону

Важнейшими характеристиками атомов являются потенциалы ионизации и сродство к электрону. Технология определения потенциалов ионизации хорошо отработана, чего нельзя сказать об определении сродства к электрону. Присоединение к атомам электрона с образованием устойчивого однозарядного аниона наблюдается у галогенов. Присоединение второго электрона с образованием двухзарядного аниона неизвестно, так как пока отсутствует метод измерения энтальпии присоединения второго электрона. Из расчетных методов наиболее важным является использование теоретического уравнения:

$$\Delta_f H^\circ(Хг^{2-}, г) = \Delta_f H^\circ(Хг^{0}, г) - F\sum A - z \cdot 6{,}1965. \qquad (11)$$

Здесь F – постоянная Фарадея, 96485,56 Кл·моль$^{-1}$; 6,1965 – энтальпия 1 моль электронов. Так как энтальпия образования практически для всех элементов известна из анализа температурной зависимости давления пара [4], то расчет сродства к электрону определяется только величиной энтальпии образования аниона.

Исходные данные и результаты расчетов по ур. (11) для анионов галогенов приведены в таблице 7.

Таблица 7

Сродство атомов галогенов к электрону

	Г	$\Delta_f H^\circ(\text{Г,г})$, [4]	$-\Delta_f H^\circ(\text{Г}^-,\text{г})$, (табл. 1)	A, эВ, ур. (11)	A, эВ [4]
	1	2	3	4	5
1	Cl	121,290±0,008	233,670±0,155	3,61470±0,00169	3,614±0,0001
2	Br	111,838±0,126	219,037±0,199	3,36508±0,00337	3,37
3	I	106,763±0,042	195,035±0,176	3,06371±0,00226	3,0±0,12
4	At	98,847±0,209	187,00±2,510	2,89839±0,02818	(2,8±0,2)

Сравнение величин в колонках 4 и 5 показывает их хорошее согласие, тем более что для брома это сопоставление различных данных, а для астата – полуэмпирический расчет.

Значения $\Delta_f H^\circ(\text{Хг}^{2-},\text{г})$, полученные из энтальпий кристаллических решеток [2] (табл. 2), позволяют впервые рассчитать $\sum A$ и A_2. Исходные данные и результаты расчетов по ур. (11) приведены в таблице 8.

Таблица 8

Сродство атомов халькогенов к электрону

	Хг	$\Delta_f H^\circ(\text{Хг}^0,\text{г})$, [4]	$\Delta_f H^\circ(\text{Хг}^{2-},\text{г})$, (табл. 2)	$\sum A$, эВ, ур. (11)	A_1, эВ [4]	A_2, эВ
	1	2	3	4	5	6
1	S	276,980±1,046	619,315±0,167	3,61470± ±0,00169	2,0772± ±0,0005	1,4709± ±0,0194
2	Se	227,610±2,092	537,935±0,430	3,36508± ±0,00337	2,0201± ±0,0003	1,1962± ±0,0307
3	Te	168,615±1,255	381,555±0,667	3,06371± ±0,00226	(1,5213)	(0,6857)
4	Po	144,346±2,092	318,174±0,753	2,89839± ±0,02818	1,32	0,4816± ±0,0217

В колонке 4 помещены впервые полученные суммы величин сродства электронов к атомам халькогенов. К сожалению, для теллура экспериментальные данные о величине первого сродства электрона отсутствуют. Однако такие сведения имеются для селена и полония. Примем, что зависимость первого сродства электрона является линейной от обратного радиуса (аналогично СЭО):

$$A_1(\text{Te}) = a + \frac{\Delta A_1}{\Delta\left(r^\circ\right)^{-1}}\left(r^\circ_{\text{Te}}\right)^{-1} = -4{,}1240 + 11{,}36517\left(r^\circ_{\text{Te}}\right)^{-1}.$$

r°_{Te} = 2,06104; $A_1(\mathrm{Te})$ = 1,5213. Эта величина существенно отличается от примерной оценки [4]. Величина второго сродства к электрону для теллура $A_2(\mathrm{Te})$, определенная по разности $\sum A - A_1$ составила 0,6857.

Заключение

Установлено, что стандартная энтальпия образования простого аниона в газовой фазе и водном растворе, а также стандартная энтальпия гидратации аниона могут быть найдены по уравнениям модели расчета стандартной энтальпии образования (разрушения) кристаллической решетки. Как и в базовой модели, термохимические характеристики (энтальпия образования иона, энтальпия гидратации) являются функциями структуры, а именно – радиуса иона и структурных коэффициентов. Результаты расчетов по уравнениям моделей продемонстрированы на примерах галид- и халькогенид-ионов. Для ионов полных электронных аналогов – элементов, расположенных в 4–7 периодах Периодической системы, наблюдается практически абсолютное совпадение рассчитанных величин с известными справочными данными, что позволило предсказать термохимические характеристики для астатид-иона и иона полония. Показано, что использование модифицированного уравнения модели для расчета энтальпии образования газообразных анионов позволяет вычислить корректные величины сродства к электрону.

Библиографический список

1. 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.

2. Рябухин, А.Г. Эффективные ионные радиусы. Энтальпия кристаллической решетки. Энтальпия гидратации ионов: монография / А.Г. Рябухин. − Челябинск: Изд. ЮУрГУ, 2000. − 115 с.

3. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4 т. / под ред. В.П. Глушко. – М.:АН СССР, ВИНИТИ. − Т. I, кн. 2 − 1978. − 326 с.

4. Энергия разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Спр. изд. / Под ред. В.Н. Кондратьева. − М.: Наука, 1974. − 351 с.

5. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочное издание в 4 т. / под ред. В.П. Глушко. – М.:АН СССР, ВИНИТИ. − Т. III, кн. 2 − 1981. − 423 с.

6. Латимер, В.М. Окислительные состояния элементов и их потенциалы в водных растворах. Пер. с англ. / Под ред. проф. К.В. Астахова. − М.: Изд. иностр. лит., 1954. − 400 с.

К содержанию

УДК 624.74.01

СИНЕРГЕТИКА ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И ПРОЧНОСТИ СИНТЕТИЧЕСКИХ ПЕСЧАНО-ГЛИНИСТЫХ СМЕСЕЙ

В.А. Смолко, Е.Г. Антошкина

В статье рассмотрены физико-химические процессы, протекающие при формировании структуры и прочности синтетических песчано-глинистых смесей с позиции термодинамики неравновесных процессов. Получена система феноменологиских уравнений структурообразования синтетических песчано-глинистых смесей, устанавливающих линейные соотношения между термодинамическими потоками и силами.

Ключевые слова: синергетика, термодинамика неравновесных процессов, синтетические песчано-глинистые смеси

Синергетический подход к формированию структуры и прочностных характеристик смесей приводит к необходимости рассмотрения макроскопических состояний системы, в которой протекают параллельно-последовательные физико-химические процессы с позиции термодинамики необратимых процессов (ТНП), т.к. синтетические смеси относятся к диссипативным системам [1].

Структурные превращения смеси на любой стадии технологического процесса можно рассматривать как переход системы из одного состояния в другое, обусловленное действием термодинамических движущих сил всех процессов, происходящих в системе. В этом случае приращение энтропии системы будет представлять сумму $dS = d_eS + d_iS$, где d_eS – изменение энтропии, вызванное обменом с окружающей средой; d_iS – изменение энтропии внутри системы обусловленное необходимыми процессами (химическими реакциями, диффузией, и т.д.), имеющими место в смеси. При этом в ней возможно возникновение и существование структур, часть из которых может оказаться устойчивой в данных условиях. Исходя из этого, с позиции ТНП, рассмотрено изменение энтропии полиморфных превращений кварца синтетических песчаных смесей. Количественный расчет d_iS в условиях быстрого реального нагрева смеси после заливки металлом формы и последующего охлаждения весьма затруднен, так как требует детальной информации по температурному режиму нагрева и охлаждения смеси, а также по кинетике всех процессов полиморфных превращений в политермических условиях (нагрев – охлаждение). Проведен расчет ΔS_i (Дж/моль · К) для нескольких различных вариантов протекания процесса. Оценка величины изменения энтропии (ΔS_i) при энантиотропных превращениях кварца показала, что она соизмерима с величиной изменения энтропии ΔS_e из окружающей среды, которая для 1 моль SiO_2 равна

$\Delta S_e = 1{,}49 \cdot \alpha_2$, где α_2 – степень превращения α-кварца в α-тридимит. Поэтому следует учитывать величину ΔS_i при оценке изменений термодинамических параметров смеси при её нагревании и охлаждении.

На основе термодинамики неравновесных процессов, с учетом протекающих химических и структурных превращений получена система феноменологических уравнений, устанавливающих линейные соотношения между термодинамическими потоками (скоростями) и силами (сродствами):

$$I_\xi = L_{\xi\xi} \cdot X_\xi + L_{\xi\eta} \cdot X_\eta$$

$$I_\eta = L_{\eta\xi} \cdot X_\xi + L_{\eta\eta} \cdot X_\eta,$$

где $I_\xi = \frac{1}{\nu_\xi} \cdot \frac{d_{n\xi}}{d_\tau}$ – скорость химической реакции (ОВР, поликонденсации связующего и т.п.), записанная в форме соответствующей методу Де Донде;

$I_\eta = \frac{1}{\nu_\eta} \cdot \frac{d\Omega}{d_\tau}$ – скорость структурообразования;

$X_\xi = \frac{A_\xi}{T}$ – термодинамическая движущая сила структурообразования (структурное сродство);

$L_{\xi\xi}$ и $L_{\eta\eta}$ – феноменологические коэффициенты, определяющие соответственно химическую и структурную составляющие системы;

$L_{\xi\eta}$ и $L_{\eta\xi}$ – феноменологические коэффициенты, определяющие перекрестные эффекты взаимодействия соответственно химических и структурных процессов [2].

Уравнения, определяющие параметры X_ξ и X_η позволяют оценить эффекты химических и структурных превращений при условии, что выполняется принцип взаимности Онзагера-Казимира (принцип макроскопической совместимости), согласно которому матрица коэффициентов симметрична, то есть $L_{\xi\eta} = L_{\eta\xi}$ [3].

Наличие диффузионных потоков интенсивности, самоорганизация и структурирование в ПГС были верифицированы экспериментально измерением электрической ёмкости, как интегральной характеристики, с помощью автоматического моста переменного тока Р 5079 стандартных образцов смеси диаметром и высотой 50 мм, при их эволюции в открытом и замкнутом пространстве во времени с момента их формирования уплотнением на копре. Электрическая ёмкость $C = \frac{\varepsilon S}{4\pi d}$, где C – электрическая ёмкость, S – диэлектрическая проницаемость, d – расстояние между обкладками конденсатора. Диэлектрическая проницаемость ε воды, в зависимости от толщины пленки, изменяется в широких пределах, так по данным [2] ε_{H_2O} для пленки толщиной 0,5 мкм она равна 16, а для 0,19 мкм соответственно 5, при этом изменяется теплопроводность и плотность воды в несколько раз.

В случае, когда смесь находилась в открытом пространстве, происходило резкое уменьшение емкости с 72–74 nF до 24–36 pF, то есть на три порядка в течение 42 часов, это вызвано прежде всего наличием потока интенсивности – стока влаги, ее испарением, как с поверхности, так и влаги из внутренних областей образца. Наличие данного потока превалирует над другими потоками, в частности диффузионными, что и изменяет диэлектрическую проницаемость смеси.

В процессе структурообразования и самоорганизации в замкнутом пространстве, величина *C* за этот же период уменьшается с 60–61 nF до 40–42 nF всего на 66–68 %, при этом наблюдаются автоколебательные диффузионные, флуктационные процессы синусоидальной формы, в начале колебания протекают с малой амплитудой в течение 110–120 мин, далее наблюдаются автоколебания с большей частотой и периодами колебаний 20 мин, которые продолжаются в течение 140–150 мин, а дальше они замедляются и по истечению 4–4,5 часов прекращаются, и процесс экспоненциально затухает.

Самоорганизация смеси сопровождается процессами перераспределения влаги, взаимодействием поверхностных слоев на зернах песка, набуханием глинистой составляющей, пептизацией, диспергированием и другими процессами. Необходимо отметить, что автоколебания химико-структурных превращений смесей в замкнутом пространстве связаны также с процессами структурообразования – деструкции, протекающими при самоорганизации смесей [4].

Следовательно, формирование структуры смесей по самой своей природе является альтернативным процессом типа «структурообразование – деструкция», в котором локальные разрушения системы «каталитически» инициируют развитие ее макроскопической плотности, когда любой акт деструкции локально увеличивает энергию данного объема системы, но затем она начинает убывать, а прочность в этом объеме соответственно возрастает. Такой процесс по своей сущности адекватен автокаталитическим реакциям Белоусова-Жаботинского, являющихся примером пространственно-временной диссипативной структуры.

Исследования величины электрической емкости, а также эксперименты по определению величины вызванной поляризации (ВП), которая заключается в возникновении остаточных потенциалов при пропускании электрического тока через синтетические смеси, позволили выявить внутренние самоорганизующиеся процессы и изменение энтропии $d_i S$, обусловленное внутренними превращениями (полиморфными, диффузией, химическими, структурированием и т.д.). Полученные феноменологические уравнения структурирования с использованием ТНП и экспериментальные данные указывают, что синтетические смеси – это полиминеральные, дисперсные, гетерогенные, термодинамически неравновесные синергетические самоорганизующиеся системы, обладающие многофункциональностью физико-химических и технологических свойств.

В процессе формообразования (стержня или формы) в смесях под действием внешних воздействий (уплотнения) любой природы имеет место возникновение временны´х и пространственных структур (вынужденная организация). После выемки модели или стержня из оснастки происходит самоорганизация смеси, вызванная формированием пространственно-временных структур за счет возникновения флуктуаций, новых межмолекулярных и химических связей и разрывом старых, диффузией, гидратацией, диспергированием, образованием кластеров, блобов и т.д. Эти две стадии эволюции смеси в дальнейшем и определяют служебные свойства форм и стержней, как конструкций для заливки металлом, обеспечивающих получение качественных отливок.

Библиографический список

1. Штакельберг, Д.И. Термодинамика структурообразования водно-силикатных дисперсных материалов / Д.И. Штакельберг. – Рига: Зинатне, 1984. – 200 с.

2. Штакельберг, Д.И. Самоорганизация в дисперсных системах / Д.И. Штакельберг, М.М. Сычев. – Рига: Зинатне, 1990. – 175 с.

3. Хакен, Г. Информация и самоорганизация: макроскопический подход к сложным системам / Г. Хакен. – М.: Мир, 1991. – 240 с.

4. Антошкина Е.Г. Процессы формирования прочности песчаных формовочных и стержневых смесей / Е.Г. Антошкина, В.А. Смолко // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Металлургия». – 2012. – Вып. 18. – № 15 (274). – С. 6–9.

К содержанию

УДК 544.228

СПЕКТРАЛЬНАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ ПОЛИЙОДИДОВ АЛКИЛАММОНИЕВОГО И УРОТРОПИНИЕВОГО РЯДА ПО ДАННЫМ РАМАН-СПЕКТРОСКОПИИ

И.Д. Юшина, Б.В. Рудаков, Е.В. Барташевич

Исследована возможность использования Раман-спектроскопии для изучения органических йодидов с полийодид-анионом варьирующегося состава. Исследованы различия в спектральных характеристиках, получаемых с различных участков поверхности синтезированных полийодидов алкиламмониевого и уротропиниевого ряда. Произведено сравнение данных, получаемых для визуально отличающихся под микроскопом кристаллов.

Ключевые слова: полийодиды, Раман-спектроскопия.

Спектральные методы активно используются в изучении свойств галогенсодержащих органических соединений и особенностей межмолекулярных взаимодействий с их участием. На первое место претендует Раман-спектроскопия, как наиболее информативный метод, пригодный для изучения связей I–I. Это связано с тем, что полоса колебания связей I–I в инфракрасном спектре находится в низкочастотной области, где ее исследование часто затруднено. Дополнительным препятствием может быть правило отбора по симметрии, из-за которого многие колебания с участием йода неактивны в ИК-спектрах [1]. Раман-спектроскопия дает возможность идентификации основных йодных субъединиц в составе полийодид-анионов: трийодид, пентайодид, связанный молекулярный йод. Метод также имеет ряд преимуществ, таких как возможность снятия спектров во всех агрегатных состояниях без разрушения образца, подбор параметров съемки в широких пределах, с варьированием мощности лазера, длины волны падающего света, участок снятия спектра для образцов с неоднородным составом или поверхностью с возможностью визуального контроля происходящих с образцом изменений [2].

Для корректной расшифровки экспериментальных спектров полийодидов органических соединений следует рассматривать спектральные диапазоны и особенности полос, характерные для основных йодных субъединиц, входящих в состав полийодидов. Опорной полосой при исследовании связей I–I служит полоса молекулярного йода в различных агрегатных состояниях. Для йода в газообразном состоянии характерно волновое число 213 см$^{-1}$, для расплавленного и кристаллического состояния 194 см$^{-1}$ и 180 см$^{-1}$ соответственно [1]. При комплексообразовании с донором электронной плотности эта полоса сдвигается в сторону меньших волновых чисел, что является следствием размещения электронной плотности донора на антисвязывающей орбитали йода. Отметим, что характеристический диапазон волновых чисел для полосы связанного йода составляет 140–180 см$^{-1}$ [3].

Симметричный трийодид-анион имеет одну Раман-активную полосу – симметричное валентное колебание υ_1 и две ИК-активных полосы – дважды вырожденное деформационное υ_2 и асиммметрическое валентное υ_3. При понижении симметрии все полосы становятся ИК- и Раман-активными. Диапазоны, характерные для этих колебаний: деформационное 50–70 см$^{-1}$, валентное симметричное 100–120 см$^{-1}$, валентное асимметричное 130–140 см$^{-1}$[3].

Известна закономерность, согласно которой ряд органических катионов обладает склонностью к образованию кристаллических полийодидов с анионом варьирующегося состава [4, 5]. Такие кристаллические структуры широко представлены в кристаллической базе данных CSD [6]. Среди катионов, способных к такой кристаллизации обнаруживаются производные тетраалкиламмониевого, алкилуротропинового ряда, в работе [7] проанализировано, насколько часто встречаются производные N,S-содержащих ароматических гетероциклов.

Спецификой синтеза многих органических полийодидов является их выпадение из осадка в виде поликристаллических смесей визуально разнородного состава. Анализ брутто-содержания йода в таких порошках затруднен, а возникающая необходимость переводить соединение в раствор приводит к разрушению высших структур полийодидов, существующих в кристаллическом состоянии, но нестабильных в растворе. В связи с этим разработка методик неразрушающего твердофазного установления спектральной однородности образцов является актуальной задачей. Цель настоящего исследования – оценка применимости метода Раман-спектроскопии для обнаружения полийодидов варьирующегося состава в поликристаллических смесях без их разделения и в условиях невозможности привлечения методов рентгеноструктурного анализа.

Соединения полийодидов алкиламмониевого ряда были получены взаимодействием соответствующих тетраалкиламмониевых монойодидов и йода в соотношении 1:2 в этиловом спирте. Объектами исследования выступили визуально разнородные мелкокристаллические смеси полийодидов тетрабутиламмония (**1**), тетраэтиламмония (**2**) и сростки кристаллов этилуротропиния полийодида (**3**). Кристаллы для РСА выращивались при медленном испарении растворителя из насыщенных растворов или при охлаждении.

Методом РСА была уточнена кристаллическая структура для двух трийодидов тетраэтил- и тетрабутиламмония. Полученные соединения явились аналогами соединений тетраэтил- (TETAMI01) и тетрабутиламмония трийодида (NBAMTI14), опубликованных в CSD [8, 9]. Кристаллическая ячейка и внешний вид поверхности этих кристаллов под микроскопом представлены на рисунках 1, 2.

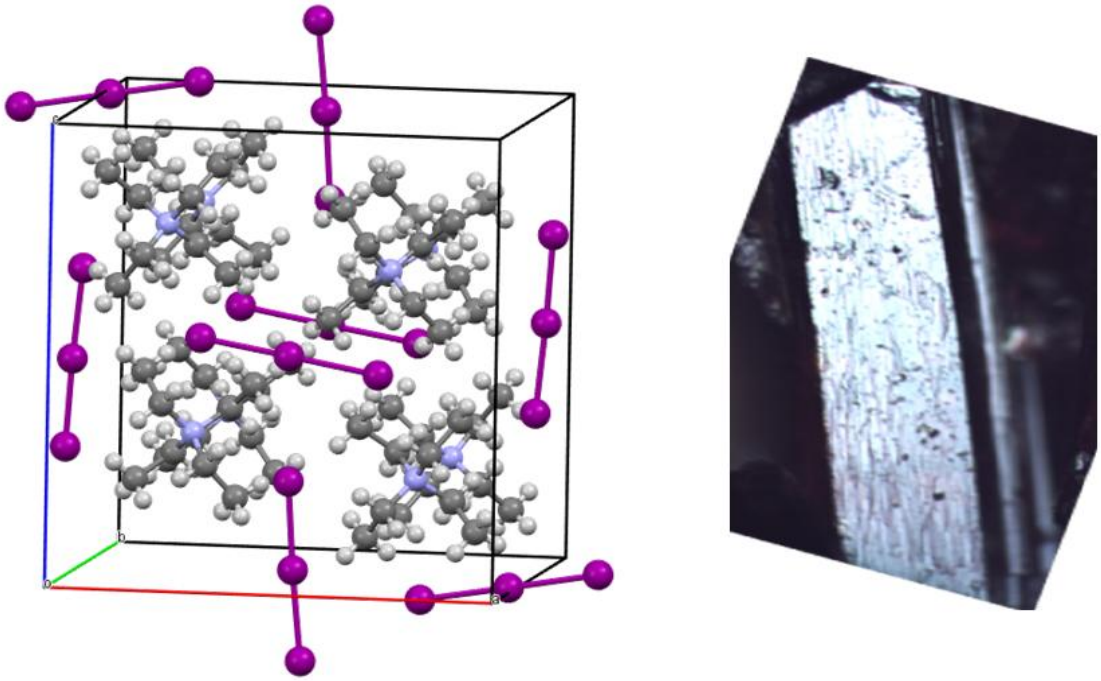


Рис. 1. Кристаллическая ячейка и внешний вид кристалла тетраэтиламмония трийодида

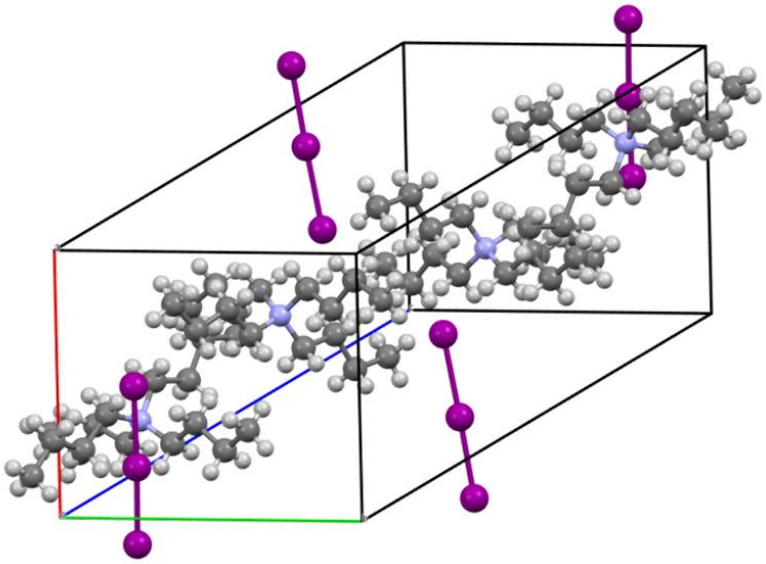


Рис. 2. Кристаллическая упаковка тетрабутиламмония трийодида

Кристаллическая упаковка $(C_2H_5)_4NI_3$ (рис. 1) состоит из отдельного слоя из двух симметрически неэквивалентных трийодидов, расположенных под углом 80° на существенных расстояниях друг от друга > 4.00 Å. В структуре $(C_4H_9)_4NI_3$ (рис. 2) трийодид-анионы максимально изолированы от других йодных фрагментов и образуют цепи в шахтах из катионов. Соседние шахты неэквивалентны. Расстояния в цепи I_3^-… I_3^- составляют 3.98 и 3.79 Å.

Спектры комбинационного рассеяния регистрировались на спектрометре Triplemate, SPEX, USA, оборудованном многоканальным CCD-детектором LN-1340PB, Princeton Instruments, охлаждаемым жидким азотом. Спектры возбуждались линией 633 нм He-Ne^+-лазера мощностью около 5 мВт и меньше на поверхности образца. Образец помещался в фокальной плоскости объектива микроскопа, в котором объектив LD-EPIPLAN, 40/0.60 Pol., Zeiss с рабочим расстоянием 2 мм и апертурой 0.6 служил для фокусировки лазерного пучка и сбора рассеянного излучения Диаметр пятна лазерного света на поверхности образца 2 мкм. Геометрия рассеяния – 180°. Разрешение спектрометра устанавливалось в 5 $см^{-1}$.

Метод Раман-спектроскопии может использоваться для установления спектральной однородности образца в случае, если они представляют собой визуально разнородные поликристаллические смеси или имеют под микроскопом отличающиеся участки поверхности кристалла. Проиллюстрировать различные спектральные свойства неоднородного образца можно на примере полученных кристаллов тетрабутиламмония полийодида. Обнаружено, что в смеси мелких кристаллов (**1**) трийодида тетрабутиламмония (рис. 3, *а* красная кривая), полученных до перекристаллизации, присутствуют отдельные монокристаллы пентайодида тетрабутиламмония (рис. 3, *а*, черная кривая).

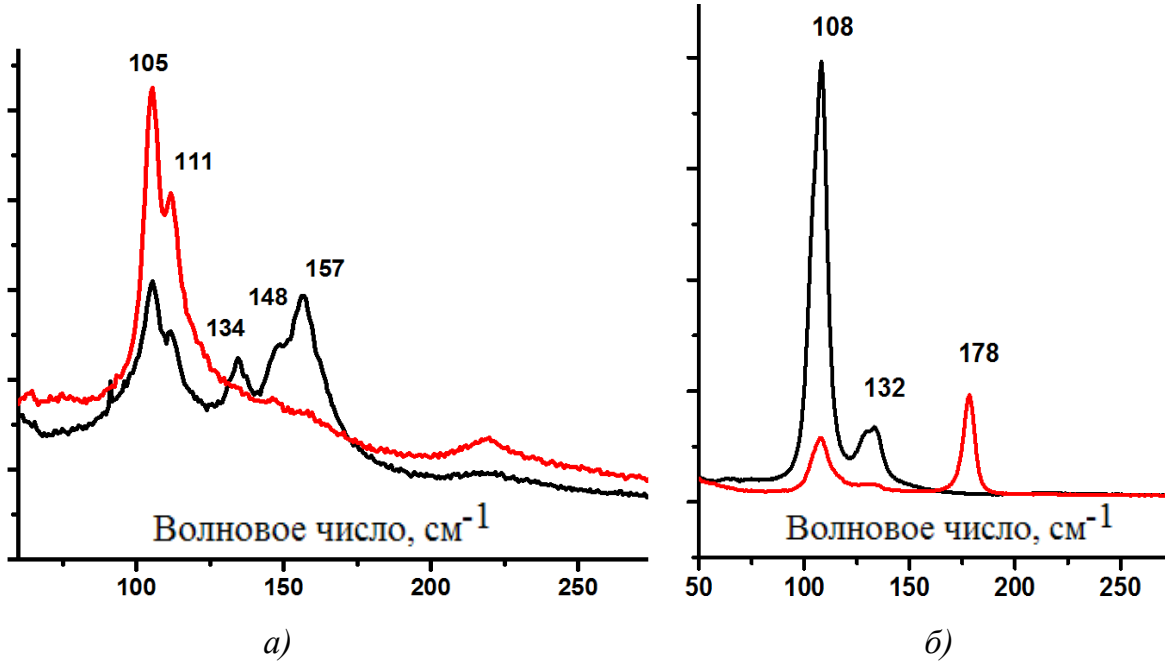


Рис. 3. Раман-спектры спектрально неоднородных образцов полийодидов
а) тетрабутиламмония (**1**): черная кривая – пентайодид, красная – трийодид,
б) тетраэтиламмония (**2**): черная кривая – трийодид,
красная – полийодид комплексного строения

Это подтверждается наличием соответствующих полос в Раман-спектре, а их наблюдаемые волновые числа хорошо согласуются с литературными данными: 105, 134, 150, 156, 160 см$^{-1}$ [10]. Однако после перекристаллизации получить индивидуальное соединение тетрабутиламмония пентайодида в виде монокристаллов не удалось. В кристаллографической базе данных структура пентайодида также не зарегистрирована.

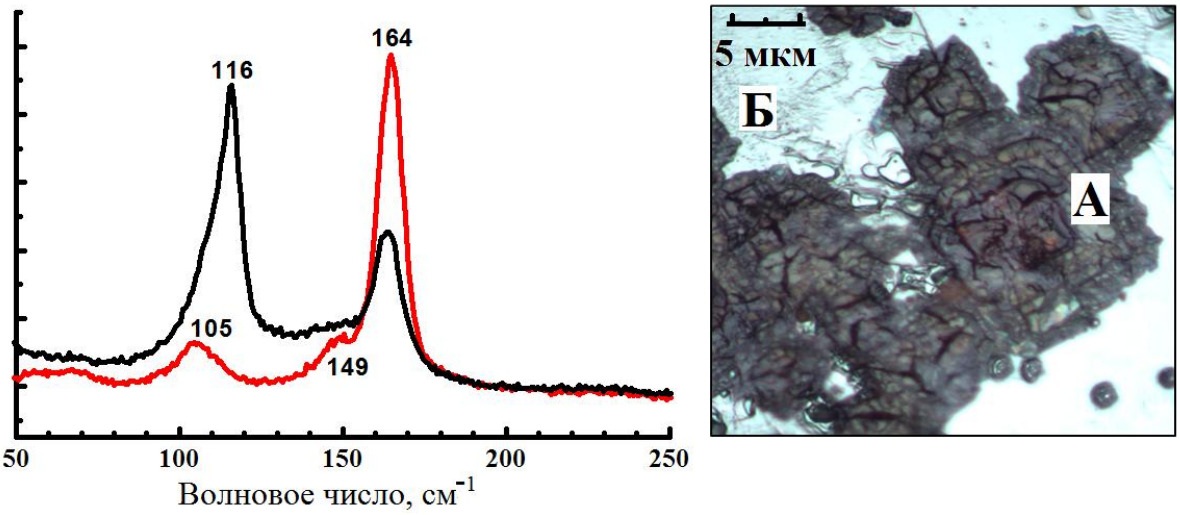
Другим образцом, демонстрирующим спектральную неоднородность, является тетраэтиламмония йодид, полученный при соотношении реагентов 1:2 (**2**). Из раствора после перекристаллизации выпадали только бордовые кристаллы трийодида тетраэтиламмония. Однако при микроскопическом исследовании неперекристаллизованного образца (**2**) обнаруживались более темные кристаллы, спектр которых отличался от такового для образца трийодида тетраэтиламмония известного строения. На спектре, снятом с более темных кристаллов (рис. 3*б*, красная линия) наряду с колебаниями трийодид-аниона видна полоса колебаний связанного йода 178 см$^{-1}$, что позволяет нам предположить, что данное соединение имеет в составе полийодид-анион комплексного строения. Произведем сопоставление полученного спектра со структурой полийодида тетраэтиламмония, представленного в кристаллографической базе данных CSD (HALTAP [11]). Эта структура состоит из трийодид-анионов и связанного с ними молекулярного йода, причем во взаимодействиях участвуют оба концевых атома трийодида, образуя сокращенные контакты с молекулярным йодом на расстояниях 3,479 и 3,494 Å. Связь в молекулярном йоде удлиняется незначительно до 2,734 Å, этим и может быть обусловлен небольшой сдвиг полосы колебания молекулярного йода в сторону меньших волновых чисел по сравнению со свободным кристаллическим йодом (180 см$^{-1}$).

Полученный йодид этилуротропиния представляет собой сросток визуально разнородных кристаллов (**3**). Ряд из них имеет гладкую бордовую поверхность, спектры с этого участка показывают наличие полосы типичного трийодида 114 см$^{-1}$. Некоторые кристаллы имеют более темную окраску с неровностями на поверхности и металлическим блеском. Спектры с темных участков кристаллов отличаются друг от друга: более темному участку на поверхности (рис. 4*б*) соответствует структура, имеющая в своем составе связанный молекулярный йод: полоса 164 см$^{-1}$, (рис. 4*а*, черная кривая). В спектре с гладкой поверхности с металлическим блеском наблюдается наличие малоинтенсивной полосы 149 см$^{-1}$ (рис. 4*а*, красная кривая) вместе с полосой 164 см$^{-1}$, что позволяет предположить наличие пентайодид-аниона в структуре по аналогии со спектрами тетраметиламмония пентайодида [3].

Для этилуротропиния в базе данных описаны структуры трийодида (ZOYBEU) [12] и сложного полийодида, включающего трийодид и пентайодид-анионы, расположенные на расстоянии 3,627 Å друг

от друга (HILLET) [13]. Представленный спектр (рис. 4*а*, красная кривая) хорошо согласуется со структурой, содержащей в своем составе взаимодействующие между собой три- и пентайодид-анионы.

Полученные в данной работе спектральные характеристики этилуротропиния полийодида можно сопоставить с представленными в работе [10] волновыми числами: для трийодида 112 см$^{-1}$, интенсивная полоса; 163 см$^{-1}$, слабая полоса; для пентайодида полосы средней интенсивности в области 170 см$^{-1}$, 152 см$^{-1}$, 137 см$^{-1}$ и интенсивные полосы в области 103 см$^{-1}$, 99 см$^{-1}$; для гептайодида сильные полосы в области 100 см$^{-1}$, 106 см$^{-1}$, полоса средней интенсивности 168 см$^{-1}$, плечо в области 176 см$^{-1}$.



а) *б)*

Рис. 4. а) Раман-спектры сростка кристаллов этилуротропиния полийодида (**3**): черная кривая – с темного нароста на поверхности (**А**), красная кривая – с гладкой поверхности с металлическим блеском (**Б**), б) внешний вид поверхности кристалла с обозначенными участками регистрации спектров

Во всех случаях идентификация состава полийодид-аниона была проведена только на основе спектральных данных, так как получение монокристаллов хорошего качества может быть сопряжено с объективными трудностями. Таким образом, метод Раман-спектроскопии может использоваться для оценки возможности существования ряда полийодидов с одинаковым органическим катионом и анионом варьирующегося состава. В случае затруднений в получении монокристаллов хорошего качества и разделении поликристаллических смесей возможна первичная идентификация основных йодных субъединиц в составе аниона на основе спектральных данных.

Установлено, что для поликристаллической смеси (**2**) тетраэтиламмония и сростка кристаллов (**3**) этилуротропиния полийодида наблюдается согласие полученных спектральных данных со структурой полийодидов, представленной в кристаллографической базе данных. В смеси тетрабути-

ламмония полийодида (**1**) на основе спектров, снятых с различных кристаллов идентифицировано присутствие основных йодных субъединиц: двух трийодид-анионов и пентайодид-аниона.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ. Раман-спектры исследуемых соединений были получены в Институте неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск. РСА соединений проведен в Институте органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН, г. Екатеринбург. Авторы выражают благодарности профессору Б.А. Колесову за помощь в освоении методики Раман-спектроскопии и канд. хим. наук П.А. Слепухину за проведенный РСА исследуемых соединений.

Библиографический список

1. Svensson P. H., Kloo L. // Chemical reviews. – 2003. – V.103. – No 5. – Pp. 1649–1684.
2. Колесов, Б.А. Раман-спектроскопия в неорганической химии и минералогии / Б.А. Колесов. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2009. – С. 186.
3. Deplano P., Ferraro J. R., Mercuri M. L., Trogu E. F. Structural and Raman spectroscopic studies as complementary tools in elucidating the nature of the bonding in polyiodides and in donor-I_2 adducts // Coordination Chemistry Reviews. –1999. – Vol. 188. – Pp. 71–95.
4. Tebbe K.-F., Gilles T. // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1996. – Vol. 622. – P. 1587.
5. Stegemann H., Oprea A., Nagel K., Tebbe K.-F. // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1997. – Vol. 623. – P. 89
6. Cambridge Structural Database. Version 5.33. University of Cambridge, UK.
7. Барташевич, Е.В. Три- и полийодиды комплексного строения продуктов иодциклизации 2-аллилтиохинолина / Е.В. Барташевич, И.Д. Юшина, Е.А. Вершинина, П.А. Слепухин, Д.Г. Ким // Журнал структурной химии. – 2014. – Т. 55. – N 1. – С. 109–116.
8. Migchelsen T., Vos A. // Acta Crystallogr. – 1967. – Vol. 23. – P. 796.
9. Brotherton W.S., Clark R.J., Lei Zhu // J. Org. Chem. – 2012. – Vol. 77. – P. 6443.
10. Mittag H., Stegemann H., Fillbier H., Irmer G. // J. Raman Spectrosc. – 1989. – Vol. 20. – P. 251.
11. Tebbe K.-F., Gilles T. // Acta Crystallogr., Sect. C: Cryst. Struct. Commun. – 1993. – Vol. 49. – P. 2042.
12. Tebbe K.-F., Farida T., Stegemann H., Fullbier H. // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1996. – P. 622.
13. Grafe-Kavoosian A., Nafepour S., Nagel K., Tebbe K.-F. // Z. Naturforsch., B: Chem. Sci. – 1998. – Vol. 53. – 641.

К содержанию

УДК 544.18 + 621.793 + 539.25

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ТЕХНОЛОГИИ КЕРАМИКИ

Т.В. Варламова, А.Е. Лясова, Д.М. Галимов

Приведены данные о керамических композиционных материалах и об использовании углеродных нанотрубок (УНТ) для их получения. Рассмотрено влияние присутствия УНТ в составе керамических композитов на структурные, механические, электрические свойства данных материалов. Приведены данные и анализируется возможность управления структурой углеродных нанотрубок посредством способа формирования катализатора их синтеза для последующего получения композитов с керамикой.

Ключевые слова: керамика, композиты, углеродные нанотрубки.

Керамические композиционные материалы имеют керамическую матрицу и содержат металлическую или неметаллическую волокнистую арматуру. Достоинство керамических композитов определяются в первую очередь свойствами матрицы. Керамические матрицы обеспечивают наиболее высокий уровень рабочих температур композиционных материалов. Керамика является химически и термически стойким материалом, имеет высокий уровень прочностных свойств на сжатие.

Недостатком большинства керамических материалов является низкий уровень трещиностойкости. Так, материалы, имеющие комбинированную матрицу, состоящую в равных объёмных процентах из керамики и металла – керметы, имеют более высокие показатели вязкости.

Более эффективным считается введение в композиты не порошка, а волокнистых материалов. Например, одинаковая с керметами термостойкость у композитов, содержащих волокнистый упрочнитель, достигается при содержании волокна в три раза меньшим, по сравнению с содержанием металлического порошка в керметах [1].

В керамических композиционных материалах нагрузка передаётся на волокно посредством матрицы. Волокнистая арматура, вводимая в матрицу композиционного материала, обеспечивает увеличение прочностных свойств керамики, если представляет собой более жёсткий материал по сравнению с керамической матрицей.

К основным способам производства керамических композиционных материалов относят прессование со спеканием, горячее прессование и шликерное литьё. Технология прессования со спеканием не подходит для изготовления композитов, армированных волокнами (особенно большого диаметра), поскольку волокна препятствуют прессованию порошка и являются причиной дефектов структуры матриц [1].

Тип используемых армирующих волокон определяется условиями работы изделий (температурой, агрессивностью среды). Для армирования используют металлические волокна (вольфрама, молибдена, ниобия, стали) с объёмной долей до 25 %, что обеспечивает повышение вязкости и термостойкости композитов. В качестве армирующих элементов так же используют керамические волокна – например, усы муллита, игольчатые монокристаллы ZrO_2, MgO, пластинчатые кристаллы β-глинозёма и Cr_2O_3, с содержанием 10…20 %, что обеспечивает термостойкость в 3–5 раз выше при использовании технологии горячего прессования. К достоинствам керамических волокон относятся малое различие модулей упругости и коэффициентов термического расширения материалов волокон и матрицы, химическое сродство компонентов композитов, жаростойкость керамических волокон [1]. Эффективным керамическим армирующим элементом являются моноволокна карбида кремния с диаметром 10…12 мкм, которые горячим способом прессуются в виде лент волокна с порошком боросиликатного, алюмоборосиликатного или литиевоборосиликатного стекла в среде аргона.

В качестве упрочняющих элементов керамических композиционных материалов могут быть использованы высокомодульные углеродные волокна в сочетании с матрицами из боросиликатных, алюмосиликатных и литиевосиликатных стёкол [2].

По данным [3] армирование керамики углеродными нанотрубками приводит к увеличению прочности на изгиб и повышению трещиностойкости.

В работе [4] указано, что твёрдые и износоустойчивые керамики на основе ZrO_2 и Al_2O_3, перспективные для использования в различных областях техники и технологий, ввиду ковалентности связей в данных материалах обладают низкой пластичностью. Анализ проблемы упрочнения композита в системе Al_2O_3–ZrO_2 приводит к выводу о целесообразности использования углеродных нанотрубок, обладающих высокой упругостью (модуль Юнга для одностенных УНТ составляет 1 ТПа). При этом возникает задача «закрепления концов УНТ в керамической матрице», что позволило бы предотвратить развитие трещин в керамическом композите при высоких деформирующих нагрузках.

Полагая, что переход к наноуглеродным материалам и модифицирование полимерных, металлических и керамических матриц нановолокнами, нанотрубками, фуллеренами позволит создавать еще более прочные нанокомпозиционные материалы, авторы [5] исследовали изменение твёрдости и модуля Юнга, а также изменение состава при атмосферном отжиге (500 ºС) наноструктурированного оксида алюминия в композите с многостенными УНТ. При сохранении неизменным количества углерода в составе композита после проведения отжига, модуль Юнга данного материала увеличился на 50 %. Для введения УНТ в состав композита их предварительно диспергировали с помощью ультразвука в водной среде.

В работе [6] указывается на перспективность применения УНТ в сочетании с силикатной матрицей для улучшения механических свойств композитов и модификации их электромагнитных характеристик. При этом отмечается, что перколяционный порог анизометричных УНТ, обеспечивающий электрическую проводимость, должен быть гораздо ниже 30 %.

При исследовании композитов, сочетающих углеродные нанотрубки марки «Таунит» с высококремнезёмистым строительным материалом идамитом была отработана методика введения УНТ в состав композита. Это осуществлялось посредством предварительного смешивания УНТ с измельчённым кварцевым песком. Данная методика, как указывают авторы [6], позволяет обеспечить механическую и электрическую изотропность получаемого композитного материала (в качестве связующего использовали водный раствор жидкого стекла). Термическая обработка проводилась при 750 ºС в среде аргона. Рентгенофазовый анализ показывает сохранение типа и количества кристаллических фаз в керамическом материале вне зависимости от присутствия в его составе УНТ. Повышение прочностных характеристик композита наблюдали при введении УНТ до 1 %. При увеличении концентрации УНТ до 5 % уменьшалась величина удельного электрического сопротивления материала и далее оставалась постоянной. Полученные результаты указывают на перспективность использования УНТ в керамических композитах с целью придания им радиопоглощающих свойств и способности снятия статического электричества.

Авторы [7] предложили схемы получения композитных прекурсоров для последующего горячего прессования при 1400–1700 ºС: 1) выращивания нанотрубок непосредственно в объёме нанопорошка оксида алюминия; 2) приготовление смесей УНТ и карбидов вольфрама, ниобия и тантала. При исследовании микроструктуры полученных керамических композиционных материалов обнаружено, что первая схема приготовления прекурсора приводит к более равномерному распределению УНТ, а рост зёрен оксидов и карбидов тормозится в зонах, содержащих конгломераты трубок.

В работе [8] синтез керамических композитов УНТ-SiO_2 выполняется с целью дальнейшего получения керамических мембран с регулируемой пористой структурой, образуемой при выгорании УНТ.

Отмечается [9, 10] существенное увеличение электропроводности оксида титана и оксида лантана в композитах с углеродными наноматериалами по сравнению с чистыми керамиками из этих оксидов. В работе [10] исходные порошки получены ультразвуковой и механической обработкой в шаровых мельницах. По мнению авторов работы [10] композиты оксида титана с наноструктурированным углеродом – перспективные катализаторы электродных процессов в электрохимических устройствах.

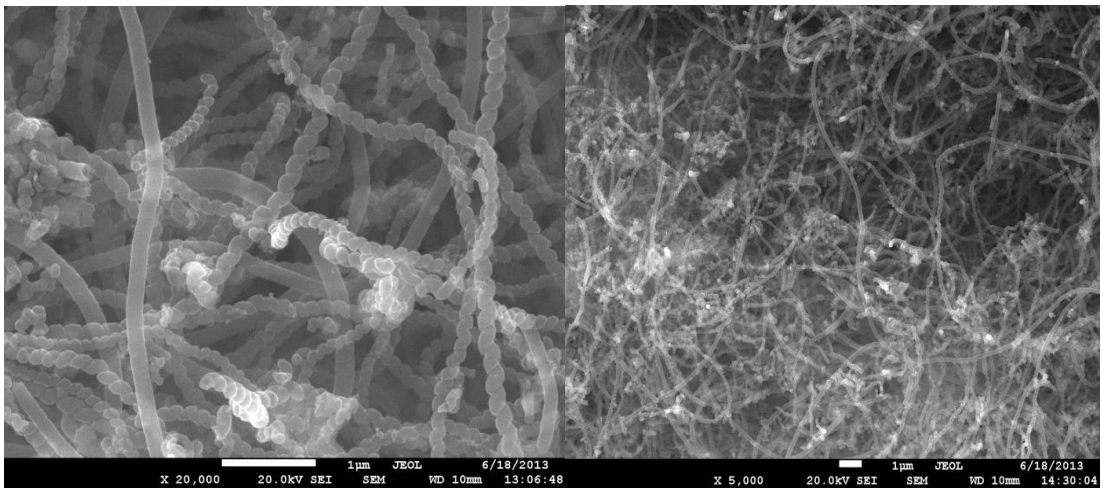
Успех использования УНТ в матрице керамических частиц обусловлен возможностью управлять структурными параметрами углеродных материалов (трубок, волокон) – в первую очередь диаметром и длиной.

Целью данной работы является изучение возможностей управления структурой углеродных наноматериалов, предназначаемых для последующего их использования в качестве компонентов в композитах с керамикой. В качестве управляющего фактора рассматривался способ формирования каталитического слоя на поверхности подложки, предназначаемой для углеродного депозита, образующегося в процессе пиролиза ацетилена при 700 ºС в трубчатой печи СУОЛ-0,25.1/12,5-И2. Ацетилен получали из карбида углерода в аппарате Киппа, затем очищали и осушали в колонках с силикагелем. Контроль расхода ацетилена осуществлялся с помощью склянки Тищенко, заполненной глицерином.

Металлический слой на подложке формировался из водных растворов солей железа, никеля и кобальта. Водные растворы наносились послойно, высушивались и подвергались термообработке при 450 ºС с образованием соответствующего частично гидратированного оксидно-металлического покрытия. Перед началом пиролиза подложки с нанесённым оксидно-металлическим слоем отжигали в токе водорода при 700 ºС.

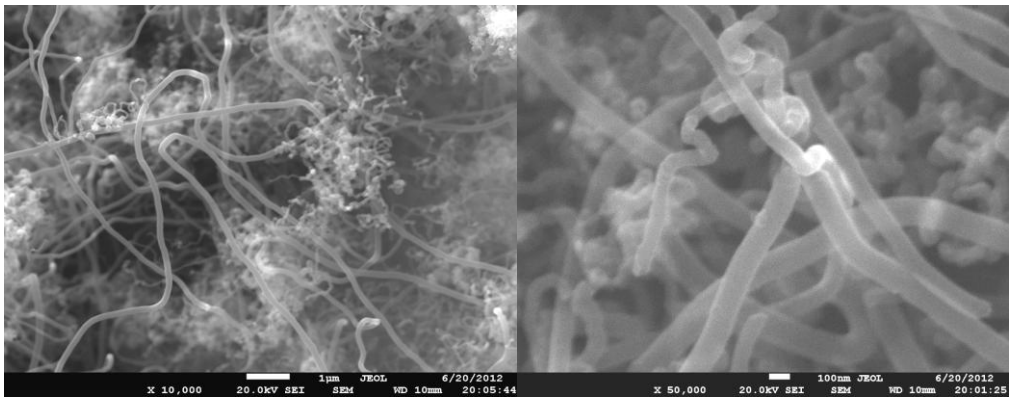
Электронные изображения (SEM) были получены с помощью сканирующего растрового электронного микроскопа *JEOL JSM-7001F*.

На рисунках 1 и 2 показаны нанотрубки, полученные пиролизом ацетилена на Ni-катализаторах, приготовленных из растворов хлорида никеля, с различным режимом термообработки (режим 1 и режим 2).



а ***б***

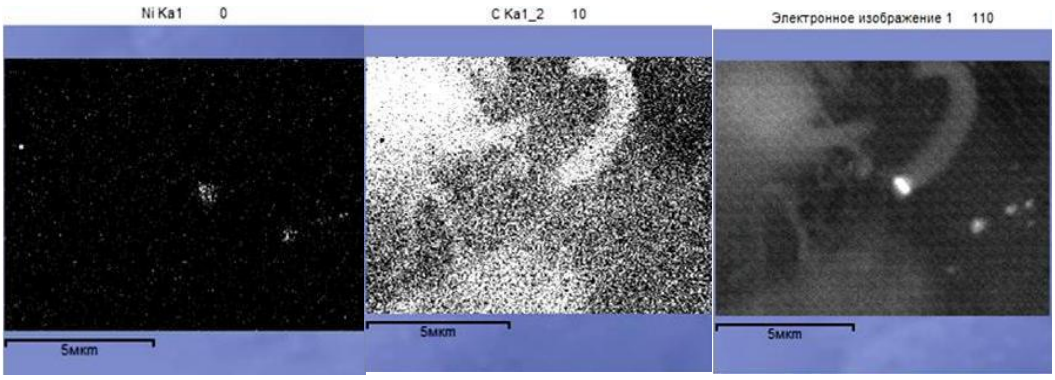
Рис. 1. SEM-изображения углеродных нанотрубок,
полученных пиролизом ацетилена на Ni-катализаторе (режим термообработки 1):
а – x 20000, ***б*** – x 5000



а ***б***

Рис. 2. SEM-изображения углеродных нанотрубок, полученных пиролизом ацетилена на Ni-катализаторе (режим термообработки 2):
а – x 100000, ***б*** – x 50000

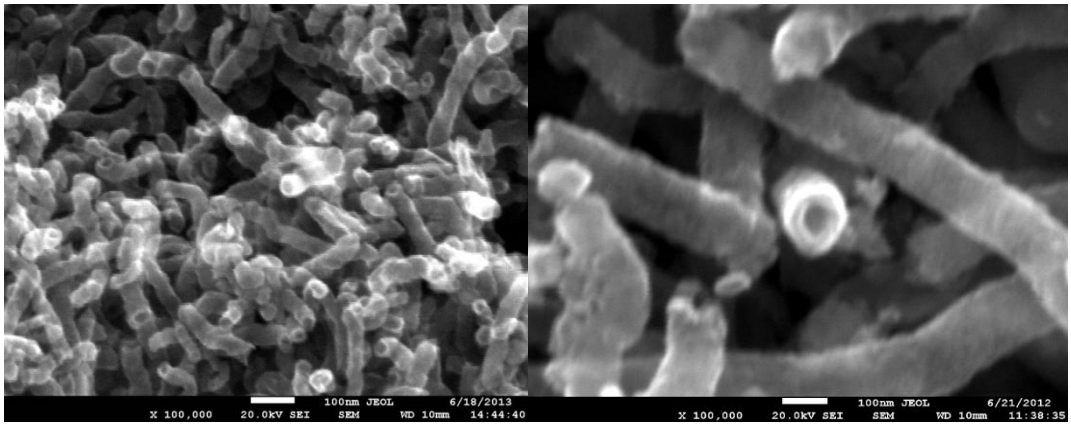
По мнению авторов, режим термообработки высушенного солевого слоя определяет кинетику процесса окисления и дегидратации, а также роста оксидно-металлических кристаллических зёрен, что в свою очередь определяет их размер и форму. Последнее обстоятельство, согласно механизму роста УНТ, описанному Харрисом [11], будет определять скорость десорбции углерода по периметру (поверхности) зёрен катализатора и, соответственно, диаметр (поперечный размер) и форму наноструктурного элемента (в данном случае углеродной нанотрубки, спиралевидно закрученной или не закрученной). В данной работе получены результаты, согласующиеся с механизмом роста углеродных нанотрубок, приведённом в работе [11]. На рисунке 3 приведены результаты электронно-микроскопического двумерного поэлементного картографирования нанотрубки, полученной на никелевом катализаторе. Сопоставление карт распределения никеля (*а*) и углерода (*б*) с электронным изображением (*в*) позволяет увидеть рост углеродной нанотрубки на частице никеля.



а ***б*** ***в***

Рис. 3. Изображение роста наноуглеродной трубки на частице Ni

Электронные изображения образцов наноуглеродного материала, полученных на Fe- и Co-катализаторах (рис. 4) существенно отличаются по морфологии от наноуглеродных материалов, выращенных на подложках с никелем. На рисунке 4 можно видеть короткие или резко изломанные многослойные углеродные нанотрубки, причём существенно отличающиеся по диаметру в зависимости от вида катализатора (Fe или Co). Необходимо указать, что для приготовления железных катализаторов использован раствор сульфата железа (II), а не хлоридной соли. Объяснения такому существенному морфологическому отличию, по-видимому, можно найти в результате изучения состава, структуры и морфологии каталитических покрытий подложек на различных этапах их формирования – в процессе получения высушенных и термообработанных слоёв, на стадии окончательного создания оксидно-металлического покрытия и, наконец, на стадии его металлизации. Выяснение механизма, определяющего длину нанотрубки, требует дополнительных данных и связано также с расходом ацетилена и парциальным давлением углерода в системе во время синтеза.



а ***б***

Рис. 4. SEM-изображения углеродных нанотрубок (х 100000), полученных пиролизом ацетилена на: ***а*** –Fe-, ***б*** – Co-катализаторах

Таким образом, для использования углеродных нанотрубок и волокон в технологии керамических композитов требуется разработка методов гибкого управления их структурными характеристиками (длиной, диаметром, строением, морфологией). Такими характеристиками можно управлять, в частности, посредством параметров пиролитического метода получения катализатора для синтеза углеродных наноматериалов. К таким параметрам относятся концентрация и коллоидно-химическое состояние исходного водного раствора соли, число наносимых слоёв, кинетика сушки и термической обработки формируемых слоёв. Играет также свою роль режим металлизации полученных оксидно-металлических гидратированных слоёв, включая температуру, давление и расход восстановителя.

Библиографический список

1. Батаев, А.А. Композиционные материалы: строение, получение, применение. Учебник / А.А. Батаев, В.А. Батаев. – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2002 – 384 с.

2. Буланов, И.М. Технология ракетных и аэрокосмических конструкций из композиционных материалов / И.М. Буланов, В.В. Воробей. – М.: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1998. – 516 с.

3. Cho J., Boccaccini A.R., Shaffer M.S.P. Ceramic matrix composites containing carbon nanotubes // J Mater Sci. – 2009. – Vol. 44. – Pp. 1934–1951.

4. Коренков, В.В. Особенности механических характеристик оксидных керамических композитов с углердными нанотрубками / В.В. Коренков, Р.А. Столяров // Вестник Тамбовского государственного университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2010. – Т. 15. – №3-1n. – С. 1032–1033.

5. Коренков, В.В. Физико-механические свойства керамического композита НОА/МУНТ / В.В. Коренков, Р.А. Столяров, В.М. Васюков, А.В. Шуклинов, А.Н. Ходан // Вестник Тамбовского государственного университета. Серия: Естественные и технические науки. – 2011. – Т. 16. – Вып. 3.– С. 824–825.

6. Саркисов, П.Д. Высококремнезёмистый строительный материал, армированный углеродными нанотрубками / П.Д. Саркисов, Л.А. Орлова, Л.А. Клименко, В.Ю.Дулин // Вестник Волгоградского государственного технического университета. – 2011. – Т. 2. – № 8.– С. 155–159.

7. Благовещенский, Ю.В. Получение и структура композитов с углеродными нанотрубками и керамическими матрицами / Ю.В. Благовещенский, К.В. Ван, А.А. Володин, В.М. Кийко, А.В. Колчин, Н.И. Новохатская, Б.П. Тарасов, А.Н. Толстун // Композиты и наноструктуры. – 2010. – № 1.– С. 30–39.

8. Чесноков, В.В. Каталитический синтез углеродных нанотрубок и метод их введения в алюмосиликатную матрицу / В.В. Чесноков, А.С. Чичкань, В.Н. Пармон // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. – 2013. – Т. 56. – № 7 – С. 122–126.

9. Володин, А.А. Композиты оксида лантана с углеродными наноматериалами / А.А. Володин, П.В. Фурсиков, А.А. Большаков, Ю.Н. Шульга, И.И. Ходос, М.Н. Абдусалямова, Б.П. Тарасов // Альтернативная энергетика и экология. – 2012. – № 2. – С. 36–44.

10. Володин, А.А. Электропроводящие композиты на основе оксида титана и углеродных нанотрубок / А.А. Володин, А.А. Бельмесов, В.Б. Мурзин, П.В. Фурсиков, А.Д. Золотаренко, Б.П. Тарасов // Неорганические материалы. – 2013. – Т.49. – № 7. – С. 702.

11. Харрис, П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века / П. Харрис, пер. с англ. под ред. с доп. Л. А. Чернозатонского. – М: Изд-во Техносфера, 2003. – 335 с.

К содержанию

УДК 665.65

АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ ДЕСУЛЬФУРИЗАЦИИ НЕФТЯНЫХ КОКСОВ

Б.Ш. Дыскина, Ю.В. Колупаева, А.С. Королев

В работе показана полная зависимость электродного производства и металлургии от импорта коксов, пригодных для производства графитированных электродов. Исследованы российские нефтяные сернистые коксы. Показано, что десульфуризация в области предкристаллизации сопровождается вспучиванием и гетерогенной графитацией.

Ключевые слова: графитированный электрод; нефтяной кокс, десульфуризация; вспучивание; гетерогенная графитация.

С переориентацией электросталеплавления на печи повышенной мощности значительно возросли требования к качеству графитированных электродов (ГЭ). Основное сырье для производства ГЭ – игольчатые коксы (ИК). В России они не производятся. Игольчатые коксы нефтяные и пековые разных марок – импортные, их закупают в Японии, США, Великобритании, в последние годы и в Китае. Сырьевую базу технологии рядовых электродов, работающих на электродуговых печах меньшей мощности и вместимости, составляют регулярные (рядовые неигольчатые) малосернистые коксы замедленного коксования с серой до 1,0 %. Такие коксы закупают в Республиках Туркменистан и Азербайджан. Растянувшаяся на четверть века организация производства отечественного ИК, а также суверенизация Союзных республик привели, в конечном итоге, к устойчивой зависимости электродной и металлургической промышленности России от внешнего рынка. В то же время мировой рынок нефтяного кокса, за счет постоянного строительства новых и реконструкции действующих установок, постоянно растет: в 1996 году было произведено 35 млн тонн кокса, 2000 году – 48 млн тонн, 2004 году – 60 млн тонн, 2010 году – 80 млн тонн, по прогнозным оценкам, в ближайшие годы производство нефтяного кокса превысит 100 млн тонн в год [1]. Учитывая современные геополитические условия, необеспеченность промышленности специальными сортами кокса создает угрозу национальной безопасности России [2].

За рубежом для изготовления всех графитированных электродов используют только ИК разных марок, особенности технологии – ноу-хау фирм, в литературе не обсуждаются. Регулярные коксы с повышенным содержанием серы (более 1,0 %) в принципе отвергаются как сырье для графитированной продукции. Поскольку такие коксы инициируют при графитации трещинообразование в обожженных электродных заготовках и тем больше, чем больше их сечение, содержание серы в коксе и анизотропия

его структуры. К браку приводит вспучивание коксов на стадии предкристаллизации, обусловленное процессами десульфуризации. Твердофазное разбавление сернистых коксов малосернистыми с доведением нормы массовой доли серы до 1,0 % не снимает отрицательного воздействия сернистого кокса на качество электродов. Повышение в шихте доли сернистых коксов до 90 % приводит к браку электродов по УЭС до 23 %. Наряду с браком, повышается удельное электросопротивление (УЭС). Выход высшего сорта ГЭ снижается практически пропорционально доле сернистых коксов в шихте.

Производимые в России коксы отличаются от импортных более чем полуторным превышением норм по массовой доле серы. Изменение содержания серы в небольших пределах может регулироваться подбором сырья коксования. Традиционно как за рубежом, так и в РФ основным сырьем установок замедленного коксования являются тяжелые нефтяные остатки от переработки нефтей: гудроны, асфальты деасфальтизации, остаточные экстракты очистки масел и т.д. Основные физико-химические и эксплуатационные свойства получаемого кокса определяются свойствами поступаемого на установку остатка, качество которого, в свою очередь, полностью определяется качеством исходной нефти [2]. Сера нефтяных остатков способствует ускорению внутри- и межмолекулярной конденсации, оказывает «сшивающее» действие, затрудняя взаимную ориентацию молекул и упорядочение структуры. Внедренных технологий обессеривания, целевой подготовки тяжелых нефтяных остатков для коксования нет. В результате многие годы между производителями и потребителями российского нефтяного кокса действует неразрешимое противоречие: трудности с реализацией нефтяного кокса с повышенным содержанием серы, с одной стороны, и практически полное отсутствие сырьевой базы – кокса для графитированной продукции, с другой стороны. В связи с этим актуальны работы по изучению возможности вовлечения российских нефтяных коксов в технологии графитированных электродов. Задача данной работы – выявление и анализ особенностей структурных превращений российских коксов при десульфуризации.

Объект исследования – регулярные малозольные российские нефтяные коксы из гудрона с содержанием серы от 0,5 до 4,0 % (табл. 1).

Стандартную прокалку коксов (1300 °С, 5 часов) проводили в силитовой печи. Термообработку при температурах 1400 °С и выше – в печи Таммана в атмосфере азота; изотермическая выдержка при 1400 °С – 2, 4, 5 и 10 часов; при 1500 °С – 1, 2 и 3 часа; при более высоких температурах – 1 час. Образцы охлаждали вместе с печью. Для высокотемпературной обработки каждую пробу кокса помещали в отдельную секцию четырехсекционного графитового тигля.

Таблица 1

Характеристика нефтяных коксов

№	Изготовитель кокса – НПЗ	Сырье коксования	Действительная плотность, г/см^3	Балл структуры	Массовая доля серы, %
1	Туркменбашинский	гудрон	2,09	4,3	0,5
2	Омский	гудрон	2,09	4,3	1,5
3	Ново-Уфимский	гудрон	2,08	4,2	2,3
4	Лабораторный – из туймазинских нефтей	гудрон	2,07	4,0	4,3

Содержание серы в коксах определяли методом Эшка. При стандартной прокалке (1300 °С, 5 часов) содержание серы в малосернистом коксе не изменилось. С повышением исходной серы в коксах пропорционально увеличивалась потеря серы: для омского кокса составила 0,1 %; новоуфимского – 0,2 %; высокосернистого – 0,6 %.

При 1400 °С заметная потеря серы из новоуфимского кокса с исходной серой 2,3 % происходила после выдержки в течение 4-х часов и более; через 10 часов серы в нем осталось меньше, чем в малосернистом коксе (0,1 %, против 0,3). В омском коксе с исходной серой 1,5 % за 10 часов содержание серы достигло уровня малосернистого кокса.

При 1500 °С – такие же результаты получены через 3 часа.

При 1800 °С во всех коксах произошел сброс серы до 0,2 % (табл. 2).

Таблица 2

Влияние режимов термообработки
на массовую долю серы в нефтяных коксах из гудрона

Температура, °С	Время выдержки, ч	Кокс			
		туркмен-башинский	омский	ново-уфимский	из нефтей туймазинских
исходный	–	0,5	1,5	2,3	4,3
1300	5	0,5	1,4	2,1	3,7
1400	2	0,4	1,3	2,1	3,4
1400	3	0,3	1,3	1,9	2,0
1400	4	0,4	1,2	1,4	1,5
1400	5	0,5	1,1	0,3	0,5
1400	10	0,3	0,3	0,1	0,1
1500	1	0,4	1,3	1,7	3,2
1500	2	0,5	0,8	0,6	0,5
1500	3	0,3	0,3	0,1	0,1
1800	1	0,2	0,2	0,2	0,2

Из полученных результатов видно, что с увеличением исходного содержания серы и температуры обработки возрастает интенсивность процессов десульфуризации.

В свою очередь, интенсивная десульфуризация обусловила изменения в кристаллической и поровой структурах твердофазного кокса.

Кристаллическую структуру коксов исследовали методами рентгеноструктурного анализа (РСА). Дифрактограммы сернистых коксов, термообработанных при 1400–1800 °С отличает от дифрактограммы малосернистого бимодальная форма линии с дополнительным пиком на максимумах 002 и 004 со стороны больших углов, что свидетельствует о присутствии в коксе двух углеродных фаз. В новоуфимском коксе, термообработанном при 1400 °С, получены значения межплоскостного расстояния (d_{002}) неупорядоченной составляющей 0,3442 нм, упорядоченной – 0,3358 нм, что практически соответствует d_{002} идеального графита 0,3354 нм. В дальнейшем упорядоченную составляющую будем называть графитовой фазой (ГФ). В аналогичных условиях термообработки d_{002} малосернистого кокса меньше, чем у сернистого, равняется 0,3424 нм. В сернистых коксах методом РСА графитовая фаза обнаруживается после термообработки при 1400° в течение 4 часов и более при потере серы до 40 %. С увеличением продолжительности выдержки интенсивность дополнительного пика растет. По соотношению площадей под максимумами судили о количестве ГФ. Минимальное количество графитовой фазы (5–8 %) выявлено во фракциях менее 1 мм; в крупных фракциях более 1 мм - достигало 20 % и более. При термообработке 1500°С в предварительно прокаленных фракциях количество ГФ достигало 30 %. Графитовая фаза выявлялась до 2100 °С, при более высоких температурах пики перекрываются, вследствие графитирования неупорядоченной составляющей кокса. Увеличение количества ГФ обусловливало торможение упорядочения неупорядоченной углеродной матрицы сернистых коксов. При повышении температуры обработки от 1400 до 1500 °С интенсивность торможения стала снижаться; при 1600 °С торможение сменилось резким снижением d_{002} с 0,3450 до 0,3375 нм. Согласно работам [3, 4], чем меньше структурная перестройка на стадии предкристаллизации, тем интенсивнее совершенствование структуры в процессе графитация коксов.

Выделить отдельно графитовую фазу не удалось. В работе [5] количество ГФ определяли сопоставлением рентгенограмм обессеренного кокса и стандартизованных порошков – смесей цейлонского графита и прокаленного кокса, содержание ГФ получено не более 0,5 %.

Поровую структуру исследовали методом ртутной порометрии. Десульфуризация сернистых коксов в области температур 1400–1800 °С не внесла существенных изменений в крупные поры размерами 1–100 мкм. Выявлена особенность изменения архитектуры пор – появление канальных

пор с относительно постоянным по длине сечением 60–1000 нм. Объём и преобладающий размер пор тем больше, чем выше исходное содержание серы в коксе и температура обработки, например: в новоуфимском коксе, термообработанном при 1400–1500 °С, преобладающий размер пор составил ~60 нм; при 1600 °С ~60–80 нм; при 1700–2000 °С ~100–115 нм. С уменьшением размеров частиц открытая пористость снижается: удельный объем открытых пор в зернистых фракциях (1–2 мм) в 3,7 раза больше, чем в мелких – размерами 0,125–0,16 мм (0,11см^3/г, против 0,03).

Закрытая пористость в новоуфимском коксе при десульфуризации возросла до 12,5 %, против 5 % – малосернистом. В результате этого заметно понизилась его действительная плотность после термообработки при 2100 °С и составила 1,99 г/см^3, против 2,18 у малосернистого кокса. При дальнейшем нагреве уплотнение коксов одинаковое.

Термические превращения углерода, на наш взгляд, в значительной мере обусловлены термоустойчивостью серосодержащих соединений и процессами эвакуации из кокса серосодержащих газов. Можно предположить, что в процессах десульфуризации коксов первичным актом является разрыв сероуглеродных связей RC–S. Затем в структурной единице начинается движение возможных свободных радикалов RC–, –S. Активная –S может в равной мере вступать во вторичные взаимодействия с образованием более термоустойчивых соединений RC–S–CR_1 или переходить в жидкую или парогазовую фазу с образованием микропор размерами менее 1,5 нм. Серосодержащие газы диффундируют в крупные поры, создавая значительное давление [6]. Всё это ведет к росту внутренних напряжений, ползучести и вспучиванию углеродной матрицы с образованием канальной пористости и вскрытием пор с выбросом газов, соответственно, снятием напряжения. В составе газов обнаружены H_2S, меркаптаны, CS_2, COS, CO, CH_4, H_2 [7, 8]. После сброса давления конкурирующие усадочные явления корректируют размеры и форму пор: часть мелких пор затягивается, а часть так и не вскрывается. Растет закрытая пористость. При этом возникают локальные участки повышенной микродефектности, которые становятся центрами кристаллообразования. Часть микродефектов под действием теплового движения «изгоняется» в менее упорядоченную составляющую, приводит к уменьшению внутренней энергии кристаллизующейся области, что термодинамически оправдано. Дефектность аморфной составляющей, повышаясь, выравнивает внутреннюю энергию углеродных фаз и локальная кристаллизация при данной температуре прекращается. С повышением температуры десульфуризации возрастают энергетические барьеры «стоку» дефектов, формируется более однородная кристаллическая структура. Температура завершения выхода гетероэлементов – начальная температура трехмерного упорядочения сернистых коксов.

Выявленные факторы при десульфуризации сернистых коксов протекают в обожженной монолитной заготовке на стадии графитации и приводят к снижению качественных параметров графитированного электрода на их основе.

Библиографический список

1. Робинсон, Б. Реконструкция установок замедленного коксования: увеличение мощности и улучшение эксплуатационных показателей / Б. Робинсок // 4-я Конференция и выставка по оборудованию для нефтепереработки и нефтехимии России и стран СНГ. – М., 20–21 апреля 2009 г.

2. Валявин, Г.Г. Процесс замедленного коксования и производство нефтяных коксов, специализированных по применению / Г.Г. Валявин, В.П. Запорин, Р.Г. Габбасов, Т.И. Калимуллин // Территория Нефтегаз. – 2011. – № 8.

3. Fischbach, D.B. The kinetics and mechanism of graphitization / D.B. Fischbach // In: Chemistry and physics of carbon. Ed. by P. Walker. – New York: M.Dekker Inc. – 1971. – V.7. – Pp. 1–105.

4. Jasienko, S. Research the catalytic graphitization of petroleum coke / S. Jasienko, L. Wajzer // The 2 th Int. Conf. on Carbon. – Baden-Baden. – 1976. – Pp. 189–192.

5. Федоров, В.Б. Углерод и его взаимодействие с металлами / В.Б. Федоров, М.Х. Шоршоров, Д.К. Хакимова. – М.: Металлургия, 1978. – 208 с.

6. Whittaker, M.P. The irreversible expansion of carbon bodies during graphitisation / M.P. Whittaker, L.I. Grindstaff // Carbon. – 1969. – V. 7. – № 5. – Pp. 615–621.

7. Fitzer, E. Gaseous products during the puffing of coke materials / E. Fit–zer, D. Kompalic, O. Wormer // Proc. of the 4 th Int. Carbon Conf. – Baden-Baden. – 1986. – Pp. 116–118.

8. Fujimoto, K. Puffing ingibitors for coal based needle coke / K. Fujimoto, M. Sato, et al. // Carbon. – 1986. – V. 24. – № 4. – Pp. 397–401.

К содержанию

УДК 669.046.44

ПРЕИМУЩЕТВА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПЕЧЕЙ ОТКРЫТОГО ТИПА ДЛЯ ОБЖИГА УГЛЕГРАФИТОВОЙ ПРОДУКЦИИ

Н.П. Нонишнева

Анализ работы многокамерных печей обжига углеграфитовой продукции открытого и закрытого типа показал, что печи обжига открытого типа имеют целый ряд преимуществ перед печами закрытого типа, основными из которых являются равномерность температурного поля в объеме камер, низкий расход газа, высокая производительность, отсутствие тяжелого свода, возможность сжигания смолистых летучих веществ в греющих простенках, а также более низкие капитальные затраты при строительстве печи.

Ключевые слова: печь обжига открытого типа, печь обжига закрытого типа, перепад температур, производительность, расход газа, качество углеграфитовой продукции, сжигание смолистых летучих веществ.

Процесс производства углеграфитовой продукции состоит из нескольких технологических операций, среди которых обжиг занимает особое место. Обжиг определяет качество и эксплуатационные свойства углеграфитовой продукции и является самой длительной технологической операцией (продолжительность нагрева и охлаждения при обжиге составляет от 17 до 30 суток).

При нагреве заготовок, спрессованных из твердого наполнителя (нефтяного, пекового коксов, термоантрацита) и связующего (каменноугольного пека), происходит выделение летучих веществ из связующего, образование полукокса, а затем кокса, связывающего зерна наполнителя [1]. В процессе усадки полукокса формируется структура и материал приобретает требуемые свойства. Максимальная температура обжига составляет 1000–1250 ^{o}C. График обжига имеет дифференцированный характер, минимальные скорости нагрева 1–2 ^{o}C/час должны обеспечиваться в интервале температур газовыделения и усадки заготовок 200–600 ^{o}C.

На качество обожженных заготовок большое влияние оказывает равномерность нагрева в объеме камер печей обжига. Возникающие при обжиге перепады температур приводят к снижению механической прочности и теплопроводности, увеличивается трещиноватость и удельное электросопротивление, снижается эксплуатационная стойкость углеграфитовой продукции.

Не менее важное значение имеет охлаждение обожженных заготовок. Высокие скорости охлаждения приводят к трещинообразованию, повышению уровня брака и снижению качества продукции.

После проведения обжига углеродные материалы становятся устойчивыми к механическим и химическим воздействиям, увеличивается их теплопроводность, электропроводность и термическая стойкость.

Процесс обжига являются источником загрязнения окружающей среды канцерогенным 3,4 бенз(а)пиреном, который содержится в смолистых летучих веществах, выделяющихся при обжиге в процессе коксования связующего.

В мировой практике для обжига спрессованных углеродных заготовок используются печи различной конструкции: с выкатным подом и туннельные, многокамерные печи Ридгаммера закрытого и открытого типа [2]. Печи обжига должны обеспечивать: оптимальное равномерное распределение температуры в камерах; максимально низкий расход теплоносителя; минимальные операционные и эксплуатационные расходы; стабильно высокое качество обжигаемой продукции; высокую производительность и экологическую безопасность.

Основными недостатками первых двух типов обжиговых печей (туннельных и с выкатным подом) являются ограниченный ассортимент обжигаемой продукции, низкая производительность (табл. 1).

Таблица 1

Сравнительная характеристика печей для обжига углеграфитовой продукции

№№ п.п.	Наименование	Печь открытого типа	Печь закрытого типа	Печь с выкатным подом	Туннельная печь
1	Количество камер в печи, шт.	34–72	20–30	1	1
2	Тоннаж загрузки одной камеры, тн	70–90	36	147	350
3	График обжига, час	180	360	300	270
4	Количество обожженных камер в год, шт.	566–1132	283–425	28	29
5	Производительность печи, тн/год	40000–100000	10000–15000	4000	8000
6	Расход отопительного газа, м3/тн товара	120	250	100	150
7	Перепад температур по высоте камеры, ^{o}C	100	200–300	50	150
8	Максимальная температура обжига, ^{o}C	1150	800–1000	1000	1000

В туннельных печах отсутствует возможность обжига крупногабаритных углеграфитовых изделий, таких как подовые, анодные блоки, угольные электроды, печи имеют неравномерное температурное поле, высокий расход природного газа. Печи с выкатным подом, в основном, используются для обжига графитированных электродов крупных сечений и пропитанных заготовок. Печи с выкатным подом отличаются равномерным температурным полем, низким расходом газа, но имеют низкую производительность (табл. 1).

Обжиговые многокамерные печи Ридгаммера открытого и закрытого типа наиболее широко используются в мире для обжига углеграфитовой продукции. В России в основном используются многокамерные обжиговые печи закрытого типа (рис. 1).

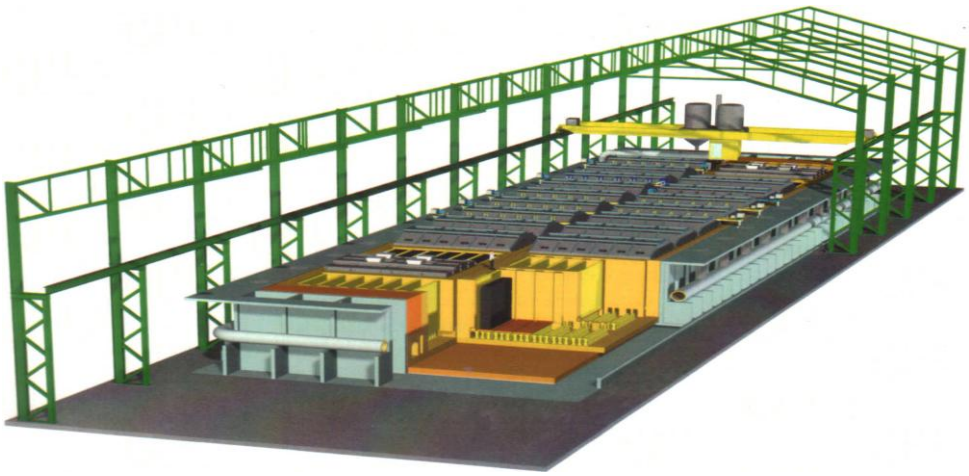


Рис. 1. Многокамерная печь Ридгаммера закрытого типа

Это универсальные, высокопроизводительные печи, в которых можно обжигать все виды углеродной продукции. Однако обжиговые печи закрытого типа имеют очень существенные недостатки – неравномерное температурное поле в объеме камер, высокий расход природного газа для отопления печи. В печах закрытого типа часть летучих веществ, содержащих смолистые канцерогенные углеводороды, не сгорают в печи, направляются на очистку в электрофильтры и частично выбрасываются в атмосферу, загрязняя окружающую среду.

Перепад температур по высоте камеры печи обжига закрытого типа составляет 200–300 ^{0}С (табл. 1), что отрицательно влияет на качество обожженных заготовок: увеличивается брак по трещинам по причине высоких термических напряжений в заготовке, снижается плотность, прочность, теплопроводность, увеличивается удельное электросопротивление, снижаются эксплуатационные свойства товарной продукции.

Из-за неравномерности температурного поля, в нижнем ряду камер печей обжига закрытого типа достигается температура не более 800 ^{0}С. По этой причине в нижних рядах камер невозможно обжигать такие виды продукции как анодные и катодные блоки алюминиевых электролизеров, температура обжига которых должна быть не менее 1000 ^{0}С. Только при температуре обжига не менее 1000 ^{0}С достигаются требования к качеству катодных блоков по удельному электросопротивлению и теплопроводности. При температуре обжига 800 ^{0}С для снижения удельного электросопротивления и повышения теплопроводности в рецептуру катодных блоков вводится большое количество графита, что значительно удорожает выпуск товарной продукции.

Многокамерные печи Ридгаммера открытого типа (рис. 2) в отличие от печей закрытого типа отличаются равномерным температурным полем, низким расходом отопительного газа, высокой температурой обжига и высокой производительностью [3]. Эти печи универсальны и могут использоваться для обжига всех видов углеродной продукции. Поэтому многокамерной печи обжига открытого типа становятся все более и более актуальными.

Рис. 2. Многокамерная печь Ридгаммера открытого типа

Многокамерная кольцевая печь Ридгаммера открытого типа состоит из 36 и более камер, расположенных в 2 ряда и соединенных между собой переходными каналами для последовательного прохождения потоков газа из одной камеры в другую [4].

Печь устанавливается в корпусе из железобетонных блоков. Стенки камер, греющих простенков и подины выкладываются из муллитокремнеземистых и шамотных огнеупорных изделий. Теплоизоляционный слой стенок камер и подины состоит из легковесных шамотных изделий и специальных теплоизоляционных материалов. Для выполнения кирпичной кладки используется огнеупорный цементный раствор. Огнеупорные материалы, применяемые для кладки печи должны быть устойчивы к термическим и химическим воздействиям.

Эффективная работа печи обеспечивается благодаря хорошей теплоизоляции и герметизации печи. Герметизация печи обеспечивает создание требуемого аэродинамического режима работы печи и позволяет точно выдерживать заданный режим обжига и максимальную температуру обжига, которая составляет 1200 ^{0}С в газовой фазе и не менее 1100 ^{0}С в загрузке камеры. Теплоизоляция печи обеспечивает минимальные потери тепла в окружающую атмосферу и высокий тепловой КПД печи.

Каждая камера печи разделена на несколько кассет (от 4 до 9 штук) и греющих простенков, количество которых на единицу больше количества кассет в камере. В стенах греющих простенков имеются щели для эвакуации летучих веществ из кассеты в простенок. Продукция загружается в кассеты камер и засыпается пересыпкой для защиты от окисления, сохранения формы заготовок и передачи тепла от теплоносителя к заготовкам.

Система отопления состоит из специальных температурных мостов с газовыми горелками, которые устанавливаются в лючки греющих простенков. Для создания равномерного температурного поля по высоте кассет, греющие простенки снабжены перегородками. Зигзагообразное дви-

жение продуктов горения газа в простенке обеспечивает существенное снижение перепада температур по сравнению с печами закрытого типа. В печах открытого и закрытого типа Ридгаммера в отличие от туннельных печей заготовки, загруженные в кассеты камер остаются неподвижными во время обжига, а температурная зона огня перемещается путем перестановки рамп с горелками.

Газ сжигается в горелках установленных в лючки греющих простенков трех камер системы огня, остальные 3 камеры находятся на подогреве отходящими газами (продуктами горения газа и летучих веществ). На охлаждении находятся 7–8 камер.

Последняя на подогреве камера с помощью отсасывающей трубы (элефанта) соединена с дымоходом, по которому дымовые газы отводятся из печи и поступают на очистку от смолистых летучих веществ в специальные электрофильтры. Удаление дымовых газов и создание разрежения в камерах обжиговой печи производится с помощью дымососа, установленного перед дымовой трубой.

На печи открытого типа предусмотрено принудительное охлаждение, прошедших обжиг заготовок, с помощью воздуходувных труб.

Контроль процесса обжига осуществляется по термопарам, установленным в лючках греющих простенков и в пересыпке кассет камер, а также по датчикам разрежения, установленным на пятой камере системы огня.

Применение современных газогорелочных устройств позволяет автоматизировать процесс ведения температурного режима обжига. В систему автоматического управления входят шкафы управления температурными мостами, отсасывающими трубами, вакуумными мостами и воздуходувками.

Сравнительный анализ тепловых балансов обжиговых печей открытого и закрытого типа приведен в таблицах 2, 3.

В соответствии с тепловым балансом, тепло для нагрева заготовок поступает от сжигания природного газа, горения летучих веществ, выделяющихся при коксовании каменноугольного пека-связующего, сгорания части пересыпки.

Таблица 2

Приход тепла на печах обжига открытого и закрытого типа

№№ п.п.	Приход тепла Статьи баланса	Приход тепла печь открытого типа		Приход тепла печь закрытого типа	
		Количество		Количество	
		Ккал/час	%	Ккал/час	%
1	Физическое тепло природного газа	573	0,03	730	0,04
2	Химическое тепло топлива	615213	29,23	739830	44
3	Физическое тепло материала	16330	0,78	29549	1,76
4	Тепло от сгорания летучих веществ	729300	34,65	319828	19
5	Тепло от сгорания пересыпки	275400	13,08	209043	12,2
6	Тепло воздуха на горение	467832	22,23	379242	23
7	ИТОГО	2104648	100	1678222	100

Большое количество тепла поступает также с воздухом, проходящим через камеры охлаждения для горения газа.

По данным таблицы 2 видно, что в печах закрытого типа максимальная часть тепла поступает от сгорания топлива. В печах открытого типа, по сравнению с печами закрытого типа максимальная часть тепла поступает от горения в греющих простенках камер смолистых летучих веществ. Более полное и эффективное сжигание смолистых летучих веществ приводит к снижению расхода топлива в печах открытого типа и уменьшению вредных выбросов в атмосферу. Тепло не сгоревших летучих веществ в печах закрытого типа значительно выше и составляет 9,8 %, по сравнению с 0,1 % для печи открытого типа (табл. 3).

Таблица 3

Расход тепла на печах открытого и закрытого типа

№№ п.п.	Расход тепла Статьи баланса	Расход тепла на печи открытого типа		Расход тепла на печи закрытого типа	
		Количество		Количество	
		Ккал/час	%	Ккал/час	%
1	Нагрев материала	668833	32	396623	23,4
2	Нагрев кладки	830285	39,1	604920	35,6
3	Потери с продуктами горения	406230	19,3	348334	20,6
4	Тепло на испарение летучих веществ	9776	0,5	13790	0,7
5	Тепло не сгоревших летучих веществ	1685	0,1	166768	9,8
6	Потери в окружающую среду	189438	9	167787	9,9
7	ИТОГО	2106247	100	1698222	100
8	Невязка баланса	1599		20000	

В печах открытого типа расход тепла на нагрев материала составляет 32 %, в то время как на печах закрытого типа 23,4 %. Это свидетельствует о более высоком тепловом КПД печей открытого типа (табл. 3).

Таким образом, печь обжига открытого типа является наиболее эффективной и экологически безопасной печью. Применение специальной программы управления процессом обжига обеспечивает полное эффективное сжигание летучих веществ, снижение расхода топлива, равномерное температурное поле, а следовательно, гарантированное качество углеграфитовой продукции. Равномерный нагрев при обжиге позволяет значительно сократить продолжительность графика обжига, увеличить производительность печи и сократить операционные и эксплуатационные расходы.

Библиографический список

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

2.Фиалков, А.С. Процессы и аппараты производства порошковых углеграфитовых материалов / А.С.Фиалков. – М.: Аспект Пресс, 2008. – 687 с.

3. Янко, Э.А. Углеродные аноды для алюминиевых электролизеров / Э.А.Янко. – М.: Изд. Дом «Руда и металлы», 2001. – 673 с.

4. Keller, F. Baking of anode / F.Keller, P.O.Sulger. – Calligraphy Sierre, Switzerland. – 2007. – 366 p.

К содержанию

УДК 665.637.8 + 665.652.2 + 665.6.035.6:665.775.4 + 665.7.035.3

СИНТЕЗ ПОЛИМЕРНО-БИТУМНЫХ ВЯЖУЩИХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ДОРОЖНОГО СТРОИТЕЛЬСТВА И ИЗУЧЕНИЕ ИХ ТОВАРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

К.Р. Смолякова, А.И. Шарова,
Н.А. Агапкина, А.Г. Баскакова, Г.Ф. Сафина

В ходе работы выявлено улучшение товарных характеристик битумных вяжущих материалов при их модифицировании стирол–бутадиен–стирольным термоэластопластом – полимером испанского производства и при модифицировании смесей отходом коксохимических производств, способным к полимеризации за счет содержания непредельных углеводородов. Проведено сравнение свойств нефтяных битумных смесей с добавками полимеров испанского, бельгийского и российского производства. По окончанию работы разработана рецептура модифицированного полимером битума. Полученные данные рекомендованы к внедрению на предприятиях дорожной, строительной отраслей и различных предприятиях по производству композиционных материалов.

Ключевые слова: битум нефтяной дорожный (БНД); полимерно-битумное вяжущее (ПБВ); эластомер; термопласт; термоэластопласт.

В течение многих лет нефтяные битумные материалы обеспечивали удовлетворительное качество в дорожном строительстве. Но неуклонный рост количества грузовых автомобилей и общих транспортных нагрузок создает сложные условия для эксплуатации автомобильных дорог, построенных на основе органических вяжущих материалов. Основная проблема, возникающая в связи с высокими осевыми нагрузками и большой интенсивностью движения – деформация асфальтобетонных покрытий автомобильных дорог, построенных с использованием широко применяемых нефтяных битумов.

Необходимость в надежных, долговечных дорогах и требования экономии сделали недостатки применяемых на сегодняшний день битумов очевидными.

Немодифицированные битумы показывают на практике следующие недостатки:

1) высокая термическая чувствительность (размягчение при высоких температурах и хрупкость при низких);

2) плохие механические характеристики и низкая упругость;

3) склонность к старению.

Ввиду этих недостатков, а также многих практических и экономических факторов, в течение последних 30 лет был проведен ряд исследований. Они продемонстрировали, что полимерные материалы являются лучшими модификаторами для улучшения технологических качеств битума.

Полученный модифицированный битум, образованный объединением обычного битума и полимера, обеспечивает более высокий уровень качества:

1) улучшение рабочих характеристик при высоких и низких температурах;

2) улучшение эластопластических характеристик;

3) повышенное усталостное сопротивление материала;

4) улучшение когезии и адгезии с наполнителями;

5) повышенное сопротивление старению.

Для улучшения свойств дорожных битумов, то есть их модификации имеется богатый выбор полимеров. Условно их можно классифицировать как термопласты (пластомеры); эластомеры и термоэластичные искусственные материалы.

Термопласты состоят из линейных или малоразветвленных полимеров, размягчающихся при нагревании. При охлаждении они снова становятся твердыми. Добавка пластомеров повышает вязкость и жесткость битумов при нормальных рабочих температурах (от –30 ˚С до 60 ˚С). Но пластомеры не оказывают влияния на эластичность битумов.

При нагревании битумов, улучшенных пластомерами, наблюдается тенденция к разделению фаз битума и полимера, то есть такие битумы неустойчивы к хранению. В качестве пластомеров чаще всего используются полиэтилен и атактический полипропилен.

Эластомеры состоят из длинных полимерных цепочек с широкими разветвлениями. Они эластичны в широком диапазоне температур: от низких до 200 ˚С.

При добавке эластомеров в битум повышается его вязкость, улучшается эластичность. Но эти системы также неустойчивы при хранении, для предотвращения разделения фаз между битумом и искусственным материалом требуется постоянное перемешивание. Битум, модифицированный эластомерами, можно назвать битумом с эластичным наполнителем. В качестве эластомеров принято использовать натуральный или регенерированный каучук и полибутадиены.

Термоэластичные искусственные материалы размягчаются при температурах выше обычных рабочих температур и хорошо деформируются в этом состоянии.

Самым известным представителем группы термоэластичных пластмасс является стирол-бутадиен-стирол (СБС). Этот искусственный материал представляет собой блоксополимер, состоящий из блоков стирола и полибутадиена.

Добавка этого материала к битуму составляет, как правило, от 3 до 6 % по массе.

Кроме полимеров для улучшения свойств битума могут использоваться другие модификаторы: неорганические соли (хлорид марганца), синтетические или природные смолы, а также природные асфальты [1].

Современное производство дорожных вяжущих материалов в России имеет ряд существенных отличий от аналогичных производств в других индустриально развитых странах. Следует отметить недостаточное развитие этой отрасли промышленности в нашей стране, то есть её несоответствие размерам территории и численности населения [2].

Целью работы являлось улучшение товарных качеств нефтяных битумов за счет их модификации полимером испанского производства (условное обозначение, принимаемое в статье – «ИСП-1»), являющимся стирол-бутадиен-стирольным термоэластопластом. Нефтяную смесь также модифицировали за счет добавления кислой смолки – отхода коксохимического производства ООО «Мечел–Кокс» (г. Челябинск), для улучшения адгезионной способности битума и в качестве добавки, увеличивающей выход материалов для дорожного покрытия без увеличения его стоимости.

Для полученных образцов полимерно-битумного вяжущего (ПБВ) проведен технический анализ, включающий определение пенетрации по ГОСТ 11501-78, температуры размягчения по ГОСТ 11506-73, дуктильности по ГОСТ 11505-75, температуры хрупкости по ГОСТ 11507-78, определение эластичности по п. 6.2 ГОСТ Р 52056-03, определение сцепления битума с минеральными материалами по ГОСТ 11508-74. Не все полученные образцы соответствовали по показателям маркам ПБВ по ГОСТ Р 52056-03, только четыре из шести образцов соответствовали маркам ПБВ 40 и ПБВ 60.

На основании полученных данных выявлены убедительные преимущества ПБВ по сравнению с немодифицированным БНД 90/130 (битумом нефтяным дорожным) (соответствующим ГОСТ 22245-90 и произведенным филиалом «Битумный завод» ОГУП «ЧЕЛЯБИНСКАВТОДОР») – в частности: повышение устойчивости к низким температурам (до – 25 ˚С), повышение температуры размягчения (до +71,5 ˚С), приобретение эластичности (до 92 % при 25 ˚С и до 75 % при 0 ˚С). Такими улучшенными характеристиками обладал образец с содержанием полимера «ИСП-1» в количестве 3 % и гудрона в количестве 10 % марки СДБ 20/40 (ТУ 0258-009-49247367 2005), производимого ООО «Салаватнефтеоргсинтез». Гудрон добавляли в качестве пластификатора для обеспечения максимально эффективной работы полимера в объе-

ме битума, создания условий для формирования улучшенных свойств образца и поддержания необходимой температуры хрупкости смеси.

Таким образом, можно сделать косвенное предположение, что применение синтезированного ПБВ взамен немодифицированных битумов позволяет повысить трещиностойкость покрытий дорог, мостов и аэродромов, следовательно, продлить сроки их службы и увеличить межремонтный период поверхностных обработок [3].

Для сравнения характеристик немодифицированного битума и синтезированного с добавлением испанского полимера выбраны смеси на основе БНД 90/130 со следующими полимерами: дивинилстирольным термоэластопластом марки «ДСТ-30Р-01» российского производителя ОАО «Воронежсинтезкаучук» по ТУ 38.40327-98 (партия 135) и полимером «Финапрен-411» бельгийской фирмы Petrofina [4–6]. Данные представлены в таблице 1.

Таблица 1

Характеристики битумных вяжущих смесей, полученных на основе БНД 90/130

Полимер	Концентрация полимера, масс. %	Температура размягчения по КиШ, °С	Пенетрация, 0,1 мм		Дуктильность, мм		Эластичность, %		Температура хрупкости, °С
			25°С	0°С	25°С	0°С	25°С	0°С	
БНД 90/130	0	+45	114	33	>100	5,3	–	–	–20
ИСП-1	3	+67	58	31	90	10,5	92	70	–24
ДСТ-30Р-01	3	+58	91	53	23	10	85	73	–25
Финапрен-411	3	+53	120	68	72	52	86	92	–21

Проанализировав результаты, представленные в таблице 1, можно сделать следующие выводы:

Все образцы полученные на основе окисленного битума БНД 90/130, соответствуют требованиям ГОСТ Р 52056-03 на полимерно-битумное вяжущее марок ПБВ 60, ПБВ 90 или ПБВ 40.

Наилучшие результаты получены при использовании стирол-бутадиен-стирольных модификаторов «ИСП-1» и «ДСТ-30Р-01». Данные полимеры значительно улучшают термостойкость, дуктильность и эластичность вяжущего при 25 °С и 0 °С.

Таким образом, все образцы полимерно-битумных вяжущих, полученных на основе компаундированных битумов, обладают хорошими низкотемпературными свойствами, хорошим показателем теплостойкости, высокой прочностью, эластичностью.

В ходе проведения исследований также изучена возможность использования кислой смолки в качестве адгезионной присадки к битуму. Эффективность данной добавки проверенна при проведении испытаний на сцепление с мрамором и гранитом по ГОСТ 11508-74.

В качестве сравнения проведен опыт на сцепление БНД 90/130 без добавок.

На основании полученных экспериментальных данных можно сделать следующие выводы:

1) при введении в образец кислой смолки увеличиваются адгезионные свойства по сравнению с немодифицированным БНД. Добавка, по-видимому, улучшает адгезию битума к минеральному материалу за счет изменения структуры вяжущего;

2) выявлено, что дополнительное введение полимера типа СБС в битумы, содержащие кислую смолку, позволяет также улучшить эксплуатационные свойства битумов;

3) так как кислая смолка является отходом коксохимического производства, отпадает необходимость применения дорогостоящих адгезионных присадок;

4) применение модификаторов на основе кислой смолки экономически целесообразно вследствие уменьшения расхода битума.

Проведенный анализ литературы и результаты экспериментальных исследований свидетельствует о преимуществах модифицированных полимерами битумных смесей по сравнению с обычными битумами, об этом свидетельствует повышение интервала работоспособности, приобретение свойств эластичности, что в конечном итоге, как мы предполагаем, обеспечит долговечность дорожных покрытий. В то же время обеспечение этих преимуществ требует усложнения технологической подготовки вяжущих, приводит к удорожанию вяжущего из–за высокой стоимости полимеров. При этом неизбежен значительный дополнительный расход энергоресурсов, необходимых для проведения всех технологических процессов при температурах на 15...25 ˚С выше, чем в случае традиционных битумов. Компенсация этих затрат может быть обеспечена за счёт удлинения межремонтных сроков дорожного покрытия и уменьшения объёмов ремонтных работ [7].

По окончанию работы разработана рецептура полимер-модифицированного битума. Полученные данные рекомендованы к внедрению на предприятиях дорожной, строительной отраслей и различных предприятиях по производству композиционных материалов.

Библиографический список

1. Полимерно-модифицированный битум. Технические аспекты, производство и материальное обеспечение. – URL: http://www.massenza.ru/MASSENZA_pmb.pdf.

2. Гуреев, А.А. Состояние и перспективы развития производства дорожных вяжущих материалов в России / А.А. Гуреев, А.А. Коновалов, В.В. Самсонов // Мир нефтепродуктов. Вестник нефтяных компаний. – 2008. – № 1. – С. 12–16.

3. Гохман, Л.М. Все начинается с битума / Л.М. Гохман, Е.М. Гурарий // Автомобильные дороги. – 2005. – № 5. – С. 34–37.

4. Информационный центр по автомобильным дорогам «Информавтодор». Автомобильные дороги. Полимерно-битумные вяжущие материалы на основе СБС для дорожного строительства. Обзорная информация. – http://norm–load.ru/SNiP/Data1/56/56236/index.htm.

5. 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.

6. Смолякова, К.Р. Модифицирование полимерами нефтяных дорожных битумов / К.Р. Смолякова, А.И. Бердимухамедова // Наука ЮУрГУ: материалы 65-й научной конференции. Секции естественных наук. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013. – С. 105–108.

7. Розенталь, Д.А. Битумы, основы получения и способы модификации / Д.А. Розенталь, А.В. Березникова, И.И. Кудрявцев. – Л.: Химия, 1979. – 148 с.

К содержанию

УДК 665.637.8 + 665.6.035.6:665.775.4 + 665.7.035.3

ВЛИЯНИЕ АДГЕЗИОННЫХ ДОБАВОК НА ТОВАРНЫЕ СВОЙСТВА НЕФТЯНЫХ ДОРОЖНЫХ БИТУМОВ

К.Р. Смолякова, А.И. Шарова,
Г.Ф. Сафина, М.А. Попова, А.О. Гаязова

В представленной научно-исследовательской работе показана возможность улучшения сцепления нефтяных дорожных битумов с кислыми минеральными материалами, используемыми в дорожном строительстве, за счет добавления в вяжущую смесь модификаторов российского производства. При внесении адгезионных добавок в битум выявлено сохранение эксплуатационных характеристик, что свидетельствует о допустимости применения присадок без ухудшения необходимых товарных характеристик битумных смесей и гарантирует удобоукладываемость дорожного покрытия при их использовании с сохранением диапазона работоспособности битумных смесей. Оптимальный количественный состав смесей рекомендован к внедрению в производство.

Ключевые слова: битум нефтяной дорожный (БНД); пенетрация; температура размягчения; температура хрупкости, адгезия.

В последнее время в связи с повсеместным расширением транспортной инфраструктуры приоритетной задачей является повышение качества и совершенствование технологии производства битума – необходимого компонента дорожных покрытий, являющегося продуктом переработки нефтяного сырья [1]. Улучшение адгезионных свойств дорожных битумов – одно из ключевых направлений для решения проблемы повышения эффективности и качества работ по строительству и ремонту дорожных асфальтобетонных покрытий.

Научно-исследовательская работа посвящена возможности получения качественных дорожных битумов путем их модифицирования адгезионными присадками и подбору рецепта для приготовления битумного вяжущего в соответствии с требованиями потребителей и является продолжением исследований, описанных ранее [2–4].

В рамках поставленной цели решали следующие задачи: изучить физико-механические свойства модифицированных образцов; сравнить свойства синтезированных смесей с выпускаемым битумом; разработать рецептуру битумных вяжущих смесей в соответствии с заданными свойствами.

В качестве объектов исследования взяты:

1) в качестве вяжущего вещества – дорожный битум марки БНД 90/130 (ГОСТ 22245) филиала «Битумный завод» ОГУП «Челябинскавтодор»;

2) адгезионные присадки российского производства, условно названные «ПР-1» и «ПР-2»;

3) щебень Бродоколмакского карьера Красноармейского ДРСУ.

Исследования проводили на базе лаборатории филиала «Битумный завод» ОГУП «ЧЕЛЯБИНСКАВТОДОР» и на базе лаборатории кафедры химической технологии ФГБОУ ВПО «ЮУрГУ» (НИУ).

Образцы битумных вяжущих смесей в ходе исследования готовили в соответствии со следующей методикой: битум, разогретый до текучего состояния, смешивали в заданных пропорциях с адгезионными присадками «ПР-1» или «ПР-2». Полученную смесь нагревали до 140 ºС и периодически перемешивали до получения однородной массы. Полноту однородности фиксировали визуально по наличию крупинок на поверхности расплавленной смеси. Равномерное распределение присадок в битуме является обязательным условием обеспечения высоких показателей сцепления битума с минеральным материалом. Методику синтеза, определение однородности и дальнейшие испытания разрабатывали на основе требований ГОСТ Р 52056-03.

Использовали методы испытания, описанные в стандартах:

– определение глубины проникания иглы (пенетрация) при 25 ºС – ГОСТ 11501-78;

– определение температуры размягчения по кольцу и шару – ГОСТ 11506-73;

– определение качества сцепления битумного вяжущего с поверхностью щебня в соответствии с ГОСТ 12801-98.

Наиболее распространенные виды разрушений асфальтобетонных покрытий происходят вследствие недостаточной адгезионной прочности на границе раздела между битумом и поверхностью минерального материала, таким образом, необходимо вводить в битум адгезионную присадку, что позволяет увеличить срок службы дорожных покрытий.

Так как для битумных вяжущих смесей требований в виде государственных стандартов по добавлению адгезионных добавок не разработано, соответствие свойств полученных смесей практическим требованиям при укладке дорог определяли по существующим требованиям к качеству сцепления битумного вяжущего с поверхностью щебня в соответствии с ГОСТ 12801-98. Физико-механические показатели синтезированных битумных смесей с различными присадками приведены в таблице 1.

Таблица 1

Физико-механические показатели синтезированных битумных смесей

Номер образца	Состав	Глубина проникания иглы, 0,1 мм (при 25°С)	Индекс пенетрации	Температура размягчения по КиШ, °С	Адгезия со щебнем
1	БНД 90/130 (без присадки)	100	–1,1	44	Плохая (два балла) – менее 1/2 поверхности материала покрыто смесью
2	БНД 90/130; 0,6 масс. % «ПР-1»	101	–1,0	44	Плохая (два балла)
3	БНД 90/130; 0,7 масс. % «ПР-1»	95	–1,3	44	Плохая (два балла)
4	БНД 90/130; 0,8 масс. % «ПР-1»	99	–1,1	44	Удовлетворительная (три балла) – более 1/2 и не менее 3/4 поверхности материала покрыто смесью
5	БНД 90/130; 0,6 масс. % «ПР-2»	99	–1,1	44	Удовлетворительная (три балла)
6	БНД 90/130; 0,7 масс. % «ПР-2»	99	–1,2	44	Хорошая (четыре балла) практически полное покрытие поверхности минерального материала
7	БНД 90/130; 0,8 масс. % «ПР-2»	99	–1,0	45	Хорошая (четыре балла)

По данным таблицы 1 можно сделать следующие выводы:

1. Показатели пенетрации (твердости) и температуры размягчения синтезированных смесей при добавлении присадок не изменились. Пенетрация, как известно, косвенно характеризует степень твердости битумов и чем выше пенетрация битума при заданной температуре размягчения, тем выше его теплостойкость. Пенетрация определяется по глубине проникания тела (иглы) стандартной формы в полужидкие и полутвердые продукты при определенном режиме, обусловливающем способность этого тела проникать в продукт, а продукта – оказывать сопротивление этому прониканию.

Температура размягчения характеризует термостойкость битума и заключается в определении температуры, при которой битум, находящийся в кольце заданных размеров, размягчается в подогреваемой воде и, опускаясь под тяжестью шарика, касается контрольного диска прибора.

Следовательно, постоянство параметров пенетрации и температуры размягчения свидетельствует о допустимости применения присадок без ухудшения необходимых товарных характеристик битумных смесей, что гарантирует удобоукладываемость дорожного покрытия с применением данных смесей и не приводит к уменьшению диапазона работоспособности битумных смесей.

2. Адгезия битумов более полно характеризует их консистенцию при различных температурах применения по сравнению с эмпирическими показателями, такими, как пенетрация и температура размягчения. Сцепление наиболее приближенно отражает поведение битумной смеси в реальных условиях и заключается в визуальном определении смачиваемости битумной смесью поверхности щебня после тридцати минутного кипячения образца в дистиллированной воде.

Необходимость применения данного вида присадок обусловлена кислой природой битума и щебня, что отрицательно сказывается на смачивании битумом поверхности щебня. Щебень, в свою очередь, выбран из-за своих прочностных характеристик.

Один из семи синтезированных образцов с содержанием присадки «ПР-1» в количестве 0,8 масс. % наиболее соответствует предъявляемому требованию покрытия поверхности минерального материала (образец номер 4). Образцы под номером 1, 2, 3 с содержанием 0 масс. %, 0,6 масс. %, 0,7 масс. % присадки «ПР-1» не удовлетворяет требованиям по адгезии. Следовательно, содержание адгезионной добавки «ПР-1» в количестве менее 0,8 масс. % в смеси обуславливает неудовлетворительные свойства адгезии этих образцов с минеральными веществами. Рецепт образца под номером 4 (0,8 масс. % «ПР-1») возможно применять в строительстве в связи с достаточным содержанием присадки в битумной смеси, обеспечивающим удовлетворительные адгезионные свойства. Все три из семи синтезированных образцов с содержанием присадки «ПР-2» в количестве 0,6 масс. % (образец номер 5) 0,7 масс. % (образец номер 6) и 0,8 масс. % (образец номер 7) соответствуют предъявленным требованиям.

Таким образом, как видно из экспериментальных данных к применению можно рекомендовать смеси со следующим процентным содержанием адгезионных добавок: исследуемую нами смесь с присадкой «ПР-1» в количестве 0,8 масс. %, и ещё более перспективную присадку «ПР-2», в том же количестве. Причем добавление присадок в количестве менее одного процента в базовой смеси битума не приведет к значительному увеличению стоимости дорожных смесей, а улучшение сцепления при добавлении присадок как товарной характеристики необходимо и обосновано с практической точки зрения.

По результатам работы можно дать рекомендации по синтезу битумных смесей. В таблице 2 приведен оптимальный процентный состав синтезированных образцов.

Таблица 2

Оптимальный процентный состав компонентов битумной смеси

Битум нефтяной дорожный марки БНД 90/130	Адгезионная присадка «ПР-1» или «ПР-2»
99,2 масс. % и менее	не менее 0,8 масс. %

Таким образом, в связи с улучшением физико-механических свойств битумной смеси при проведении исследований показана практическая возможность использования присадок российского производства, обозначенных как «ПР-1» и «ПР-2», в дорожном строительстве с целью повышения сцепления с минеральными компонентами применяемых смесей и, как следствие, увеличения срока службы дорожных покрытий.

Библиографический список

1. Капустин, В.М. Технология переработки нефти. В 2 ч. Ч. 2: Деструктивные процессы / В.М. Капустин, А.Л. Туреев. – М.: Изд-во Колос, 2008. – 334 с.

2. 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.

3. Смолякова, К.Р. Модифицирование полимерами нефтяных дорожных битумов / К.Р. Смолякова, А.И. Бердимухамедова // Наука ЮУрГУ: материалы 65-й научной конференции. Секции естественных наук. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013. – С. 105–108.

4. Смолякова, К.Р. Синтез и физико-механические свойства битумно-полимерных дорожных мастик / К.Р. Смолякова, Д.В. Белоусов, А.И. Шарова // Тенденции формирования науки нового времени: сборник статей Международной научно-практической конференции. 27-28 декабря 2013 г.: в 4 ч. Ч 4. – Уфа: РИЦ БашГУ, 2014. – С. 31–35.

К содержанию

УДК 631.95(470.55/.58)

ЭКОЛОГИЧЕСКОЕ НОРМИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ АГРОЭКОСИСТЕМ НА ЮЖНОМ УРАЛЕ

В.С. Зыбалов

Статья посвящена оптимизации пространственной структуры агроэкосистем на Южном Урале и их экологическому нормированию. Обсуждается возможность управления агроэкосистемами на основе адаптивного подхода. Приводится схема оптимизации основных параметров для обеспечения сейстанинга (самовосстановления) агроэкосистем.

Ключевые слова: оптимизация, пространственная структура, агроэкосистема, параметры, экологическое нормирование.

Агроэкосистема – экологическая система, объединяющая участок территории (географический ландшафт), занятый хозяйством, производящим сельскохозяйственную продукцию. В отличие от естественных экосистем, функциями эгроэкосистем управляет человек, затрачивая на это антропогенную энергию – дорогостоящую, экологически загрязненную и исчерпаемую [1, 2]. При этом даже в самых энергонасыщенных и интенсивных хозяйствах доля антропогенной энергии в общем балансе агроэкосистемы невелика и составляет не более 1 % [2]. Основу энергетического запаса агроэкосистемы, как и естественной, составляет солнечная энергия.

В настоящее время при внедрении в АПК энергосберегающих технологий особое место уделяется снижению антропогенной энергии и увеличению доли солнечной энергии в получении сельскохозяйственной продукции. Снижение вложений антропогенной энергии достигается за счет использования адаптивного подхода [3, 4].

Суть адаптивного подхода – максимизация окупаемости каждой единицы, вводимой в агроэкосистемы антропогенной энергии (обработки почвы, удобрений, семян, пестицидов). Он может быть реализован только при экологической оптимизации структуры агроэкосистемы хозяйства, что означает конструирование ее в соответствии с природным потенциалом и экономическими интересами хозяйства. В Челябинской области хозяйства в основном имеют растениеводческо-животноводческую специализацию. Поэтому здесь нужно одновременно оптимизировать структуру посевов сельскохозяйственных кормовых угодий, а так же поголовье скота [4].

Целью данной работы является разработка основных экологических параметров структуры агроэкосистем Южного Урала.

Схема оптимизации включает в себя трофическую и пространственную структуру агроэкосистемы, где главной задачей является обеспечение сестайнинга (самовосстановления) основных ресурсных показателей (воспроизводство почвенного плодородия, ЕКУ, восстановление гидрологических

и гидрохимических характеристик агроландшафтов и др.). Разумеется, сестайнинг возможен при постоянных субсидиях за ресурсы, которые выносятся с урожаем и животноводческой продукцией. Однако оптимизация агроэкосистемы предполагает минимизацию этой приплаты за счет активизации биологического потенциала систем на всех уровнях от растения или животного до АгрЭс в целом [5, 6]. Задачи оптимизации включают в себя различные показатели (рис. 1) [7, 8].

<table>
<tr><th colspan="5">Задачи оптимизации</th></tr>
<tr><th colspan="5">Анализ современного состояния агроэкосистем</th></tr>
<tr><th>Биологический потенциал</th><th>Пахотнопригодные земли</th><th>ЕКУ</th><th>Растениеводство</th><th>Животноводство</th></tr>
<tr><td colspan="5">Экологические нормативы агроэкосистем:
Соотношений сельскохозяйственных угодий;
Предельно допустимая крутизна склонов для пахотного использования;
Максимально допустимый размер поля;
Залесенность территории;
ПДМ-обеспеченность почв питательными элементами;
Структура посевных площадей;
Севообороты с соотношением почворазрушающих
и почвовосстанавливающих культур;
Соотношение растениеводства и животноводства;
Структура поголовья скота;
Рационы кормления животных</td></tr>
<tr><th colspan="5">Конструирование альтернативных вариантов оптимизированных агроценозов и агроэкосистем</th></tr>
</table>

Рис. 1. Основные показатели оптимизации структуры агроэкосистем

Рассмотрим наиболее существенные параметры агроэкосистем, которые определяют их функции, т.е. связи между элементами (пашней, ЕКУ, лесом, гидрологическим состоянием ландшафтов, поголовьем скота) и конечным результатом получения первичной растениеводческой и вторичной животноводческой продукции.

При рассмотрении каждого параметра автор придерживается следующей схемы. Значение параметра – его вариации в условиях агроэкосистем Южного Урала, экологические нормативы и пути их достижения. Большинство параметров нами разработано по принятым четырем природно-климатическим зонам Челябинской области. Параметры пространственной структуры агроэкосистем следующие:

- освоенность сельскохозяйственных угодий в пашню;
- облесенность территории;
- размер поля;

- естественные кормовые угодья и доля многолетних трав в структуре пашни;
- распределение пашни в соответствии с рельефом.

Как уже отмечалось ранее, без экологической оптимизации этих параметров не будут эффективными в сельскохозяйственном производстве вносимые субсидии антропогенной энергии в форме затрат на технику, горючее, удобрения, пестициды и т.д.

Площадь сельскохозяйственных угодий в Челябинской области составляет 56,6 % от всей площади земли; пашня занимает 62,5 %, естественные кормовые угодья – 37,5 %(за последние годы эти показатели неоднократно изменялись).

Средняя облесенность сельскохозяйственных угодий по области составляет 7,8 %, при этом в горнолесной зоне – 33 %, в северной лесостепи – 16 %, в южной лесостепи – 4,6 %, в степной зоне –1,8 %. Однако это общие данные, они не показывают чередование пашни и леса, что является одним из важнейших показателей регулирования микроклимата, гидрологического и биохимических режимов, размножение полезной этномофауны.

Важным нормативом является соотношение площадей естественных кормовых угодий, сеяных многолетних трав и пашни.

Динамика изменений сельскохозяйственных угодий за двенадцать три года представлена на рисунке 2.

Общая площадь сельскохозяйственных угодий уменьшилось на 461,3 тыс. га, в том числе, площадь пашни на 220 тыс. га, а площадь залежных земель возросла на 48,3 тыс. га, многолетних насаждений на 18,4 тыс. га и сенокосов на 46,2 тыс. га, а площадь пастбищ осталась без изменения.

Современная структура сельскохозяйственных угодий включает в себя пашни – 62,5 %, пастбища – 26 %, и сенокосы – 10 %. Однако 62,5 % пашни – это средние показатели по области. Для северной лесостепи доля пашни составляет 66 %, южной лесостепи – 72 %, степной зоны – 65 %, по отдельным хозяйствам южной лесостепной и степной агрозонам данный показатель достигает более 87 %.

Допустимая доля пашни определяется из возможности агроэкосистем выдержать интенсивный режим пахотного использования. Для лесостепной и степной агрозон доля пашни не должна превышать 70 % (табл. 1).

Достичь этого норматива сложно, так как пахотное использование почв наиболее выгодно.

В настоящее время в хозяйствах области происходит стихийная трансформация земель сельскохозяйственного пользования. Как правило, пашня забрасывается по организационным причинам или из-за отсутствия средств на их обработку [4].

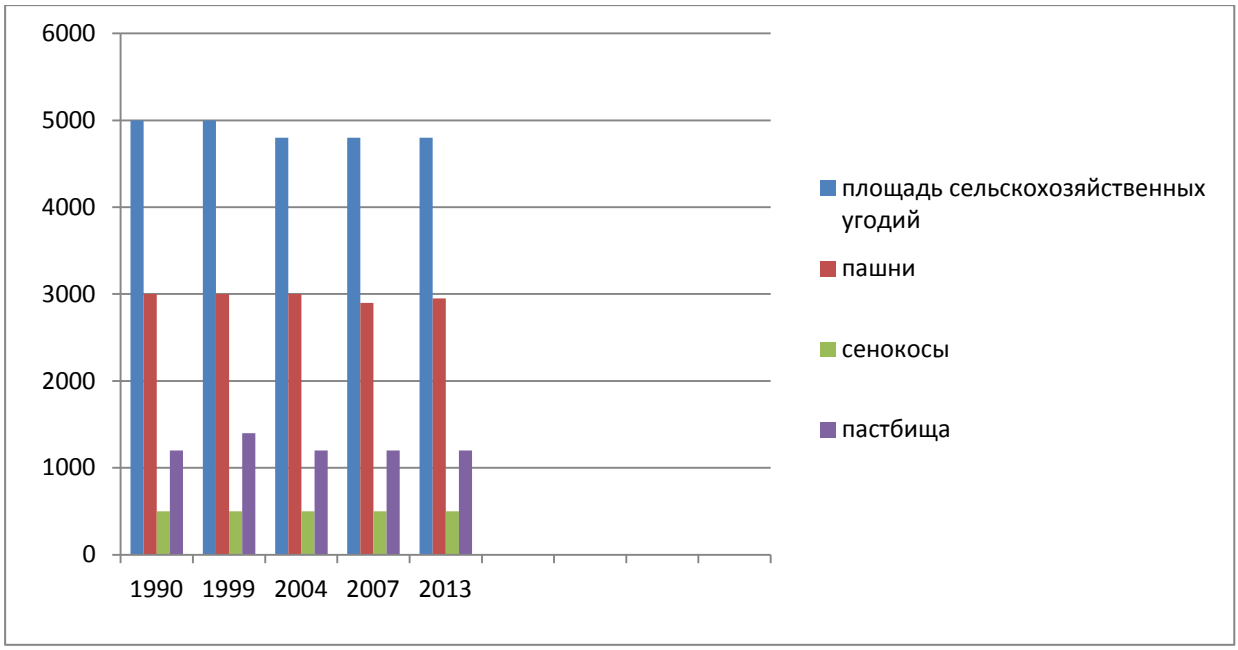


Рис. 2. Динамика изменений сельскохозяйственных угодий (1990–2013 гг.)

Таблица 1

Современное состояние (числитель) и экологические нормативы доли пашни в агроэкосистемах (знаменатель) по зонам Челябинской области

Зона	Пашня
Горнолесная	34/34
Северная лесостепь	66/60
Южная лесостепь	72/65
Степная	65/55

Другая часть выведена из оборота вполне обоснованно, это эродированное, загрязненные земли, солонцовые комплексы и др., что соответствует адаптивной организации агроэкосистем.

Указанный выше норматив определяет лишь максимальную допустимую долю пашни, при разном хозяйственном использовании он может быть изменен.

Однако норматив, который выделен по показателям эродированности и генетическому типу почв, в условиях равнинных степных ландшафтов может быть не достаточен до самовосстановления агроэкосистем, и поэтому для территорий с высокой освоенностью, плодородными почвами и равнинным рельефом, оптимальной структурой посевных площадей возможен повышенный норматив доли пашни, отражающий возможность агроэкосистем выдержать большие нагрузки. Во многих хозяйствах области он может снижаться ввиду широкого распространения солонцовых комплексов. При завышении доли пашни, возрастает антропогенная нагрузка на почвы, происходит ее быстрая деградация.

К параметрам пространственной структуры агроэкосистем относятся рельеф пахотных почв и размер поля.

По данным Челябинского филиала института «Уралгипрозем», на территории области земель с уклоном 1–3 градуса около 1,14 млн га, свыше 3 градусов около 500 тыс. га, то есть более 50 % пашни расположено на склонах. При почвозащитных севооборотах для культур сплошного сева и многолетних трав возможно использование склонов крутизной до 5 градусов. Все земли с крутизной свыше 5 градусов целесообразно залужать травами и переводить в дальнейшем в естественные кормовые угодья.

Размер поля – важный параметр, который определяет границы поля, его разделение лесополосами, лесными участками, широкими закраинами и тому подобное. В 1960–1970 гг. припашка таких полос поощрялась, так как вела к увлечению пахотно-пригодных земель.

При экологизации земледелия эти полосы не должны распахивать и вовлекать в пашню. Как считает Н.Ф. Реймерс (1989), размер поля как норматив является наименее разработанным показателем. В условиях Челябинской области размер поля в южных районах достигает 500–600 га, в северных не превышает 50–100 га.

Известно, что увеличение размеров поля диктовалось чисто экономическими подходами и более удобным использованием мощных тракторов типа К-700 с набором широкозахватных машин, поэтому многие лесные колки в степной и лесостепной зоне были выкорчеваны.

В экологизированном земледелии нормативом должен быть размер поля 100–200 га. Поля средних размеров 100–200 га оправданы экологически. В этом случае повышается общее биоразнообразие агроэкосистемы, и формируются системы полезных симбиотических связей, можно более рационально использовать структуру посевных площадей. Нарезка полей должна проводится в соответствии с требованиями адаптивно-ландшафтной системы земледелия.

Таким образом, разработанные и представленные в данной статье некоторые экологические параметры и нормативы пространственной структуры АгрЭС могут использоваться в дальнейшем для их оптимизации в рамках экологического императива для устойчивого развития сельскохозяйственных территорий Южного Урала.

Библиографический список

1. Болотов, А.Т. Избранные труды / А.Т. Болотов. – М.: Агропромиздат,1988. – 412 с.

2. Миркин, Б.М. Адаптивный подход как центральная задача экологически ориентированного управления функцией агроэкосистем / Б.М. Миркин, Р.М. Хазиахметов // Сельскохозяйственная биология. – 2001. – № 1. – С. 3–17.

3. Вражнов, А.В. Рекомендации по освоению адаптивно-ландшафтных систем земледелия в Челябинской области / А.В. Вражнов. – Челябинск: Анвик, 1996. – 36 с.

4. Пуртова, Г.И. Агроклиматические ресурсы Челябинской области / Г.И. Пуртова. – Л.: Гидролитиздат, 1977. – 244 с.

5. Зыбалов, В.С. Экологическая оптимизация структуры агроценозов и агроэкосистем Южного Урала / В.С. Зыбалов. – Челябинск: М-во сел. хоз-ва Рос. Федерации, 2001. – 185 с.

6. Докучаев, В.В. Наши степи прежде и теперь / В.В. Докучаев. – М.: Сельхозгиз, 1936. – 280 с.

7. Жученко, А.А. Проблемы адаптации в современном сельском хозяйстве / А.А. Жученко // Сельскохозяйственная биология. – 1993. – № 5. – С. 3–5.

8. Зыбалов, В.С. Экологическая оптимизация агроэкосистем – важный фактор устойчивого развития АПК Челябинской области / В.С. Зыбалов // Земледелие. – 2005. – № 5. – С. 4–5.

К содержанию

УДК 332.3:631.95(470.55/.58)

ВОЗМОЖНОСТИ УПРАВЛЕНИЯ УГЛЕРОДНЫМ БАЛАНСОМ В АСПЕКТЕ ЗЕМЛЕ- И ЛЕСОПОЛЬЗОВАНИЯ ЮЖНОГО УРАЛА

В.С. Зыбалов, Е.С. Кунгурова

В статье анализируется причина изменения климата на планете Земля. Приводятся материалы исследований и расчеты по управлению углеродным балансом на территории Челябинской области. Предлагаются меры по снижению стока углерода за счет сохранения и воспроизводства лесов, внедрение инновационных ресурсосберегающих технологий в сельском хозяйстве.

Ключевые слова: диоксид углерода, леса, пожары, земледелие, агроценозы.

Современный мир отличается сложностью и противоречивостью событий, он пронизан глобальными экологическими проблемами, полон сложнейших альтернатив, тревог и надежд. Поистине наша планета никогда ранее не подвергалась таким большим перегрузкам, какие она испытывает в настоящее время. Человек не взимал с природы столько дани и не оказывался столь уязвимым перед мощью, которую сам же создал.

Глобальное изменение климата на сегодняшний день затрагивает все страны, все народы, все живое, что связано с нашей планетой Земля. За последнее 30 лет количество стихийных бедствий (тайфунов, засух, наводнений и др.) увеличилось более чем в 2 раза [1].

Известно, что одной из причин изменения климата является рост концентрации парниковых газов (диоксида углерода, метана, фреонов, оксида азота и др.) в земной атмосфере.

Рамочная конвенция ООН об изменении климата, Киотский протокол и материалы конференции ООН по устойчивому развитию РИО-20 являются важным шагом мирового сообщества по разработке согласованных мер по предотвращению изменения климата [2].

Киотский протокол и итоговый документ конференции ООН по устойчивому развитию РИО-20 признает, что накопление углерода в лесных и сельскохозяйственных экосистемах может способствовать уменьшению концентрации парниковых газов в атмосфере, так как лес и сельскохозяйственные угодья поглощают CO_2 из атмосферы. В России расположено 35 % мировых природных ресурсов. Сельскохозяйственное землепользование занимает территорию 187,7 млн га, в том числе пашня 119,4 млн га. Площадь лесного фонда составляет почти 12 млн км^2, покрытых лесной растительностью земель около 8 млн км^2. Более 25 % мировых запасов древесины на корню сосредоточено в России. Основная часть лесов расположена в бореальном поясе и составляет около 60 % всех бореальных лесов мира и 95 % площади всех сомкнутых лесов России. Эти леса самое крупное «хранилище» углерода в мире. Ежегодное поступление углерода в лесах России составляет около 600 Мт/год, в том числе 200 Мт/год – чистый прирост детрита (мортмассы) [3, 4].

Расчеты показывают, что, если учесть суммарную эмиссию С-CO_2, связанную с болезнями, вредителями, пожарами в пределах 100 Мт/год, то даже в этом случае углеродный баланс в лесных экосистемах России будет положительный и достигнет около 500 Мт/год. Примерно столько же насчитывает промышленная эмиссия С-CO_2 в нашей стране. Таким образом, ежегодное накопление углерода только за счет леса полностью компенсирует его промышленную эмиссию.

Однако Российская Федерация располагает огромной территорией, и абсолютный запас углерода варьирует между регионами в зависимости от площади лесов, запаса древостоев, состояния сельскохозяйственных угодий, эмиссией парниковых газов. Для примера рассмотрим Челябинскую область.

Территория области занимает 88,3 тыс. км^2, в том числе земли сельскохозяйственного назначения – 5,0 млн га (56,6 %), лесного фонда – 2,7 млн га (31,1 %).

Регион разнообразен по природным условиям, включает районы от лесной зоны до южных степей. Леса области разделены на две группы. Леса I группы занимают площадь 2283,5 тыс. га (80,8%), леса II группы – 523,0 тыс. га (19,2 %). Общий запас древесины составляет 381,2 млн м^3, из них спелые и перестойные – 64,3 млн м^3.

Площадь пашни составляет 2,9 млн га, из них под посевами занято 86 % и 14 % ежегодно отводится под пар.

По нашим расчетам на всей территории лесного и сельскохозяйственного землепользования запас углерода в 2012 г. составил 3018,0 тыс. тонн, в том числе в живой фитомассе 2112,0 тыс. тонн и мертвой (детрите) 900,0 тыс. тонн. Челябинская область – высокоиндустриальная, в ней насчитывается более 15 тыс. промышленных предприятий и организаций и около 850 тыс. передвижных источников, которые обеспечивают выбросы парниковых газов в атмосферу. Общие выбросы от стационарных и передвижных источников в 2012 г. составили 1121,2 тыс. тонн. Даже при таких больших выбросах углеродный баланс в области положительный.

Вместе с тем, как в Челябинской области, так и в целом по Российской Федерации, имеются значительные возможности накопления углерода в лесных и сельскохозяйственных экосистемах, что способствует уменьшению концентрации парниковых газов в атмосфере, повышает степень устойчивости к изменению климата и стихийным бедствиям.

В секторе лесного хозяйства этому способствует проведение лесовосстановления, технического перевооружения лесокультурного производства, снижения ущерба от вредителей, болезней, лесных пожаров и др., за счет чего можно увеличить дополнительный приток из атмосферы $C\text{-}CO_2$ по области в пределах 80,4 тыс. тонн в год.

Расчеты баланса углерода для Челябинской области нами проводились по следующей методике:

$$dB(C) = NEP(C) - Cut - Burn - Pest - Waste - Fuel, \qquad [3]$$

где: dB(C) – баланс углерода в лесах региона (Челябинской области);

NEP(C) – суммарная чистая продукция углерода лесных экосистем в регионе;

Cut – вывоз (эмиссия) углерода древесины, заготовленной в результате рубок главного пользования, рубок ухода и прочих рубок;

Burn – эмиссия углерода древесины и подстилки, сгоревших во время лесных пожаров.

Наши расчеты показывают, что за счет снижения лесных пожаров можно увеличить сток углерода на 9,5 тыс. тонн год.

В таблице представлены материалы ущерба от пожаров за период 2009 – 2013 год, которые в среднем составили 4453891 тыс. рублей.

Как видно из таблицы общее количество возгораний в регионе за 5 лет составило 8848, на общей площади 74656,6 га. Лесные пожары приводят не только к уничтожению лесных экосистем, но и к значительной эмиссии углерода, древесины и подстилки.

Существенного увеличения секвестра $C\text{-}CO_2$ из атмосферы можно достичь на землях сельскохозяйственного пользования. Это переход сельского хозяйства к адаптивной интенсификации в свете новой парадигмы приро-

допользования. Внедрение инновационных ресурсосберегающих технологий возделывания сельскохозяйственных культур. Разработка и освоение адаптивно-ландшафтных систем земледелия и технологий. Уменьшить выброс парниковых газов можно за счет мер обеспечивающих предотвращения и развития эрозионных процессов, снижения загрязнения почв тяжелыми металлами, радионуклидами, создания лабильного органического вещества, конструирования оптимизированных агроценозов и агроэкосистем.

Таблица

Ущерб от лесных пожаров за 2009–2013 гг. (в Челябинской области)

Год	Кол-во пожаров	Общая S, га	В т.ч.		Средняя S одного пожара	Сумма ущерба, тыс. руб
			лесная	нелесная		
2009	2046	20144,0	10875,0	9269,0	9,8	1415691,5
2010	3517	13459,0	11643,0	1816,0	3,8	905499,4
2011	907	4596,1	4446,7	149,4	5,1	689573,7
2012	1961	34138,5	28853,8	5284,7	17,4	18259216,5
2013	417	2319,0	1930,0	389,0	5,6	999476,8
Итого за 5 лет:	8848	74656,6	57748,5	16908,1	41,7	22269457,9

Экологическая оптимизация агроэкосистем позволит установить такое соотношение между компонентами агроэкосистемы и пространственной структурой их размещения, при которой будет достигнуто приближение к сейстанингу, то есть к устойчивой самовоспроизводящей агроэкосистеме, что непременно скажется положительно на снижении поступления парниковых газов в атмосферу и позволит повысить уровень продовольственной безопасности как в регионе, так и по России в целом.

Не менее важным является создание оптимизированных агроценозов, в которых потеря элементов минерального питания и нарушение баланса органического вещества максимально могут компенсироваться за счет почвовосстанавливающих культур и оптимизации системы обработки под разные культуры. В таких агроценозах существенное значение для связывания углерода имеет использование многолетних трав и промежуточных культур как основного способа удлинения периода фиксации солнечной энергии и поликультур как сообщества, более активно использующего солнечную энергию и ресурсы почвы, чем чистые посевы. Наши многолетние исследования показали, что использование промежуточных культур и поликультур в севооборотах позволяют повысить коэффициент ФАР в 1,5 раза [5].

За счет экологизации земледелия можно увеличить сток углерода в атмосфере более чем на 30 %. Однако, для эффективного выполнения Киотского протокола и документов РИО-20 «Будущее которого мы хотим», как

средства сохранения глобального климата на землях лесного и сельскохозяйственного пользования необходимо разработать программу исследований по совершенствованию методов и систем учета парниковых газов. Где непременным условием должна быть оценка запасов углерода в наземный и подземной биомассе лесных и сельскохозяйственных экосистем.

Таким образом, для эффективного управления углеродным балансом в аспекте земли и лесопользования в Челябинской области должно проводиться рациональное воспроизводство лесов, защита их от пожаров, а также научно-обоснованное использование сельскохозяйственных угодий. Целесообразным является разработка совместных международных проектов по внедрению механизмов Киотского протокола на землях лесного и сельскохозяйственного пользования Южного Урала, а также создание системы ежегодного мониторинга на данной территории.

Библиографический список

1. Моисеев, Б.Н. Об оценке запаса и прироста углерода в лесах России / Б.Н. Моисеев, А.М. Алферов, В.В. Страхов // Лесное хозяйство. – 2000. – № 4. – С. 18–20.

2. Филипчук, А.Н. Вклад лесов России в углеродный баланс планеты / А.Н. Филипчук, Б.Н. Моисеев // Лесохозяйственная информация. – 2003. – № 1. – С. 27–34.

3. Зыбалов, В.С. Оптимизация агросистем как основа повышения плодородия почв Челябинской области / В.С. Зыбалов // Международный сельскохозяйственный журнал. – 2002. – № 5. – С. 50–54.

4. Зыбалов, В.С. Сб. ст. Устойчивое развитие Челябинской области / В.С. Зыбалов. – Челябинск: Изд-во Мин. по радиационной и экологической безопасности, 2011. – С. 76–78.

К содержанию

УДК 574.9:574.52

ОЦЕНКА ГИДРОХИМИЧЕСКИХ И ГИДРОБИОЛОГИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ КАЧЕСТВА ВОДЫ ОЗЕРА ИЛЬМЕНСКОЕ (ЧЕЛЯБИНСКАЯ ОБЛАСТЬ)

И.В. Машкова, А.М. Кострюкова, Т.Г. Крупнова

В данной работе представлены результаты оценки гидрохимических показателей, видового состава фитопланктона, макрофитной растительности и малакофауны озера Ильменское (Ильменский государственный заповедник). Озеро характеризуется достаточным биоразнообразием и высокой устойчивостью экосистемы. При изучении озер Южного Урала, подвергающихся антропогенному воздействию, его можно рассматривать как эталонное.

Ключевые слова: физико-химические характеристики, фитопланктон, брюхоногие моллюски, макрофиты.

Введение

На территории Челябинской области начитывается около 3710 озер. В сочетании с благоприятными климатическими условиями и живописной природой озера обладают большим рекреационным потенциалом.

Техногенная нагрузка на гидрологические экосистемы в настоящее время продолжает увеличиваться. Экологические характеристики природного (фонового) состояния большинства пресных озер Челябинской области исследованы недостаточно полно. Это в существенной мере затрудняет проведение адекватной оценки интенсивности и своеобразия техногенного загрязнения данной территории. В этой связи представляет интерес изучение экологических проблем озерных экосистем находящихся на охраняемых территориях (в заповедниках).

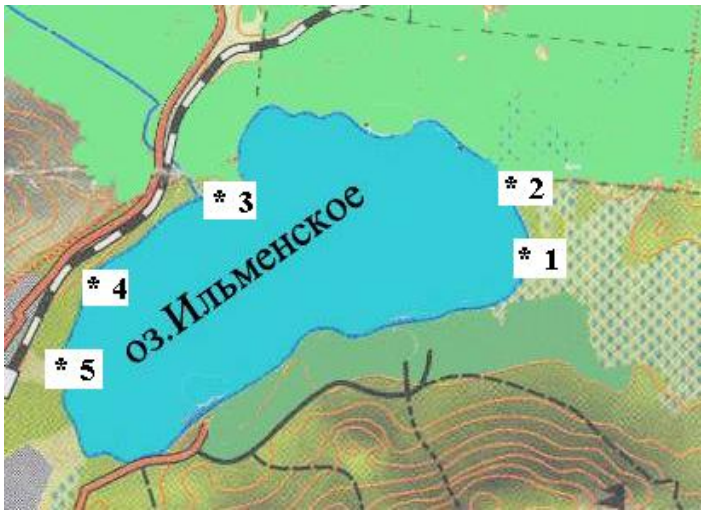
Характеристика объекта исследования и история его изучения

Нами было выбрано для исследования озеро Ильменское, которое расположено на южной границе Ильменского заповедника и находится на административной территории г. Миасса. Берега озера Ильменского примыкают к городской черте, на их водосборах расположены объекты рекреации, железная дорога, водоём испытывает антропогенный пресс.

Целью данной работы было исследовать гидрохимические и биологические характеристики различных частей акватории озера и оценить обусловленность возможных отличий существующей антропогенной нагрузкой либо природными факторами.

Материалы и методы исследования

Исследования проводили в июне-июле 2006–2012 гг. во время учебной практики на территории научной базы Ильменского государственного заповедника УрО РАН. Для проведения исследований были выбраны 5 станций в прибрежной зоне (рис. 1).



Точки пробоотбора озера Ильменское

При отборе проб использовали батометр в соответствии с общепринятыми для альгологических исследований методами. Сгущение осуществляли осадочным способом. Использовали световые микроскопы с увеличением в 600 и 1000 раз. Виды, разновидности и формы водорослей идентифицировали по отечественным и зарубежным определителям [1].

При проведении альгологических сборов и отборе проб воды определяли физико-химических параметры (температуру воды, прозрачность по диску Секки, запах, цвет). Пробы для гидрохимического анализа соответствовали требованиям ГОСТ Р 51592-2000. Активную реакцию воды измеряли в момент отбора проб портативным прибором. Температуру определяли ртутным термометром. Исследования выполняли по аттестованным методикам, рекомендованным для экологического мониторинга поверхностных вод в ранге ПНД Ф и РД 52.

В анализе макрофитной растительности озера использованы литературные данные [2].

Моллюски собирали с помощью скребка, драги либо вручную на мелководьях и путем смыва с растительности. Собранный материал фиксировали. Видовую диагностику гастропод производили по определителю [3].

Результаты и обсуждение

Полученные результаты химического анализа водоёма представлены в таблице 1. Выбранные станции довольно полно характеризуют состояние озера, поскольку расположены на территории основных загрязняющих объектов.

По большинству показателей качество воды колеблется между чистой и умеренно-загрязнённой. Повышенная цветность, содержание железа, а также окисляемость в точке 3 связаны с заболоченностью участка пробоотбора и поступлением веществ из вод реки Черемшанка, впадающей в озеро Ильменское.

Результаты исследования видового состава фитопланктона, малакофауны и макрофитной растительности приведены в таблице 2.

Таблица 1

Результаты химического анализа воды озера Ильменское

Показатель		Номера станций				
		1	2	3	4	5
pH	минимум	7,4	7,5	7,3	7,2	7,5
	максимум	7,6	7,8	7,6	7,7	7,7
Цветность, °град	минимум	34	30	52	42	32
	максимум	64	40	82	62	52
Жёсткость, ммоль/л	минимум	1,3	1,4	1,5	1,6	1,2
	максимум	1,8	1,7	1,8	2,3	2,0
Окисляемость, мгО/л	минимум	11,2	9,5	13,32	11,9	7,2
	максимум	12,8	18,9	24,4	22,4	18,0
Содержание растворённого кислорода, мг/л	минимум	6,4	7,4	4,9	7,0	6,7
	максимум	8,2	8,6	7,8	8,0	8,2
Содержание углекислого газа, мг/л	минимум	3,3	2,5	2,8	2,4	2,3
	максимум	3,5	2,6	3,2	2,6	2,6
Содержание нитритов, мг/л	минимум	0,006	0,008	0,020	0,010	0,009
	максимум	0,010	0,013	0,025	0,016	0,012
Содержание нитратов, мг/л	минимум	3,21	6,15	2,86	4,25	4,56
	максимум	4,20	7,17	3,96	6,19	5,27
Содержание ионов аммония, мг/л	минимум	0,14	0,16	0,15	0,24	0,18
	максимум	0,16	0,18	0,27	0,29	0,26
Содержание хлорид-иона, мг/л	минимум	10,2	13,2	14,6	13,3	12,9
	максимум	11,5	14,2	16,8	14,3	14,6
Содержание железа общего, мг/л	минимум	0,16	0,20	0,75	0,10	0,08
	максимум	0,25	0,46	1,64	0,34	0,11
Содержание ортофосфатов, мг/л	минимум	0,25	0,04	0,14	0,18	0,19
	максимум	0,34	0,12	0,56	0,25	0,27

За все время изучения обнаружено 44 вида микроводорослей. Таксономический состав водорослей озера Ильменское представлен в таблице 3.

В водоёме преобладали сине-зелёные (34 %), зелёные (29 %) и диатомовые (18 %) водоросли, что характерно для водоёмов умеренных широт. Основу доминирующих водорослей озера Ильменское составляют роды из отделов сине-зелёных: Anabaena, Gloeotrichia, Microcystis; диатомовых: Asterionella, Cymbella, Fragillaria; зелёных: Botrococcus, Coenococcusб Pediastrum, Volvox.

Для оценки трофности озера Ильменское использовали макрофитную растительность. По состоянию высшей водной растительности озеро относится к мезотрофным.

Таблица 2

Распределение встречаемости видов
различных организмов-биоиндикаторов по станциям

Количество встречаемых видов	Номер станции				
	1	2	3	4	5
Фитопланктон	25	28	13	21	20
Моллюски	9	8	8	3	4
Макрофиты	телорез, осока пузырчатая элодея канадская	кувшинка белая, элодея канадская, белокрыльник болотный	телорез, рогоз узколистый	стрелолист, элодея канадская	телорез, рдест узколистый

Таблица 3

Таксономический состав водорослей озера Ильменское

Отдел	Число таксонов			
	Класс	Порядок	Род	Вид
Cyanophyta	2	3	11	15
Dynophyta	1	1	2	3
Chrysophyta	1	1	1	2
Bacillariophyta	1	2	7	8
Clorophyta	3	4	10	13
Euglenophyta	1	1	2	3

Видовой состав моллюсков озера Ильменское представлен в таблице 4.

Таблица 4

Видовой состав доминирующих видов моллюсков озера Ильменское

Точка 1	Точка 2	Точка 3	Точка 4	Точка 5
Viviparus contectus	Viviparus contectus	Viviparus contectus	Viviparus contectus	Viviparus contectus
Planorbis carinatus	Planorbis vortex	Planorbis nitidus	Planorbis nitidus	Limnaea truncatula
Pisidium obtusale		Pisidium obtusale		Pisidium obtusale
		Bithynia tentaculata		

Заключение

Проведенные исследования свидетельствуют о том, что несмотря на существующую антропогенную нагрузку, для озера Ильменское характерно достаточное биоразнообразие и высокая устойчивость экосистемы. Данное озеро можно в дальнейшем рассматривать как эталонное при изучении различных процессов, протекающих в других водоемах, на которые оказывает влияние антропогенный фактор.

Библиографический список

1. Снитько, Л.В. Фитопланктон разнотипных озер Ильменского заповедника (Южный Урал): автореф. дис. … канд. биол. наук / Л.В. Снитько. – Сыктывкар, 2004. – 24 с.

2. Вейсберг, Е.И. Структура и динамика сообществ макрофитов озер Ильменского заповедника: монография / Е.И. Вейсберг. – Миасс: ИГЗ УРО РАН, 2009. – 122 с.

3. Определитель пресноводных беспозвоночных России и сопредельных территорий. В 6 т. Т. 6: Моллюски, Полихеты, Немертины / Я.И. Старобогатов, В.В. Богатов, Л.А. Прозорова, Е.М. Саенко. – СПб.: Наука, 2004. – 492 с.

К содержанию

ФИЛИАЛ В г. ОЗЕРСК

УДК 574.5:539.1.04 + 556.1:539.1.04

ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ РАДИОНУКЛИДОВ В ПРЕСНОВОДНЫХ ВОДОЕМАХ ЗОНЫ ВОЗДЕЙСТВИЯ ПО «МАЯК» И ИХ НАКОПЛЕНИЕ РЫБОЙ

А.И. Смагин, О.М. Сидоркина, М.А Тихонова

Приводятся результаты исследований особенностей поведения радионуклидов ^{90}Sr и ^{137}Cs в водных геосистемах. Обобщены и проанализированы многочисленные литературные и собственные имперические данные о накоплении радионуклидов в организме рыб. В результате исследований установлено, что уровни накопления ^{90}Sr и ^{137}Cs рыбой обратно пропорциональны концентрации в воде элементов аналогов – Са и К. Предложены расчетные значения коэффициентов концентрирования радионуклидов в организме рыб в случае радиоактивного загрязнения водоемов.

Ключевые слова: водные геосистемы, радионуклиды, рыба, коэффициенты концентрирования.

В последние десятилетия все больше внимания уделяется техносферной безопасности. Крупные аварии на промышленных предприятиях не редкость, включая и радиационные аварии на предприятиях ядерного топливного цикла. В мире растет объем информации о воздействии радиационного загрязнения на окружающую среду, в том числе и на водные экосистемы, загрязненные радионуклидами в результате аварий. Значимость подобного рода исследований несомненна, поскольку техногенные аварии на ядерных объектах не прекращаются, несмотря на совершенствование системы безопасности после аварии на ЧАЭС, это подтверждается недавней аварией на японской атомной станции Фукусима.

В современных исследованиях сведения о воздействии ионизирующего излучения на пресноводные экосистемы можно условно разделить на несколько основных направлений:

- изучение закономерностей поведения радиоактивных веществ в экосистемах водоемов;
- определение уровней дозового воздействия радиационного фактора на представителей гидроценозов;
- исследование биологических последствий действия на водные экосистемы радиационного, химического и теплового факторов;
- моделирование процессов, происходящих в экосистемах, и нормирование сбросов радиоактивных веществ в водоемы.

Информация о поведении и миграции радионуклидов в компонентах водной среды представлена наиболее полно, поскольку является ключевой для определения уровней дозового воздействия радиационного фактора на представителей гидроценозов, проведения исследований биологических последствий действия на водные экосистемы радиационного фактора и моделирования процессов, происходящих в экосистемах, а, следовательно, и разработке нормативов сбросов радиоактивных веществ в водоемы [1].

Впервые наиболее полно вопросы поведения радионуклидов в водоемах представлены в серии исследований, выполненных под руководством Н.В. Тимофеева-Ресовского на модели проточных водоемов [4]. Затем работы по изучению закономерностей поведения радионуклидов в биоценозах проводятся в Уральском научном центре РАН.

Длительное время работы по исследованию поведения радионуклидов в объектах окружающей среды проводили на модельных системах в лабораторных условиях, это касается, в первую очередь, периода до аварии на ЧАЭС (1986 г). Лабораторные эксперименты лишь частично отражают реальные процессы, происходящие в природных системах. В настоящее время работы, направленные на исследование поведения, миграции и биологического действия радиационного фактора в природной среде преобладают.

В пресноводных водоемах наблюдается сорбция большинства радионуклидов придонными взвесями и грунтами. Способность донных отложений в значительной степени накапливать радиоактивные вещества обуславливает резкое падение их концентрации с увеличением глубины грунтов и их особенно высокую концентрацию в верхних слоях на границе вода – ил. По классификации, предложенной Тимофеевой–Ресовской [4], по типу распределения можно выделить четыре группы радионуклидов:

- гидротропы (сера, хром, германий);
- эквитропы (кобальт, рубидий, стронций, рутений, радий, йод);
- педотропы (железо, цинк, иттрий, ниобий, торий, цезий);
- биотропы (фосфор, кадмий, церий, ртуть, уран).

Приведенная классификация условна, поскольку она отражает распределение ряда радионуклидов только для одной конкретной модели водоема, с изменением параметров модели можно ожидать изменение тропности отдельных радионуклидов.

Поступая в водную среду, радиоактивные вещества активно включаются в процессы трансформации вещества и энергии. Радионуклиды не оказывают существенного влияния на процессы, происходящие в экосистеме, хотя поведение самих радиоактивных веществ в значительной мере определяется данными процессами. На поведение самих радионуклидов в водной среде в значительной степени оказывают влияние микроэлементы – аналоги изотопов [1, 2, 4], их концентрация зачастую определяет коэффициенты концентрирования радиоактивных веществ в компонентах водной системы.

Исходя из санитарных правил [3], водоемы, расположенные на севере Челябинской области в зоне воздействия ПО «Маяк», по степени загрязнения рыбной продукции можно разделить на несколько групп см. таблицу.

Таблица

Относительные уровни загрязнения рыбы ^{90}Sr и ^{137}Cs

Водоем	Гидробионт (количество проб)	Отношение удельной активности рыбы к ДУ**		$(\frac{A}{H})^{90}Sr+(\frac{A}{H})^{137}Cs$	К/К	
		^{90}Sr	^{137}Cs		^{90}Sr	^{137}Cs
1. Иткуль	Плотва, окунь (5)	0,12	0,04	0,16	148	230
2. Аракуль	Пелядь (3)	0,09	0,02	0,11	138	90
3. Силач	Плотва (4)	0,09	0,02	0,11	100	115
4. Сунгуль	Плотва (4)	0,09	0,05	0,14	100	300
5. Киреты	Плотва, окунь (5)	0,09	0,03	0,12	100	160
6. Б. Касли	Плотва (7)	0,1	0,02	0,12	82	94
8. Иртяш	Плотва, лещ (12)	0,12	0,1	0,22	76	425
9. Б. Нанога	Лещ (7)	0,04	0,04	0,08	17	75
10. М. Нанога	Плотва (2)	0,02	0,01	0,03	8,3	14
11. Акакуль	Окунь (3)	0,01	0,02	0,03	4,6	99
12. Улагач	Линь (3)	0,31	0,2	0,51	94	375
14. Куяш	Плотва, окунь (5)	0,77	0,24	1,1	95	54
15. Б. Куяш	Пелядь (3)	0,03	0,1	0,13	169	351
16. Карагайкуль	Плотва (5)	0,22	0,25	0,47	120	163
17. Калды	Окунь (4)	0,37	0,46	0,83	337	600
18. Тептерги	Сиг (3)	1,0	0,11	1,1	248	238
19. Уелги	Пелядь (7)	0,05	0,5	0,2	56	98
Аргазинское водохранилище *)	Плотва (2)	0,008	0,004	0,012	169	28
Троицкое водохранилище *)	Карп (1)	0,00004	0,0002	0,00024	44	–

Примечание: * – контрольные водоемы, **ДУ – допустимые уровни

К первой группе относятся водоемы, в которых уровни относительной радиоактивности рыбы по (^{90}Sr + ^{137}Cs) не превышают 0,1. Это озера Б. и М. Нанога, Акакуль и контрольные – Аргазинское и Троицкое водохранилища. В этих водоемах уровни относительной радиоактивности обусловлены накоплением рыбой как ^{90}Sr, так и ^{137}Cs.

Во вторую группу могут быть отнесены озера, уровни относительного загрязнения рыбы в которых не превышают значений 0,2–0,5. Это озера Иткуль, Аракуль и Каслинский озерный каскад. В водоемах этой группы наибольший вклад в суммарное загрязнение рыбы вносит ^{90}Sr. В третью группу отнесены водоемы с максимальными уровнями радиоактивного загрязнения рыбы – Кажакуль (0,62), Алабуга (0,84), Куяш (1,1), Тептерги (1,1).

Среди множества факторов, определяющих накопление радионуклидов пресноводными гидробионтами, основными являются: концентрация в водной среде изотопных и неизотопных носителей; физико-химическое состояние радионуклидов в растворе и pH среды, температура воды и др. [1, 2].

Из приведенных в Таблице данных следует, что значения Кк для рыб из исследованных водоемов изменяются в широких пределах. На уровни концентрирования радиоизотопов водными животными определяющее влияние оказывают концентрации в водной среде элементов аналогов, причем уровни накопления ^{90}Sr и ^{137}Cs рыбой обратно пропорциональны концентрации в воде элементов аналогов – Ca и K. КК ^{90}Sr колеблется в пределах от 5 до 340, а ^{137}Cs от 14 до 600. Рассчитанное среднее значение КК ^{90}Sr равно 100, а ^{137}Cs – 200.

Заключение

В заключение необходимо отметить, что в настоящее время уровни загрязнения воды исследованных озер ^{90}Sr и ^{137}Cs ниже нормативных в 100–1000 раз. В большинстве водоемов уровни загрязнения рыбы долгоживущими радионуклидами не превышают значения, регламентируемые ОСПОРБ 99/2010, а в озерах Куяш, Алабуга и Тептерги загрязнение, практически, соответствует нормативу по верхнему пределу.

Проведенные нами обследования более чем 20 пресноводных водоемов, расположенных в районе воздействия ПО «Маяк», позволяют сделать выводы:

– значения коэффициентов концентрирования радионуклидов КК изменяются в широких пределах;

– на уровни концентрирования радиоизотопов водными животными определяющее влияние оказывают концентрации в водной среде элементов аналогов, накопление ^{90}Sr и ^{137}Cs рыбой обратно пропорционально концентрации в воде элементов аналогов - Ca и K;

– КК в рыбах, обитающих в зауральских озерах района воздействия ПО «Маяк», для ^{90}Sr колеблется в пределах от 5 до 340, а ^{137}Cs от 14 до 600;

– рассчитанное среднее значение КК для рыбы из водоемов зоны воздействия ПО «Маяк» для ^{90}Sr равно 100, а ^{137}Cs – 200.

Библиографический список

1. Смагин, А.И. Экология промышленных водоемов предприятия ядерного топливного цикла на Южном Урале/ А.И. Смагин. – Озерск. Редакционно-издательский центр ВРБ, 2007. – 190 с. Аврорин, Е.Н. О необходимости атомной энергетики / Е.Н Аврорин // Вестник УрО РАН. – 2002. – Вып. 1. – С. 24–27.

2. Смагин, А.И. Экология водоёмов в зоне техногенной радионуклидной геохимической аномалии на Южном Урале / А.И. Смагин. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013. – 206 с.

3. Постановление Главного государственного санитарного врача Российской Федерации от 26.04.2010 г. № 40 «Об утверждении санитарных правил и нормативов СП 2.6.1.2612-10 «Основные санитарные правила обеспечения радиационной безопасности (ОСПОРБ 99/2010)».

4. Тимофеева-Ресовская, Е.А. Распределение радиоизотопов по основным компонентам водоемов / Е.А. Тимофеева-Ресовская // Труды ин-та экологии раст. и жив. АН СССР УНЦ. – Свердловск, 1963. – Вып. 30. – С. 3–76.

К содержанию

ФИЛИАЛ В г. УСТЬ-КАТАВ

УДК 519.21

УПРАВЛЕНИЕ РЕЗЕРВОМ

Н.Г. Козлова

Исследуется сходимость последовательности стратегий подключения резерва к основному элементу на конечном промежутке времени к оптимальной стратегии на бесконечном промежутке времени.

Ключевые слова: оптимальная стратегия, резерв.

Объектом управления является динамическая система из k параллельно включенных элементов, один из которых основной. Цель управления – переход системы из начального состояния в конечное состояние за определенный промежуток времени. Начальное состояние: имеется R исправных элементов. Время T функционирования системы –полуинтервал $[0,\infty)$. В моменты времени $0=t_0<t_1<t_2<...<t_n<...$, где $t_{i+1}-t_i=\text{const}$, проверяется исправность элементов. По результатам проверки проводится управление резервом: если число исправных элементов оказалось равным $l, l\le R$, то в работу включают l_1 элементов, где $l_1\le l$. Резерв – холодный.

Введем целочисленную функцию $k(r,t)$. Эта функция равна числу исправных элементов, включаемых в начальный момент времени, если время равно и число исправных элементов равно r. Всякую функцию $k(r,t)$, определенную на конечном промежутке времени, доопределим на оставшемся бесконечном полуинтервале времени, положив равной нулю. На множестве S функций $k(r,t)$, определенных на $[0;\infty)$, введем метрику. Пусть $k_1(r,t), k_2(r,t)\in S$, тогда:

$$\rho(k_1,k_2)=\sum_{t=0}^{\infty}\frac{|k_1(1,t)-k_2(1,t)|+|k_1(2,t)-k_2(2,t)|+...+|k_1(r,t)-k_2(r,t)|}{2^t}.$$

Легко видеть, что аксиомы метрики выполняются.

Необходимо найти оптимальное управление резервированием на промежутке $[0;\infty)$. Функционал $M(T)$, характеризующий качество управления – это среднее время безотказной работы системы.

Справедливы следующие теоремы:

Теорема 1. Если последовательность стратегий $k_i(r,t)$ сходится на S, то найдется такой номер, начиная с которого все стратегии будут равны.

Теорема 2. Функционал $M_k(T)$ – среднее безотказной работы системы при стратегии включения элементов $k(r,t)$ – непрерывен на S.

Теорема 3. Из всякой последовательности стратегий $k_i(r,t)$ можно извлечь сходящуюся последовательность.

Теорема 4. Всякая сходящаяся последовательность оптимальных стратегий $k_{T_1}, k_{T_2}, ..., k_{T_n}, ...$ на промежутках $[0,T_1), [0,T_2), ..., [0,T_n), ...$ соответственно, где $T_1 < T_2 < ... < T_n < ...$, сходится к оптимальной стратегии k_∞ на $[0,\infty)$.

Библиографический список

1. Герцбах, И.Б. Динамическое резервирование. Управление включением резервных элементов / И.Б. Герцбах // Изв. АН СССР: Автоматика и вычислительная техника. – 1970. – № 1.

2. Пестов, Г.Г. Исследование оптимальных стратегий в задаче динамического резервирования / Г.Г. Пестов, Л.В. Ушакова // Изв. АН СССР: Техническая кибернетика. – 1973. – № 5.

3. Райкин, А.Л. Вероятностные модели функционирования резервированных устройств / А.Л. Райкин. – М.: Наука, 1971.

К содержанию

НАУКА ЮУрГУ

Материалы 66-й научной конференции

СЕКЦИИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Текстовое электронное издание

19,2 Мб
1 оптический компакт-диск

Компьютерная верстка электронной версии *Е.В. Федоровой*
Дизайн обложки диска *А.С. Шахрай*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано к использованию 06.08.2014.
Тираж 100 экз. Заказ 322.

454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76