Министерство образования и науки Российской Федерации
Южно-Уральский государственный университет

Ч48
Н34

НАУКА ЮУрГУ

Материалы 67-й научной конференции

СЕКЦИИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Челябинск
Издательский центр ЮУрГУ
2015

ББК Ч481.46.я43 + Ч215.1.я43
Н34

Оргкомитет 67-й научной конференции
Ваулин С.Д. (председатель), Рождественский Ю.В., Ульрих Д.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., Ганджа С.А., Классен А.Н., Волошина И.А., Ангеловский А.А., Демин А.А., Эрлих В.В., Окольнишникова И.Ю., Чванова Е.Е., Чуманов В.И., Довгалюк 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 67-й научной конференции. Секции естественных наук. – Электрон. текст. дан. (14,4 Мб). – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2015. – 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 67-й научной конференции профессорско-преподавательского состава, аспирантов и сотрудников, которая состоялась в апреле 2015 года.

Отпечатано с авторских оригиналов.

ББК Ч481.46.я43 + Ч215.1.я43

ISBN 978-5-696-04697-6

© Издательский центр ЮУрГУ, 2015

СОДЕРЖАНИЕ

ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

Алеев Р.Ж., Цыбина Н.А. Оценки и свойства числа делителей натуральных чисел..... 8

Иванова Е.В., Соколинский Л.Б. Декомпозиция операции группировки на базе распределенных колоночных индексов..... 15

Костенецкий П.С. Моделирование операции соединения, выполняемой на вычислительном кластере с гибридными узлами... 23

Дударева В.И., Панюкова А.А. Анализ поведения школьников в социальной сети на основе использования систем web-аналитики 29

Пьянков В.А. Модификация модели Неймана для четырёхсекторной экономической модели с выделенным центром управления..... 37

Тетин И.А. Управление инвестиционным портфелем страховой компании..... 43

Абдуллаев С.М., Напольских Е.А., Ленская О.Ю. К вопросу объективного определения случаев экстремального загрязнения городской атмосферы (на примере Челябинска) 49

Коржова М.Е., Коржов А.В. Построение вероятностной модели прогноза повреждаемости КЛ 6(10) кВ..... 59

Коржова М.Е., Марков Б.А. Фурье – представление кинетики химических реакций..... 63

Табаринцева Е.В. О выборе параметра регуляризации при решении нелинейных обратных задач..... 67

ФАКУЛЬТЕТ МАТЕМАТИКИ, МЕХАНИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК

Ушаков А.Л. Математическое моделирование деформаций пластин на упругих основаниях..... 75

Богонос Е.А., Шафранов Д.Е. Расщепление области определения эллиптического самосопряженного псевдодифференциального оператора в пространстве гладких дифференциальных k-форм, определенных на римановом многообразии без края..... 83

Бычков Е.В. Численное решение полулинейного уравнения соболевского типа высокого порядка..... 87

Загребин М.А. Исследование свойств сплавов гейслера Co_2CrAl в зависимости от искажения кристаллической структуры и степени беспорядка..... 92

Замышляева А.А., Цыпленкова О.Н. Математические модели на основе уравнения Буссинеска–Лява…….. 99
Ковалев Ю.М., Пигасов Е.Е. О некоторых модификациях метода крупных частиц на примере исследования течений газовзвесей…… 106
Ковалев Ю.М., Пигасов Е.Е. Математическое моделирование влияния паров воды на горение окиси углерода за ударными волнами 114
Клиначева Н.Л. Численное исследование инвариантности некоторых моделей многокомпонентных сред……. 121
Брагина А.А. К вопросу исследования асимптотической устойчивости динамических систем…….. 124
Волков С.А. Применение метода конечных элементов в задачах с существенной геометрической нелинейностью…… 128
Дияб А.Н., Дильман В.Л. О деформированном состоянии пластического слоя при его сжатии со скольжением по поверхности матрицы……. 132
Дрозин Д.А. Прогнозировние динамики спроса инновационного товара……. 141
Прокудина Л.А. Математическое моделирование состояния свободной поверхности неизотермической жидкой пленки…… 144
Адуков В.М., Фадеева А.С. Об эффективном критерии устойчивости частных индексов треугольной матрицы-функции второго порядка 150
Евдокимова Н.А. Решение одной задачи физической химии с использованием многопроцессорных систем……. 152
Заляпин В.И., Попенко Ю.С., Харитонова Е.В. Обращение дифференциального оператора с распределенными данными…… 154
Карачик В.В. Задача гурса для уравнения манжерона высокого порядка…….. 158
Катков М.Л. Аппроксимация неподвижной точки монотонного оператора……... 163
Комиссарова Д.А. Признаки устойчивости линейных разностных уравнений…….. 165
Кудрявцев К.Н. О равновесии Бержа-Парето…….. 167
Пермина А.Н. Интегральные уравнения обратной задачи прикладной биофизики……. 170
Медведев С.В. О свойствах h-однородных пространств……. 175
Абдрахимова Д.И. Реализация компетентностного подхода при составлении тестов текущего контроля у студентов инженерных направлений……... 177
Кочеткова Г.С. К вопросу о готовности студентов к научно-исследовательской деятельности…… 181
Орлова Е.С. Об организации разноуровневой работы студентов в группах…… 185

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Шульгинов А.А. Статистические закономерности выбросов активности радионуклида иттрий-90……. 192
Шульгинов А.А. Изучение фотоэффекта с помощью учебного комплекса МУК-ОК……. 197
Петров Ю.В., Гуревич С.Ю. Характеристики направленности продольных ультразвуковых волн, возбуждаемых в ферромагнитном металле импульсным лазером…… 201
Толипов Х.Б. Бесконтактное измерение скорости ультразвуковой волны на малой поверхности…….. 207
Кузнецов Г.Ф., Гуревич С.Ю., Клещев Д.Г., Лаврентьев С.И., Мирасов В.Ш. Способы повышения эффективности тепловых генераторов, использующих электрический разряд……. 213
Кузнецов Г.Ф., Гуревич С.Ю., Клещев Д.Г., Лаврентьев С.И., Мирасов В.Ш. Особенности электрического разряда в потоке электролита……... 216
Верховых А.В., Мирзоев А.А. DFT моделирование энергии формирования межфазной границы феррит-цементит…… 224
Воронцов А.Г. Структура атомных металлических комплексов…… 230
Дюрягина Н.С., Яловец А.П. Метод расчета электрофизических свойств нанокомпозиционных материалов……... 233
Мирзоев А.А., Вяткин Г.П. Атомистическое моделирование взаимодействия водорода с точечными дефектами в ОЦК-железе… 241
Вяткин Г.П., Морозов С.И. Распределение кобальта в поверхностных слоях $Ni_{20-x}Co_x$ моделирование из первых принципов…… 248
Поляков А.А. Оценка размерности Хаусдорфа некоторых фракталов из пятиконечных звезд……. 255
Ридный Я.М., Мирзоев А.А. AB-INITIO моделирование растворения углерода в решётке ОЦК-железа…… 262
Соболев А.Н., Булдашев И.В. Новый псевдопотенциал для расчета структуры и свойств систем на основе железа с помощью Первопринципного компьютерного моделирования…… 269
Созыкин С.А., Бескачко В.П., Вяткин Г.П. Адсорбция атомов LI и F на углеродной нанотрубке с двойной вакансией…… 275
Чирков П.В., Мирзоев А.А. Моделирование методом молекулярной динамики процесса упорядочения атомов углерода в ОЦК-Fe…….. 282
Яловец А.П. Широкодиапазонные коэффициенты эффективной теплопроводности порошковых материалов из сферических частиц в газе…….. 289
Старухин В.А., Мирзоев А.А. Вырождение потенциала погруженного атома на примере потенциала для железа…… 297

Тараненко П.А., Пирогова Н.С. Расчетно-экспериментальная оценка собственных частот высокооборотного ротора микрогазотурбинной установки…….. 305
Тараненко П.А., Телегин Д.В. Методика расчетной оценки плавности хода сочлененного трамвайного вагона на ранних стадиях проектирования…… 313

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Смолко В.А., Антошкина Е.Г. Химический и термогравиметрический анализ бентонитовых глин греческого и вайомингского (США) месторождений…… 321
Антошкина Е.Г., Смолко В.А. Влияние ультразвуковой обработки на вязкость суспензий глинистых минералов……... 328
Груба О.Н., Германюк Н.В., Рябухин А.Г. Структурные характеристики кристаллогидратов щелочноземельных металлов… 334
Юдина Е.П., Фролова А.В. Гидротермальный синтез оксигидроксидов иттрия как основы для получения катализаторов…… 337
Батист А.В., Фролова А.В., Богданов А.В. Анализ продуктов синтеза оксихлоридов иттрия при различных значениях pH…….. 342
Крупнова Т.Г., Машкова И.В., Кострюкова А.М. Селективный сбор отходов как способ реализации законодательных новелл в области обращения с опасными отходами……. 345
Крупнова Т.Г., Машкова И.В., Кострюкова А.М., Юдаков С.С. Применение оценки жизненного цикла в экологическом менеджменте технологий подготовки питьевой воды……. 349
Насибуллина С.Э., Булатова Л.М., Барташевич Е.В. Характеристики ковалентных и галогенных связей молекул йода в кластерном подходе 354
Дыскина Б.Ш., Салихов Д.А. Перспективы использования сернистых нефтяных коксов в технологии графитированной продукции…… 359
Нонишнева Н.П., Фролов А.В. Исследования в области разработки отечественной технологии получения изостатического графита…… 364
Варламова Т.В., Галимов Д.М., Жеребцов Д.А., Шамсутдинова К.Р. Процессы дегидратации в системе SnO_2–SiO_2 различного состава… 369

МАШИНОСТРОИТЕЛЬНЫЙ ФАКУЛЬТЕТ В г. МИАСС

Антропов И.И. Анализ тепловых процессов при высокоэнергетической поверхностной обработке металлов…… 374
Антропов И.И. Моделирование нагрева стальных изделий неравновесной газоразрядной плазмой…….. 380

Кориневская Г.Г. Особенности структуры титансодержащих стекол по данным спектроскопии комбинационного рассеяния…… 384
Петухов В.С. Гемеробиальность как метод расчета рекриацинной нагрузки растительных сообществ особо охраняемых природных территорий…… 391
Волкова Л.В. Рекомендации по внедрению системы экологического менеджмента на предприятии…… 398

ГЕОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ В г. МИАСС

Аминов П.Г., Удачин В.Н., Филиппова К.А., Лонщакова Г.Ф., Удачина Л.Г. Определение дебита поверхностных и скрытых водотоков с использованием химической метки и оценка тяжелометальной нагрузки р. Сак-Элга под воздействием кислых рудничных вод…… 403
Аюпова Н.Р., Белогуб Е.В., Блинов И.А. Селениды в зонах субмаринного и субаэрального окисления колчеданных месторождений Урала…….. 411
Зайков В.В., Баранников А.Г. Состав золота из россыпей Южного Урала и их коренные источники…… 417
Зайков В.В., Юминов А.М., Муфтахов В.А., Романенко М.Е. Александровское золоторудное поле (Южный Урал) ……. 425
Макагонов Е.П., Муфтахов В.А. Редкометалльная рудоносность гранитоидного Сыростанского массива (Южный Урал) …… 430
Масленников В.В., Целуйко А.С., С.П. Масленникова С.П. Применение метода ЛА-ИСП-МС для разработки минералого-геохимических критериев глубокой переработки сульфидсодержащих руд месторождений цветных, черных и благородных металлов……. 437
Сафина Н.П., Анкушева Н.Н. Баритовая минерализация из руд Сафьяновского колчеданного месторождения (Средний Урал): анализ условий образования……... 445

ФИЛИАЛ В г. УСТЬ-КАТАВ

Козлова Н.Г. Восприятие математической информации……. 452
Сафонов В.И., Миняева О.А. Математический анализ функциональных зависимостей вязкости биологических систем…... 455
Чернова Т.С. Решение задач «механики» нетрадиционным методом 461
Филатова Л.Ю., Филатова А.С. Развитие алгоритмического стиля мышления при обучении студентов вуза…… 466
Юдин С.Н., Шурупов Н.И. Облачные вычисления…….. 469

ФАКУЛЬТЕТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

УДК 511.317 + 511.352

ОЦЕНКИ И СВОЙСТВА ЧИСЛА ДЕЛИТЕЛЕЙ НАТУРАЛЬНЫХ ЧИСЕЛ

Р.Ж. Алеев, Н.А. Цыбина

Изучаются распределение числа делителей натуральных чисел на различных отрезках натурального ряда. Полученные свойства могут быть применены к изучению асимптотического поведения рангов групп центральных единиц целочисленных групповых колец некоторых классов конечных групп.

Ключевые слова: делители, число делителей, оценки числа делителей.

В предыдущей работе авторов [1] рассмотрены ранги групп центральных единиц целочисленных групповых колец конечных групп. В частности, приведённые там формулы для некоторых важных классов групп показывают, что количество делителей влияет на ранг группы центральных единиц целочисленного группового кольца конечной группы. В качестве примера приведём лемму 1.

Обозначение. Для натурального числа n пусть $\tau(n)$ – количество его натуральных делителей.

Лемма 1 ([2]). *Пусть G – циклическая группа порядка n. Тогда ранг группы единиц целочисленного группового кольца группы G равен:*

$$\left[\frac{n}{2}\right] - \tau(n) + 1 = \begin{cases} \dfrac{n+1}{2} - \tau(n) & \text{для нечетного } n, \\ \dfrac{n}{2} - \tau(n) + 1 & \text{для четного } n. \end{cases}$$

В лемме 1 есть «неинтересная» часть, вычисляемая легко по параметрам группы (а именно, для леммы 1 это $[n/2]$), и «интересная» часть, связанная с нахождением количества делителей некоторых чисел. Интерес ко второй части побуждается тем, что количество делителей числа напрямую не связано с данным числом. А именно, если $n = p_1^{\alpha_1} \dots p_k^{\alpha_k}$ – разложение числа в произведение степеней различных простых чисел (каноническое разложение), то количество делителей:

$$\tau(n) = (\alpha_1 + 1) \dots (\alpha_k + 1).$$

Итак, по лемме 1 для циклических групп нужно подсчитать число делителей натуральных чисел, что было проделано в диапазоне от 2

до $2^{25} = 33\,554\,432$. Отметим, что число делителей изменяется от 2 (это в точности простые числа) до 600 для 32 432 400. В табл. 7 из [1] указаны возможные $\tau(n)$, количество $o(\tau(n))$ таких $\tau(n)$ в рассматриваемом диапазоне для n и минимальное значение $n = m(\tau(n))$ с данными $\tau(n)$. Вычисления производились в системе GAP [3]. В частности в той таблице мы имеем следующие числа с $o\big(\tau(n)\big) = 1$ (табл. 1).

Таблица 1

Значения $\tau(n)$ с $o\big(\tau(n)\big) = 1$

$\tau(n)$	$m(\tau(n))$
17	2^{16}
19	2^{18}
23	2^{22}
85	5308416
91	2985984
95	21233664
152	27525120
170	26542080
231	18662400
245	29160000
308	26127360
350	22680000
440	31933440
486	31046400
560	25945920
600	32432400

В данной работе мы анализируем полученные данные с точки зрения соответствия теоретическим результатам из [4].

1. Оценки числа делителей

Выделим следующие промежутки:

$$I_0 = \big[2, 2^{25} = 33\,554\,432\big], \qquad I_1 = [\,2^{10} = 1\,024, 2^{25}],$$

$$I_2 = \big[\,2^{15} = 32\,768, 2^{25}\big], \qquad I_3 = \big[\,2^{20} = 10\,485\,76, 2^{25}\big],$$

Итак:

$$I_0 \supset I_1 \supset I_2 \supset I_3.$$

1.1. Отношение числа делителей к числу

Мы будем интересоваться, в каких пределах находится отношение $\tau(n)/n$. В силу бесконечности множества простых чисел (а более, точно в силу асимптотического закона распределения простых чисел) на любом

достаточно большом промежутке имеется простое число, поэтому ограничение снизу при возрастании нижней границы промежутка, будет стремиться к 0. Следовательно, на данном промежутке I интерес имеет только:

$$\max_{n\in I}\frac{\tau}{n}.$$

Отбросим тривиальные случаи $n \in \{1,2\}$, когда $\tau(n) = n$. Тогда имеем:

I	$\max_{n\in I}\frac{\tau}{n}.$	при n	I	$\max_{n\in I}\frac{\tau}{n}.$	при n
I_0	$3/4$	4	I_2	0,002597	36 960
I_1	0,02963	1080	I_3	0,000237	1 081 080

Из этого мы видим, что отношение числа делителей к числу уменьшается при возрастании нижней границы промежутка.

1.2. Оценки числа делителей сверху

Как было отмечено, число делителей на достаточно большом промежутке всегда ограничено снизу 2, поскольку на этом промежутке обязательно есть простое число. Следовательно, на данном промежутке I интерес имеют только оценки сверху.

Первый результат принадлежит Вигерту (Wigert, 1907 г.), приведен в теореме 317 на с. 345 в [4].

Лемма 2 ([4]). *Верхний предел:*

$$\lim_{n\to\infty}\sup\frac{(\ln\tau(n))(\ln\ln n)}{\ln 2} = \ln 2,$$

то есть, если $\varepsilon > 0$*, то:*

$$\tau(n) < 2^{(1+\varepsilon)\frac{\ln n}{\ln\ln n}},$$

для всех $n > n_0(\varepsilon)$ *и:*

$$\tau(n) > 2^{(1-\varepsilon)\frac{\ln n}{\ln\ln n}},$$

для бесконечно многих значений n.

В силу этого было интересно узнать колебания функции $\tau(n) - 2^{\frac{\ln n}{\ln\ln n}}$ н указанных промежутках I_0, I_1, I_2 и I_3. Однако оказалось, что:

$$\tau(n) - 2^{\frac{\ln n}{\ln\ln n}} \in [a, b],$$

где:

$$\alpha = -65{,}424512 \text{ при } n = 33\,554\,393,$$

$$b = 532{,}936455 \text{ при } n = 32\,432\,400.$$

Так как граничные значения достигаются на числах из I_3, то отсюда следует, что на всех промежутках I_0, I_1, I_2 и I_3 колебания находятся в *одинаковых* пределах.

Другой результат приведен в теореме 432 на с. 478 в [4].

Определение. Если количество чисел меньших n, которые не имеют свойство, составляет $o(n)$ при $n \to \infty$, то мы скажем, что *почти все целые числа* имеют свойство.

Лемма 3 ([4])**.** *Если* $\varepsilon > 0$, *то:*

$$2^{(1-\varepsilon)\ln\ln n} < \tau(n) < 2^{(1+\varepsilon)\ln\ln n},$$

для почти всех целых чисел n.

Таким образом, $\tau(n)$ равен «обычно» примерно:

$$2^{\ln\ln n} = (\ln n)^{\ln 2} = (\ln n)^{0{,}693147}.$$

В отличие от предшествующего результата здесь мы говорим об оценках для почти всех n, а не для всех n. Снова интересно узнать колебания функции $\tau(n) - 2^{\ln\ln n}$ на указанных промежутках I_0, I_1, I_2 и I_3. Однако оказалось, что:

$$\tau(n) - 2^{\ln\ln n} \in [c, d],$$

где:

$$c = -5{,}221822 \text{ при } n = 33\,554\,393,$$

$$d = 592{,}788006 \text{ при } n = 32\,432\,400.$$

Опять, так как граничные значения достигаются на числах из I_3, то отсюда следует, что на всех промежутках I_0, I_1, I_2 и I_3 колебания находятся в одинаковых пределах.

Замечание. Следует обратить внимание на два обстоятельства.

1. Промежутки $[a, b]$ и $[c, d]$ весьма близки длине:

$$\text{длина } [a, b] \text{ равна } 598{,}360968,$$

$$\text{длина } [c, d] \text{ равна } 598{,}009827.$$

Да и границы тоже не сильно различаются, если учесть, что рассматриваются числа на промежутке $[2, 2^{25} = 33\,554\,432]$.

2. Еще более удивительно, что границы достигаются при *одинаковых* значениях n. Нижняя граница достигается при $33\,554\,393$ – *простое число, наибольшее из простых на промежутке* $[2, 2^{25} = 33\,554\,432]$.

Из таблицы 1 следует, что верхняя граница достигается при $32\,432\,400 = 2^4 * 3^4 * 5^2 * 7 * 11 * 13$ – *число, имеющее наибольшее число делителей, равное* 600, *на промежутке* $[2, 2^{25} = 33\,554\,432]$.

2. Оценка числа делителей в среднем

2.1. Средний порядок числа делителей

Если $f(n)$ – арифметическая функция и $g(n)$ какая-то функция n, для которой:

$$f(1) + f(2) + \cdots + f(n) \sim g(1) + g(2) + \cdots + g(n),$$

мы будем говорить, что $f(n)$ имеет средний порядок (the average order) функции $g(n)$.

На с. 347 в [4] приведены следующие результаты.

Лемма 4 ([4], Теорема 319)**.** *Средним порядком* $\tau(n)$ *является* $\ln n$.

Приведём вычисления среднего порядка для некоторых чисел, а именно, рассмотрим степени 2, а также для тех чисел на промежутке $[2, 2^{25} = 33\,554\,432]$, у которых число делителей встречается всего 1 раз (табл. 2). Последнее обстоятельство связано с тем экстремальным свойством, которое было отмечено в конце предыдущего раздела.

Таблица 2

n	$\tau(n)$	$\ln n$	$\tau(n) - \ln n$	n	$\tau(n)$	$\ln n$	$\tau(n) - \ln n$
2	2	0, 693147	1, 306853	5 308 416	85	15, 484804	69, 515196
4	3	1, 386294	1, 613706	2 985 984	91	14, 909440	76, 090560
8	4	2, 079442	1, 920558	21 233 664	95	16, 871098	78, 128902
16	5	2, 772589	2, 227411	27 525 120	152	17, 130610	134, 869390
32	6	3, 465736	2, 534264	26 542 080	170	17, 094242	152, 905758
64	7	4, 158883	2, 841117	18 662 400	231	16, 742021	214, 257979
128	8	4, 852030	3, 147970	29 160 000	245	17, 188308	227, 811692
256	9	5, 545177	3, 454823	26 127 360	308	17, 078494	290, 921506
512	10	6, 238325	3, 761675	22 680 000	350	16, 936994	333, 063006
1 024	11	6, 931472	4, 068528	31 933 440	440	17, 279164	422, 720836
2^{11}	12	7, 624619	4, 375381	31 046 400	486	17, 250993	468, 749007
2^{12}	13	8, 317766	4, 682234	25 945 920	560	17, 071525	542, 928475
2^{13}	14	9, 010913	4, 989087	32 432 400	600	17, 294668	582, 705332
2^{14}	15	9, 704061	5, 295939				
2^{15}	16	10, 397208	5, 602792				
2^{16}	17	11, 090355	5, 909645				
2^{17}	18	11, 783502	6, 216498				
2^{18}	19	12, 476649	6, 523351				
2^{19}	20	13, 169796	6, 830204				
2^{20}	21	13, 862944	7, 137056				
2^{21}	22	14, 556091	7, 443909				
2^{22}	23	15, 249238	7, 750762				
2^{23}	24	15, 942385	8, 057615				
2^{24}	25	16, 635532	8, 364467				
2^{25}	26	17, 328680	8, 671320				

Результаты вычислений для степеней 2 наводят на мысль о некой регулярности таких чисел. На самом деле это имеет место, но прежде введём обозначение.

Обозначение. Пусть p – простое, а m – неотрицательное цельное число. Тогда обозначим:

$$\delta(p,m) = \tau(p^m) - \ln p^m.$$

Сразу же отметим, что:

$$\delta(p,0) = 1.$$

Теперь результат, о котором шла речь, несмотря на простоту, он представляется весьма любопытным.

Теорема. *Пусть p – простое, а m – неотрицательное целое число. Тогда:*

$$\delta(p,m) = \tau(p^m) - \ln p^m = 1 + m(1 - \ln p).$$

Поэтому $\{\delta\ (p,m)\}_{m=0}^{\infty}$ – арифметическая прогрессия с начальным членом 1 и разностью $1 - \ln p$. Кроме того, $\{\delta\ (2,m)\}_{m=0}^{\infty}$ – возрастающая прогрессия, а при нечетных p прогрессия $\{\delta\ (p,m)\}_{m=0}^{\infty}$ убывает, причем:

1) *все члены $\{\delta\ (2,m)\}_{m=0}^{\infty}$ положительны;*

2) *при $p \geq 11$ в прогрессии $\{\delta\ (p,m)\}_{m=0}^{\infty}$ положителен только начальный член $\delta(p,0) = 1$;*

3) *при $p \in \{3,5,7\}$ в прогрессии $\{\delta\ (p,m)\}_{m=0}^{\infty}$ положителен начальный член $\delta(p,0) = 1$ и*

$$\delta(3,1) = 0{,}901388, \quad \delta(3,2) = 0{,}802775, \quad \delta(3,3) = 0{,}704163,$$

$$\delta(3,4) = 0{,}605551, \quad \delta(3,5) = 0{,}506939, \quad \delta(3,6) = 0{,}408326,$$

$$\delta(3,7) = 0{,}309714, \quad \delta(3,8) = 0{,}211102, \quad \delta(3,9) = 0{,}112489,$$

$$\delta(3,10) = 0{,}013877, \quad \delta(3,11) = -0{,}084735,$$

$$\delta(5,1) = 0{,}390562, \quad \delta(5,2) = -0{,}218876,$$

$$\delta(7,1) = 0{,}054090, \quad \delta(7,2) = -0{,}108180.$$

Доказательство. В самом деле:

$$\delta(p,m) = \tau(p^m) - \ln p^m = m + 1 - m\ln p = 1 + m(1 - \ln p)\,.$$

Так, при нечетном p будет $1 - \ln p < 0$, то про монотонность все понятно.

Так как:

$$e^2 = 7{,}389056098930650227230427460575,$$

то при $p \geq 11$:

$$\delta(p, 1) = 2 - \ln p < 0,$$

и в этом случае в прогрессии положителен только начальный член. Все остальное получается непосредственными вычислениями.

2.2. Теорема Дирихле

Значительно более точным по сравнению с леммой 4 результатом является следующая классическая теорема Дирихле.

Лемма 5 ([4], Теорема 320):

$$S_n = \tau(1) + \tau(2) + \cdots + \tau(n) = n \ln n + (2\gamma - 1)n + O\left(\sqrt{n}\right),$$

где $\gamma = 0,57721566490153286060651209008240$ – *константа Эйлера.*

Обозначения. Пусть n – натуральное число. Тогда обозначим:

$$S_n = \tau(1) + \tau(2) + \cdots + \tau(n), \alpha(n) = \frac{S_n}{n},$$

и

$$\lambda(n) = \ln n + (2\lambda - 1).$$

Из леммы 5 сразу получаем следующий результат.

Следствие. $\alpha(n) = \lambda(n) + o(\frac{1}{\sqrt{n}})$.

Следующая таблица (табл. 3) показывает насколько близки $\alpha(n)$ и $\lambda(n)$.

Таблица 3

n	S_n	$\alpha(n)$	$\lambda(n)$	$\alpha(n) - \lambda(n)$
2^5	119	3,71875	3,620167	0,098533
2^{10}	7257	7,086914	7,085903	0,001011
2^{15}	345780	10,552368	10,551639	$7{,}291259 * 10^{-4}$
2^{20}	14698337	14,017426	14,017374	$5{,}154978 * 10^{-5}$
2^{25}	586636093	17,48312	17,483111	$7{,}124042 * 10^{-6}$

Библиографический список

1. Алеев, Р.Ж. Вычисление рангов групп центральных единиц целочисленных групповых колец конечных групп / Р.Ж. Алеев, Н.А. Цыбина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Вычислительная математика и информатика». – 2015. – № 1. – С. 71–85.

2. Aleev, R.Z. Higman's central unit theory, units of integral group rings of finite cyclic groups and Fibonacci numbers numbers / R.Z. Aleev // Intern. Journ. Algebra and Computations. – 1994. – Vol. 4. – Pp. 309–358.

3. The GAP Group, GAP – Groups, Algorithms, and Programming, Version 4.7.4. – 2014.

4. Hardy, G.H. An Intoduction to the Theory of Numbers, Sixth Edition / G.H. Hardy, E.M. Wright // Oxford University Press. – 2008. – 656 p.

К содержанию

УДК 004.657

ДЕКОМПОЗИЦИЯ ОПЕРАЦИИ ГРУППИРОВКИ НА БАЗЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ КОЛОНОЧНЫХ ИНДЕКСОВ

Е.В. Иванова, Л.Б. Соколинский

Статья посвящена вопросу декомпозиции реляционной операции группировки на основе распределенных колоночных индексов с доменно-интервальной и транзитивной фрагментацией. Такая декомпозиция позволяет организовать эффективное параллельное выполнение запросов к сверхбольшим базам данных на современных кластерных вычислительных системах, оснащенных многоядерными ускорителями.

Ключевые слова: сверхбольшие базы данных, параллельная обработка запросов, колоночные индексы, доменно-интервальная фрагментация, транзитивная фрагментация, декомпозиция реляционных операций, операция группировки.

Введение

В настоящее время фактически единственным эффективным решением проблемы хранения и обработки сверхбольших баз данных является использование параллельных систем баз данных, обеспечивающих распределенную обработку запросов на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью [1–5].

В последние годы основным способом наращивания производительности процессоров является увеличение количества ядер, а не тактовой частоты, и эта тенденция, вероятно, сохранится [6]. Сегодня GPU (Graphic Processing Units) и Intel MIC (Many Integrated Cores) значительно опережают традиционные процессоры в производительности по арифметическим операциям и пропускной способности памяти, позволяя использовать сотни процессорных ядер для выполнения десятков тысяч потоков. Последние исследования показывают, что многоядерные ускорители могут эффективно использоваться для обработки запросов к базам данных в оперативной памяти [7–9].

В соответствие с этим актуальной является задача разработки новых эффективных методов параллельной обработки баз данных в оперативной памяти на современных многопроцессорных вычислительных системах с многоядерными ускорителями. Для решения этой задачи в работах [10, 11] были предложены индексные структуры специального вида, которые называются распределенными колоночными индексами. Распределенные колоночные индексы позволяют провести декомпозицию реляционных операций, допускающую их эффективное параллельное выполнение на кластерных вычис-

лительных системах с многоядерными ускорителями. В данной работе рассмотрен вопрос декомпозиции реляционной операции группировки. Для обозначения реляционных операций в статье используется нотация, заимствованная из монографии [12].

1. Колоночный индекс и доменно-интервальная фрагментация

Под $R(A,B_1,\ldots,B_u)$ будем понимать отношение R с *виртуальным ключом* A (виртуальным идентификатором целочисленного типа, однозначно определяющим кортеж) и атрибутами $B_1,\ldots,B_u$, представляющее собой множество кортежей длины $u+1$ вида $(a,b_1,\ldots,b_u)$, где a – целое неотрицательное число, и $\forall j\in\{1,\ldots,u\}\left(b_j\in\mathcal{D}_{B_j}\right)$. Здесь $\mathcal{D}_{B_j}$ - домен атрибута B_j. Через $r.B_j$ будем обозначать значение атрибута B_j, через $r.A$ – значение виртуального ключа в кортеже r: $r=(r.A,r.B_1,\ldots,r.B_u)$. *Виртуальный ключ* отношения R обладает свойством $\forall r',r''\in R\left(r'\neq r''\Leftrightarrow r'.A\neq r''.A\right)$. Под *адресом кортежа* r мы будем понимать значение первичного ключа этого кортежа. Для получения кортежа отношения R по его адресу будем использовать *функцию разыменования* $\&_R$: $\forall r\in R\left(\&_R(r.A)=r\right)$.

Определение 1. Пусть задано отношение $R(A,B,\ldots)$, $T(R)=n$. Пусть на множестве $\mathcal{D}_B$ задано отношение линейного порядка. *Колоночным индексом* $I_{R.B}$ атрибута B отношения R называется упорядоченное отношение $I_{R.B}(A,B)$, удовлетворяющее следующим требованиям:

$$T(I_{R.B})=n \text{ и } \pi_A(I_{R.B})=\pi_A(R); \quad (1)$$

$$\forall x_1,x_2\in I_{R.B}\left(x_1\le x_2\Leftrightarrow x_1.B\le x_2.B\right); \quad (2)$$

$$\forall r\in R\left(\forall x\in I_{R.B}\left(r.A=x.A\Rightarrow r.B=x.B\right)\right). \quad (3)$$

Условие (1) означает, что множества значений первичных ключей (адресов) индекса и индексируемого отношения совпадают. Условие (2) означает, что элементы индекса упорядочены в порядке возрастания значений атрибута B. Условие (3) означает, что атрибут A элемента индекса содержит адрес кортежа отношения R, имеющего такое же значение атрибута B, как и у данного элемента колоночного индекса.

Теорема 1. Пусть задано отношение $R(A,B,\ldots)$. Пусть для отношения R задан колоночный индекс $I_{R.B}$. Тогда:

$$\pi_B(I_{R.B})=\pi_B(R). \quad (4)$$

Другими словами, колоночный индекс $I_{R.B}$ представляет все множество значений атрибута B отношения R с учетом повторяющихся значений.

Определение 2. Пусть на множестве значений домена $\mathcal{D}_B$ задано отношение линейного порядка. Пусть также задано разбиение множества $\mathcal{D}_B$ на $k > 0$ непересекающихся интервалов:

$$\left.\begin{array}{l} V_0 = [v_0; v_1], V_1 = (v_1; v_2], \ldots, V_{k-1} = (v_{k-1}; v_k]; \\ v_0 < v_1 < \ldots < v_k; \\ \mathcal{D}_B = \bigcup_{i=0}^{k-1} V_i. \end{array}\right\}. \quad (5)$$

Функция $\varphi_{\mathcal{D}_B} : \mathcal{D}_B \to \{0, \ldots, k-1\}$ называется *интервальной функцией фрагментации* для домена $\mathcal{D}_B$, если она удовлетворяет следующему условию:

$$\forall i \in \{0, \ldots, k-1\}\left(\forall b \in \mathcal{D}_B\left(\varphi_{\mathcal{D}_B}(b) = i \Leftrightarrow b \in V_i\right)\right). \quad (6)$$

Пусть задан колоночный индекс $I_{R.B}$ для отношения $R(A, B, \ldots)$ с атрибутом B над доменом $\mathcal{D}_B$ и интервальная функция фрагментации $\varphi_{\mathcal{D}_B}$. Функция:

$$\varphi_{I_{R.B}} : I_{R.B} \to \{0, \ldots, k-1\}. \quad (7)$$

называется *доменно-интервальной функцией фрагментации* [2] для индекса $I_{R.B}$, если она удовлетворяет следующему условию:

$$\forall x \in I_{R.B}\left(\varphi_{I_{R.B}}(x) = \varphi_{\mathcal{D}_B}(x.B)\right). \quad (8)$$

Определим *i*-тый фрагмент $(i = 0, \ldots, k-1)$ индекса $I_{R.B}$ следующим образом:

$$I_{R.B}^i = \left\{x \mid x \in I_{R.B};\ \varphi_{I_{R.B}}(x) = i\right\}. \quad (9)$$

Это означает, что в *i*-тый фрагмент попадают кортежи, у которых значение атрибута B принадлежит *i*-тому доменному интервалу. Будем называть фрагментацию, построенную таким образом, *доменно-интервальной*. Количество фрагментов k будем называть *степенью фрагментации*.

Доменно-интервальная фрагментация обладает следующими фундаментальными свойствами, вытекающими непосредственно из ее определения:

$$I_{R.B} = \bigcup_{i=0}^{k-1} I_{R.B}^i; \quad (10)$$

$$\forall i, j \in \{0, \ldots, k-1\}\left(i \neq j \Rightarrow I_{R.B}^i \cap I_{R.B}^j = \varnothing\right). \quad (11)$$

Теорема 2. Пусть для колоночного индекса $I_{R.B}$ отношения $R(A,B,\ldots)$ задана доменно-интервальная фрагментация степени k. Тогда:

$$\forall i \in \{0,\ldots,\mathrm{k}-1\}\left(\forall x \in I_{R.B}\left(x \in I^i_{R.B} \Leftrightarrow x.B \in V_i\right)\right). \quad (12)$$

Определение 3. Пусть для отношения $R(A,B,C,\ldots)$ заданы колоночные индексы $I_{R.B}$ и $I_{R.C}$. *Транзитивной фрагментацией* индекса $I_{R.C}$ относительно индекса $I_{R.B}$ называется фрагментация, задаваемая функцией $\varphi^{I_{R.B}}_{I_{R.C}} : I_{R.C} \to \{0,\ldots,k-1\}$, удовлетворяющей условию:

$$\forall x \in I_{R.C}\left(\varphi^{I_{R.B}}_{I_{R.C}}(x) = \varphi_{I_{R.B}}\left(\sigma_{A=x.A}\left(I_{R.B}\right)\right)\right). \quad (13)$$

2. Декомпозиция операции группировки

Пусть задано отношение $R(A,B,C_1,\ldots,C_u,D_1,\ldots,D_w,\ldots)$ с виртуальным ключом *A*. Пусть для атрибутов $D_1,\ldots,D_w$ задана агрегирующая функция **agrf**. Пусть имеется колоночный индекс $I_{R.B}$. Пусть также имеются колоночные индексы:

$$I_{R.C_1},\ldots,I_{R.C_u};$$

$$I_{R.D_1},\ldots,I_{R.D_w}.$$

Пусть для индекса $I_{R.B}$ задана доменно-интервальная фрагментация степени k:

$$I_{R.B} = \bigcup_{i=0}^{k-1} I^i_{R.B}. \quad (14)$$

Пусть для индексов $I_{R.C_1},\ldots,I_{R.C_u}$ и $I_{R.D_1},\ldots,I_{R.D_w}$ задана транзитивная относительно $I_{R.B}$ фрагментация:

$$\forall j \in \{1,\ldots,u\}\left(I_{R.C_j} = \bigcup_{i=0}^{k-1} I^i_{R.C_j}\right); \quad (15)$$

$$\forall j \in \{1,\ldots,w\}\left(I_{R.D_j} = \bigcup_{i=0}^{k-1} I^i_{R.D_j}\right). \quad (16)$$

Положим:

$$P_i = \pi_{A,F}\left(\gamma_{\min(A)\to A,B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}\left(I^i_{R.B} \bowtie I^i_{R.C_1} \bowtie \cdots \bowtie I^i_{R.C_u} \bowtie I^i_{R.D_1} \bowtie \cdots \bowtie I^i_{R.D_w}\right)\right) \quad (17)$$

для всех $i = 0,\ldots,k-1$.

Определим:

$$P = \bigcup_{i=0}^{k-1} P_i. \quad (18)$$

Построим отношение $Q(B,C_1,\ldots,C_u,F)$ следующим образом:

$$Q=\left\{\left(\&_R(p.A).B,\&_R(p.A).C_1,\ldots,\&_R(p.A).C_u,p.F\right)\mid p\in P\right\}. \quad (19)$$

Теорема 3. $Q=\gamma_{B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}(R)$.

Доказательство. Сначала докажем, что:

$$\pi_{*\setminus F}(Q)=\pi_{*\setminus F}\left(\gamma_{B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}(R)\right). \quad (20)$$

Для этого нам достаточно доказать справедливость следующих двух утверждений:

$$\pi_{*\setminus F}(Q)\subset\pi_{*\setminus F}\left(\gamma_{B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}(R)\right); \quad (21)$$

и

$$\pi_{*\setminus F}(Q)\supset\pi_{*\setminus F}\left(\gamma_{B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}(R)\right). \quad (22)$$

Справедливость утверждения (21) непосредственно следует из (19) и (1).

Покажем справедливость утверждения (22). Пусть:

$$(b,c_1,\ldots,c_u)\in\pi_{*\setminus F}\left(\gamma_{B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}(R)\right).$$

Это означает, что:

$$T\left(\sigma_{B=b\wedge C_1=c_1\wedge\ldots\wedge C_u=c_u}\left(\gamma_{\min(A)\to A,B,C_1,\ldots,C_u}(R)\right)\right)=1. \quad (23)$$

Положим:

$$(a)\in\pi_A\left(\sigma_{B=b\wedge C_1=c_1\wedge\ldots\wedge C_u=c_u}\left(\gamma_{\min(A)\to A,B,C_1,\ldots,C_u}(R)\right)\right). \quad (24)$$

С учетом (4), отсюда получаем, что существуют:

$$x_B\in I_{R.B},\ x_{C_1}\in I_{R.C_1},\ldots,\ x_{C_u}\in I_{R.C_u},$$

такие, что:

$$(x_B.A=a\wedge x_B.B=b)\wedge(x_{C_1}.A=a\wedge x_{C_1}.C_1=c_1)\cdots\wedge(x_{C_u}.A=a\wedge x_{C_u}.C_u=c_u). \quad (25)$$

Пусть в контексте разбиения (5) $b\in V_l$ $(l\in\{0,\ldots,k-1\})$. Тогда из (12) и из (25) следует, что:

$$x_B\in I^l_{R.B}. \quad (26)$$

По определению 3 транзитивной фрагментации из (25) и (26) получаем:

$$x_{C_1}\in I^l_{R.C_1},\cdots,x_{C_u}\in I^l_{R.C_u}. \quad (27)$$

Сопоставляя (17), (24), (25) и (27), получаем, что $(a)\in\pi_A(P_l)$. С учетом (18) отсюда следует $(a)\in\pi_A(P)$. Вместе с (19) это дает:

$$\left(\&_R(a).B,\&_R(a).C_1,\ldots,\&_R(a).C_u\right)\in\pi_{*\setminus F}(Q),$$

откуда с учетом (24) получаем $(b,c_1,\ldots,c_u)\in\pi_{*\setminus F}\left(Q\right)$. Таким образом (22), а вместе с ним и (20) имеет место.

Для завершения доказательства теоремы нам достаточно показать, что для любых $q\in Q$ и $g\in\gamma_{B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}(R)$ справедливо:

$$\left(q.B=g.B\wedge q.C_1=g.C_1\wedge\ldots\wedge q.C_1=g.C_1\right)\Rightarrow\left(q.F=g.F\right). \qquad (28)$$

Докажем (28). Пусть:

$$q=(b,c_1,\ldots,c_u,f)\in Q \qquad (29)$$

и

$$g=(b,c_1,\ldots,c_u,f')\in\gamma_{B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}(R). \qquad (30)$$

Такие q и g существуют в силу (20). Для доказательства (28) достаточно показать, что $f=f'$.

В соответствии с (19) существует:

$$p=(a,f)\in P \qquad (31)$$

такой, что

$$(a,b,c_1,\ldots,c_u,\ldots)\in R. \qquad (32)$$

Из (31) и (18) следует, что существует l, такое что:

$$p=(a,f)\in P^l. \qquad (33)$$

Отсюда, с учетом (17) получаем:

$$(a,b',c_1',\ldots,c_u')\in I_{R.B}^l\bowtie I_{R.C_1}^l\bowtie\cdots\bowtie I_{R.C_u}^l.$$

В силу свойств транзитивной фрагментации и колоночных индексов с учетом (32) отсюда следует, что:

$$(a,b,c_1,\ldots,c_u)\in I_{R.B}^l\bowtie I_{R.C_1}^l\bowtie\cdots\bowtie I_{R.C_u}^l. \qquad (34)$$

Вместе с (33) и (17) это дает:

$$f=\pi_F\left(\gamma_{B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}\left(\sigma_{B=b\wedge C_1=c_1\wedge\ldots\wedge C_u=c_u}\left(I_{R.B}^l\bowtie I_{R.C_1}^l\bowtie\cdots\bowtie I_{R.C_u}^l\bowtie I_{R.D_1}^l\bowtie\cdots\bowtie I_{R.D_w}^l\right)\right)\right). \qquad (35)$$

С другой стороны, из (30) непосредственно следует, что:

$$f'=\pi_F\left(\gamma_{B,C_1,\ldots,C_u,\mathrm{agrf}(D_1,\ldots,D_w)\to F}\left(\sigma_{B=b\wedge C_1=c_1\wedge\ldots\wedge C_u=c_u}\left(R\right)\right)\right). \qquad (36)$$

Исходя из формул (35) и (36), условие $f=f'$ равносильно условию:

$$\sigma_{B=b\wedge C_1=c_1\wedge\ldots\wedge C_u=c_u}\left(I_{R.B}^l\bowtie I_{R.C_1}^l\bowtie\cdots\bowtie I_{R.C_u}^l\bowtie I_{R.D_1}^l\bowtie\cdots\bowtie I_{R.D_w}^l\right)=$$
$$=\sigma_{B=b\wedge C_1=c_1\wedge\ldots\wedge C_u=c_u}\left(\pi_{B,C_1,\ldots,C_u,D_1,\ldots,D_w}(R)\right). \qquad (37)$$

Пусть:

$$(b, c_1, \dots, c_u, d_1, \dots, d_w) \in \sigma_{B=b \wedge C_1=c_1 \wedge \dots \wedge C_u=c_u}\left(I^l_{R.B} \bowtie I^l_{R.C_1} \bowtie \dots \bowtie I^l_{R.C_u} \bowtie I^l_{R.D_1} \bowtie \dots \bowtie I^l_{R.D_w}\right).$$

Это означает, что существует a' такой, что:

$$(a', b) \in I^l_{R.B} \subset I_{R.B};$$
$$(a', b) \in I^l_{R.C_1} \subset I_{R.C_1};$$
$$\dots$$
$$(a', b) \in I^l_{R.C_u} \subset I_{R.C_u};$$
$$(a', b) \in I^l_{R.D_1} \subset I_{R.D_1};$$
$$\dots$$
$$(a', b) \in I^l_{R.D_w} \subset I_{R.D_w}.$$

Отсюда в силу свойств колоночного индекса:

$$(a', b, c_1, \dots, c_u, d_1, \dots, d_w) \in \pi_{A,B,C_1,\dots,C_u,D_1,\dots,D_w}(R),$$

и следовательно:

$$(b, c_1, \dots, c_u, d_1, \dots, d_w) \in \sigma_{B=b \wedge C_1=c_1 \wedge \dots \wedge C_u=c_u}\left(\pi_{B,C_1,\dots,C_u,D_1,\dots,D_w}(R)\right).$$

Пусть теперь:

$$(b, c_1, \dots, c_u, d'_1, \dots, d'_w) \in \sigma_{B=b \wedge C_1=c_1 \wedge \dots \wedge C_u=c_u}\left(\pi_{B,C_1,\dots,C_u,D_1,\dots,D_w}(R)\right). \quad (38)$$

В силу свойств транзитивной фрагментации и колоночных индексов, принимая во внимание (34), получаем:

$$\left(b, c_1, \dots, c_u, d'_1, \dots, d'_w\right) \in \left(I^l_{R.B} \bowtie I^l_{R.C_1} \bowtie \dots \bowtie I^l_{R.C_u} \bowtie I^l_{R.D_1} \bowtie \dots \bowtie I^l_{R.D_w}\right),$$

откуда немедленно следует:

$$\left(b, c_1, \dots, c_u, d'_1, \dots, d'_w\right) \in \sigma_{B=b \wedge C_1=c_1 \wedge \dots \wedge C_u=c_u}\left(I^l_{R.B} \bowtie I^l_{R.C_1} \bowtie \dots \bowtie I^l_{R.C_u} \bowtie I^l_{R.D_1} \bowtie \dots \bowtie I^l_{R.D_w}\right).$$

Таким образом (37), а, значит, и (28) имеют место. *Теорема доказана*.

Заключение

В статье было представлено формальное описание метода декомпозиции операции группировки на основе доменно-интервальной и транзитивной фрагментации колоночных индексов. Доказана корректность метода. Практическая ценность предложенного метода декомпозиции заключается в том, что ресурсоемкие вычисления могут производиться независимо над соответствующими фрагментами. Для операции группировки это – вычисление P_i по формуле (17).

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 годы» (Госконтракт № 14.574.21.0035).

Библиографический список

1. Соколинский, Л.Б. Параллельные машины баз данных / Л.Б. Соколинский // Природа. – 2001. – № 8. – С. 10–17.

2. Соколинский, Л.Б. Параллельные системы баз данных / Л.Б. Соколинский. – М.: Изд-во Московского государственного университета, 2013. – 184 с.

3. Sokolinsky, L.B. Design and Evaluation of Database Multiprocessor Architecture with High Data Availability / L.B. Sokolinsky // Proceedings of the 12th International workshop on database and expert systems applications. – IEEE Computer Society, 2001. – Pp. 115–120.

4. Pan, C.S. Taming Elephants, or How to Embed Parallelism into PostgreSQL / C.S. Pan, M.L. Zymbler // Lecture Notes in Computer Science. – 2013. – Vol. 8055, Part 1. – Pp. 153–164.

5. Костенецкий, П.С. Моделирование иерархических многопроцессорных систем баз данных / П.С. Костенецкий, Л.Б. Соколинский // Программирование. – 2013. – Т. 39, № 1. – С. 3–22.

6. Fang, J. Sesame: A User-Transparent Optimizing Framework for Many-Core Processors / J. Fang, A.L. Varbanescu, H. Sips // Proceedings of the 13th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid2013), May 13–16, 2013, Delft, Netherlands. – IEEE, 2013. – Pp. 70–73.

7. Breß, S. Efficient Co-Processor Utilization in Database Query Processing / S. Breß, F. Beier, H. Rauhe, et al. // Information Systems. – 2013. – Vol. 38, No. 8. – Pp. 1084–1096.

8. Scherger, M. Design of an In-Memory Database Engine Using Intel Xeon Phi Coprocessors / M. Scherger // Proceedings of the International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA’14), July 21–24, 2014, Las Vegas, USA. – CSREA Press, 2014. – Pp. 21–27.

9. Беседин, К.Ю. Моделирование обработки запросов на гибридных вычислительных системах с многоядерными сопроцессорами и графическими ускорителями / К.Ю. Беседин, П.С. Костенецкий // Программные системы: теория и приложения. – 2014. – Т. 5, № 1-1 (19). – С. 91–110.

10. Иванова, Е.В. Исследование эффективности использования фрагментированных колоночных индексов при выполнении операции естественного соединения с использованием многоядерных ускорителей / Е.В. Иванова // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2015). Труды международной научной конференции. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2015. – С. 393–398.

11. Иванова, Е.В. Декомпозиция операций пересечения и соединения на основе доменно-интервальной фрагментации колоночных индексов / Е.В. Иванова, Л.Б. Соколинский // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Вычислительная математика и информатика». – 2015. – Т. 4, № 1. – С. 44–56.

12. Гарсиа-Молина, Г. Системы баз данных. Полный курс. / Г. Гарсиа-Молина, Дж. Ульман, Дж. Уидом. – М.: Издательский дом «Вильямс», 2004. – 1088 с.

К содержанию

УДК 004.65 + 004 + 004.383.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПЕРАЦИИ СОЕДИНЕНИЯ, ВЫПОЛНЯЕМОЙ НА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОМ КЛАСТЕРЕ С ГИБРИДНЫМИ УЗЛАМИ

П.С. Костенецкий

В статье предлагается математическая модель мультипроцессора баз данных с гибридными узлами, позволяющая моделировать передачу данных между многоядерными сопроцессорами и основной памятью в сжатом виде. Модель включает в себя модель аппаратной платформы, модель операционной среды и стоимостную модель. На базе предложенной модели разработан эмулятор, позволяющий оценить применимость методов сжатия при передаче данных между сопроцессором и основной памятью.

Введение

Одним из перспективных направлений развития параллельных систем баз данных [11–13] на сегодняшний день является использование гибридных вычислительных комплексов с узлами, содержащими многоядерные сопроцессоры [1]. Для исследования произвольных многопроцессорных конфигураций обычно используются математические модели [10]. В работе предложена новая математическая модель мультипроцессора баз данных, оснащенного многоядерными сопроцессорами, являющаяся расширением модели DMM [9]. Модель включает в себя модель аппаратной платформы, модель операционной среды и стоимостную модель.

Модель аппаратной платформы

Основными элементами модели аппаратной платформы являются процессорный модуль, сопроцессорный модуль и модуль коммутатора. В рамках данной модели, аппаратные архитектуры систем баз данных [2] представляются в виде деревьев, далее называемых HDM-деревьями. Узлы HDM-деревьев представляют собой процессорные модули, сопроцессорные модули и модули сетевого коммутатора. Ребра HDM-дерева соответствуют каналам передачи данных. На HDM-дерево накладываются следующие ограничения:

– корнем HDM-дерева может быть только модуль сетевого коммутатора;

– листьями HDM-дерева могут быть только сопроцессорные модули;

– сопроцессорные модули могут быть связаны с сетевым коммутатором только посредством процессорного модуля.

На рис. 1 представлен пример моделируемой аппаратной конфигурации системы баз данных. Система представляет из себя кластер с вычислительными узлами, содержащими многоядерные ускорители.

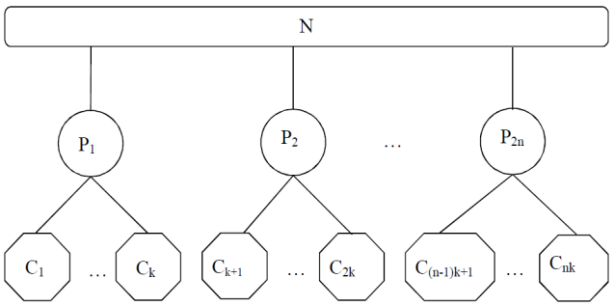


Рис. 1. Пример аппаратной конфигурации в виде HDM-дерева

Здесь N – модуль коммутатора, P – процессорные модули, C – сопроцессорные модули, ребра дерева соответствуют каналам передачи данных.

Предполагается, что к моменту начала выполнения запроса база данных уже целиком равномерно распределена в оперативной памяти кластера между всеми процессорными модулями. Обработка операции соединения производится только на сопроцессорных модулях.

Модель операционной среды

Минимальной единицей данных в предлагаемой модели будем считать кортеж. Допустим все кортежи имеют одинаковый размер. При обработке кортежи могут делиться сопроцессорным модулем на две группы – свои и чужие. Свои кортежи – это кортежи, которые должны быть обработаны на данном сопроцессорном модуле. Чужие кортежи должны быть обработаны на других сопроцессорных модулях. Номер сопроцессорного модуля, которому необходимо передать чужие кортежи определяется с помощью функции пересылки.

Время передачи данных между вычислительным узлом и сопроцессором можно уменьшить, применив сжатие данных в СУБД [3–6]. Будем считать, что данные в моделируемой СУБД хранятся в сжатом виде. Данные разбиты на фрагменты, называемые томами. Размер тома T зависит от количества кортежей, содержащихся в томе, и коэффициента сжатия данных. Коэффициентом сжатия данных будем называть отношение объема сжатых данных к объему исходных данных. Коэффициент перекоса ω указывает долю своих кортежей в томе. Время работы модели разбивается на такты.

Пусть один кортеж сжимается за время q. Тогда время создания тома данных, содержащего n кортежей будет равно: $t_c = nq$. Время распаковки данных $t_d = t_c * v$, где v – константа, зависящая от выбранного алгоритма сжатия.

Стоимостная модель

Для вычисления времени работы моделируемой системы баз данных необходимо учитывать скорость передачи данных. Пусть s_n – скорость передачи данных на n-ом уровне дерева. Тогда время передачи одного тома между двумя сопроцессорными модулями, подключенными к различным процессорным модулям, будет: $S = 2(s_1 + s_2)$. Таким образом, длительность одного такта будет равна: $t_i = s_2 + t_d + t_f + t_c p + S + (1-p)t_d + +t_{\bowtie} + t_c + s_2 = 2s_1 + 4s_2 + (2v - vp + p + 1)n\omega + t_f + t_{\bowtie}$;

где t_c – время упаковки тома, t_d – время распаковки тома, ω – коэффициент перекоса, t_f – время выполнения функции фрагментации, $t_{\bowtie}$ – время выполнения операции соединения, n – количество кортежей, содержащихся в томе, v – константа, отражающая зависимость между временем сжатия и распаковки.

Время работы мультипроцессора баз данных с многоядерными ускорителями при обработке одной транзакции равно сумме времени, потраченного на все такты работы модели: $T = \sum_{i=1}^{M} t_i$.

Моделирование операции соединения

Рассмотрим процесс моделирования операции соединения в модели на примере алгоритма естественного соединения с хешированием Main memory Hash Join (MHJ). На рис. 2. изображен псевдокод последовательного алгоритма операции соединения с хешированием.

```
for each r in R
   вычислить значение хеш-функции для r по атрибуту A
   добавить r в хеш-таблицу
end for
for each s in S
   вычислить значение хеш-функции для s по атрибуту A
   for each r in хеш-таблица
      if join(r, s)   R S
         return (r, s)
   end for
end for
```

Рис. 2. Алгоритм соединения *MHJ*

Алгоритм MHJ предполагает, что большее (тестируемое) отношение R не помещается в оперативную память одного узла кластера, а меньшее (опорное) отношение S целиком помещается в оперативной памяти. Для опорного отношения строится хеш-таблица, которая обеспечивает высокую скорость доступа к элементам отношения. Затем для каждой строки из тестируемого отношения выполняется поиск значений, соответствующих условию соединения.

Для организации межпроцессорных обменов в параллельных системах баз данных будем использовать оператор Exchange [13]. Оператор Exchange перераспределяет данные между сопроцессорными узлами в соответствии с некоторой функцией распределения, которая определяет, на каком сопроцессорном модуле должен обрабатываться том.

Пусть нам необходимо смоделировать выполнение параллельной транзакции, представляющее собой естественное соединение двух отношений R и S по общему атрибуту A. Мы предполагаем, что опорное отношение S фрагментировано по всем узлам по атрибуту соединения, тогда коэффициент перекоса для отношения S будет равен ω=1. Тестируемое отношение R

фрагментировано по всем узлам по произвольному атрибуту, значения атрибута A равномерно распределены по фрагментам отношения R. Для отношения R вводим коэффициент перекоса ω<1. Например, при ω=0.8 каждый параллельный агент при выполнении соединения отправляет своим контрагентам по сети около 20 % кортежей из своего фрагмента. При этом все контрагенты получат примерно одинаковое количество кортежей. Параллельный алгоритм соединения MHJ представлен на рис. 3.

```
отправить отношение S на сопроцессор
#pragma omp parallel for
for each s in S
   вычислить значение хеш-функции для s по атрибуту A
   добавить r в хеш-таблицу
end for
for each r in R
   вычислить значение хеш-функции для r по атрибуту A
   for each s in хеш-таблица
      if join(r, s)   R S
         return (r, s)
   end for
end for
```

Рис. 3. Параллельный алгоритм соединения MHJ

Предположим, что отношения R и S находятся в сжатом виде и представлены в виде томов. Все тома отношения R имеют равные коэффициенты перекоса данных и значения атрибута A равномерно распределено в каждом томе. На рис. 4 представлено, как будет выглядеть параллельный алгоритм соединения MHJ, оперирующий сжатыми данными.

```
отправить отношение S на сопроцессор
#pragma omp parallel for
for each t<s> in S      //для каждого тома t отношения R
   for each s in t      //для каждого кортежа s тома t
      вычислить значение хеш-функции для s по атрибуту A
      добавить s в хеш-таблицу
   end for
end for
#pragma omp parallel for
for each t<r> in R      //для каждого тома t отношения R
   for each r in t      //для каждого кортежа r тома t
      вычислить значение хеш-функции для r по атрибуту A
      for each s in хеш-таблица
         if Join(r, s)
            return (r, s)
      end for
   end for
end for
```

Рис. 4. Параллельный алгоритм соединения MHJ,
оперирующий сжатыми данными

В случае моделирования обработки транзакции системой баз данных с более чем двумя сопроцессорными модулями необходимо учитывать динамически изменяющуюся нагрузку на сетевой коммутатор, которая может вызывать задержку передачи данных, а также нагрузку на шину PCI-Express, через которую подключаются многоядерные сопроцессоры к процессорному модулю. В связи с этим было принято решение оценивать эффективность работы моделируемой системы методами имитационного моделирования при помощи создания программного эмулятора мультипроцессоров баз данных, оснащенных многоядерными ускорителями.

Программный эмулятор

На основе предложенной модели мультипроцессоров баз данных, оснащенных многоядерными сопроцессорами разработан эмулятор, позволяющий оценить применимость методов сжатия при передаче данных между сопроцессором и основной памятью.

Основные принципы работы эмулятора:

– сопроцессорный модуль за один такт обрабатывает один том данных;

– процессорный модуль передает необработанный том данных на сопроцессорный модуль. Если в буфере процессорного модуля есть том для передачи на сопроцессор, то он отправляет этот том в очередь модуля коммутатора либо в очередь своего сопроцессора;

– модуль коммутатора извлекает из своей очереди тома данных и отправляет их получателям – в буфер процессорного модуля.

Пример использования эмулятора

Исследовалось влияние пропускной способности системной шины на общую производительность вычислительного узла с многоядерным сопроцессором, а также эффективность использования нескольких сопроцессоров на одном узле. Эксперименты проводились для различных значений пропускной способности коммуникационной сети, шины PCI-Express. Результаты экспериментов приведены на рис. 5.

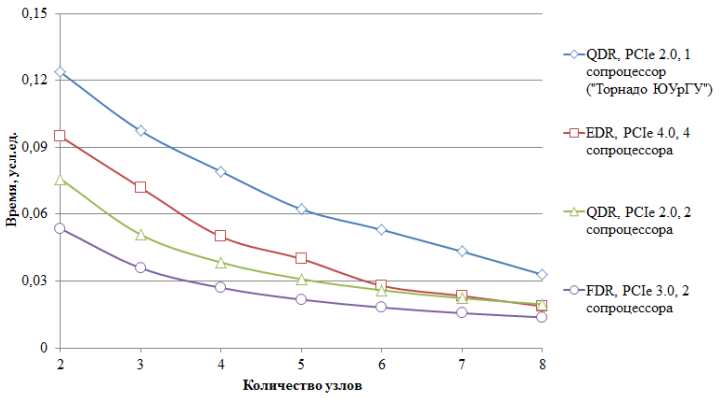


Рис. 5. Влияние пропускной способности системной шины узла на ускорение

В результате данного эксперимента наибольшую эффективность показала архитектура с коммуникационной сетью InfiniBand FDR, системной шиной PCI-Express 3.0 и двумя сопроцессорами на узле.

Заключение

В работе рассмотрены вопросы моделирования и анализа многопроцессорных систем баз данных с многоядерными ускорителями. В результате работы получены следующие результаты: разработана модель, позволяющая моделировать многопроцессорные системы баз данных, оснащенные многоядерными сопроцессорами; на основе предложенной модели разработан программный эмулятор, позволяющий моделировать и исследовать различные многопроцессорные конфигурации; проведены вычислительные эксперименты, направленные на поиск оптимальных аппаратных архитектур мультипроцессоров баз данных. Дальнейшим направлением работ будет расширение модели на сопроцессор баз данных с распределенными колоночными индексами [7, 8].

Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента РФ № СП-1229.2015.5 (2015–2016 гг.).

Библиографический список

1. Kim, C. Designing Fast Architecture-Sensitive Tree Search on Modern Multicore/Many-Core Processors / C. Kim, J. Chhugani // ACM Trans. Database Syst. USA: ACM, 2010. – Vol. 36. № 4. Art. 22.

2. Соколинский, Л.Б. Обзор архитектур параллельных систем баз данных / Л.Б. Соколинский // Программирование. – 2004. – № 6. – С. 49–63.

3. Беседин, К.Ю. Исследование эффективности различных методов сжатия при передаче данных из основной памяти в память сопроцессора Intel Xeon Phi / К.Ю. Беседин, П.С. Костенецкий // Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров: Труды Международной суперкомпьютерной конференции. – М.: Изд-во МГУ, 2014. – С. 114–119.

4. Беседин, К.Ю. Моделирование обработки запросов на гибридных вычислительных системах с многоядерными сопроцессорами и графическими ускорителями / К.Ю. Беседин, П.С. Костенецкий. // Программные системы: теория и приложения. – 2014. – Т. 5, № 1-1(19). – С. 91–110.

5. Костенецкий, П.С. Исследование эффективности различных методов сжатия при передаче данных из основной памяти в память сопроцессора Intel Xeon Phi / П.С. Костенецкий, К.Ю. Беседин // Вычислительные методы и программирование. – 2014. – Т. 15. № 4. – С. 593–601.

6. Приказчиков, С.О. Применение графических ускорителей для обработки запросов над сжатыми данными в параллельных системах баз данных / С.О. Приказчиков, П.С. Костенецкий // Научный сервис в сети Интернет: многообразие суперкомпьютерных миров: Труды Международной суперкомпьютерной конференции. – М.: Изд-во МГУ, 2014. – С. 277–279.

7. 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. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2014. – С. 270–275.

8. Иванова, Е.В. Декомпозиция операций пересечения и соединения на основе доменно-интервальной фрагментации колоночных индексов / Е.В. Иванова, Л.Б. Соколинский // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Вычислительная математика и информатика». – 2015. – Т. 4. – № 1. – С. 44–56.

9. Костенецкий, П.С. Моделирование параллельных систем баз данных / П.С. Костенецкий, Л.Б. Соколинский. – Челябинск, 2012. – 78 с.

10. Костенецкий, П.С. Моделирование иерархических многопроцессорных систем баз данных / П.С. Костенецкий, Л.Б. Соколинский // Программирование. – 2013. – Т. 39. – № 1. – С. 3–22.

11. Соколинский, Л.Б. Параллельные машины баз данных / Л.Б. Соколинский // Природа. – 2001. – № 8. – С. 10–17.

12. Sokolinsky, L.B. Omega: the Highly Parallel Database System Project / L.B. Sokolinsky, O. Axenov, S. Gutova // First East-European Symposium on Advances in Database and Information Systems (ADBIS'97). – 1997. – Pp. 88–90.

13. Соколинский, Л.Б. Параллельные системы баз данных / Л.Б. Соколинский. – М., 2013. –184 с.

К содержанию

УДК 004.55+ 37.013.78 + 316.472.4

АНАЛИЗ ПОВЕДЕНИЯ ШКОЛЬНИКОВ В СОЦИАЛЬНОЙ СЕТИ НА ОСНОВЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СИСТЕМ WEB-АНАЛИТИКИ

В.И. Дударева, А.А. Панюкова

В статье представлено краткое описание результатов анализа активности поведения школьников в Интернете, а именно – мотивации школьников на создание контента в Интернете.

Ключевые слова: социальная сеть; поведение школьников; анализ.

На студенческую скамью в настоящее время приходят уже вполне сложившиеся пользователи сети. Проблемы, с которыми сталкиваются преподаватели вузов, контролируя самостоятельную работу студентов, определили интерес к анализу поведения школьников в сети.

В настоящее время подавляющее количество веб-сервисов, ориентированных на детей, представляют собой игры. Огромной популярностью у детей и подростков пользуются также социальные сети. Однако, в первом

случае вообще не подразумевается создание детьми контента, а во втором случае – подразумевается создание контента преимущественно о себе. Ни в первом, ни во втором случае не предполагается ни совместного творчества, ни создания контента, который оказался бы интересным или полезным кому-либо, кроме узкого круга друзей.

Поведение пользователей изучают очень многие исследователи. Но дети обычно не интересны как контент-генерирующий объект. Они обычно позиционируются как потребители игрушек и развлечений. Возникает вопрос – могут ли дети сейчас вообще быть интересны не как потребители игрушек и развлечений, а как равноправные пользователи сети. Могут ли они без просьбы взрослых создавать не эгоцентричный контент? Ответ на этот вопрос можно попытаться получить в результате анализа содержания и структуры сайтов, которые дети посещают.

Веб-аналитика дает возможность среди прочих задач анализировать структуру и контент сайта, получать исчерпывающую информацию о посетителях и многое другое. Это лишь малая доля вопросов, на которые может ответить веб-аналитика. По большому счету она позволяет использовать данные для принятия решений.

Как правило, необходимая для анализа первичная статистика включает структуру целевой аудитории, среднее или средневзвешенное число просматриваемых Web-страниц, ключевые вопросы, география целевой аудитории, среднестатистическое время, проведенное посетителем на странице, количество и структура переходов между страницами и др. Эти данные позволяют провести с помощью методов, применяемых в веб-аналитике, анализ посещаемости, анализа плотности «щелчков», анализ поведения и др. Используется инструментарий: в виде счетчиков, лог-анализаторов и др. систем.

Подбор такой системы – очень важен для обеспечения необходимого качества мониторинга процессов и удобства представления данных.

Наблюдение за поведением школьников в социальных сетях в Интернете выявило достаточно серьезный вопрос: а готовы ли подростки создавать в интернете уникальный контент, не направленный на них самих.

Была выдвинута гипотеза – дети создавать такой контент не готовы.

Цель работы – используя методики статистического анализа данных, возможности систем веб-аналитики проверить, можно ли мотивировать детей на создание уникального контента, не ориентированного на них самих, причем очевидно, что должен рассматриваться случай, когда способ создания контента будет простым, а тема – близкой и понятной.

Для ответа на поставленный вопрос для контрольной группы (50 чел.) выполнена следующая работа:

1. Проведен опрос среди выбранной целевой группы, включающий в себя вопросы о деятельности в интернете и ее активности.

2. Изучена активность целевой группы на примере их учетных записей в социальных сетях (классифицировать их активность по типам материалов и по тематике). Выделено несколько наиболее популярных типов материалов и тем. Создано несколько страниц, на которых собиралась статистика посещений – согласно выделенным темам и не только.

3. Проведен анализ данных о посещаемости, проанализировано качество и содержание созданного контента.

В качестве инструментария использовалась одна из самых популярных систем веб-аналитики – Google Analytics (стала бесплатной в 2005 году). Система позволяет анализировать любые рекламные кампании, проводимые как онлайн, так и офлайн рекламы (ТВ-реклама, почтовые рассылки, реклама на радио и другие виды рекламы, призывающие зайти на сайт рекламируемой кампании).

На анализируемую веб-страницу вставляется специальный JavaScript-код, который, загружаясь вместе со страницей, передает данные серверу сбора данных и тем самым позволяет накапливать данные о каждом посетителе, пришедшем на страницу с кодом. Данные о посетителях аккумулируются в базе данных Google. Необходимые данные запрашиваются аналитиком из базы данных Google и предоставляются ему в удобной для дальнейшего анализа форме.

Конечно, основное предназначение Google Analytics и других похожих систем – дать маркетологам средство для оценки эффективности рекламных интернет-кампаний. Но это мощное средство дает возможность и представителям многих других профессий получить ответы на ряд вопросов, в том числе – как пользователи попадают на сайт и что они там делают. Возможности Google Analytics выходят далеко за рамки возможностей стандартных пакетов статистики.

В данной работе в результате использования системы Google Analytics получены результаты, представленные на рис. 1–6:

Количество «новых» посетителей (рис. 2) вполне соответствует количеству компьютеров, установленных в классе (13 шт.), с учетом небольшого количества посещений из дома или с сотового телефона.

На компьютерах в школе установлен браузер Firefox, из чего следует, что переходы из других браузеров были осуществлены по личной инициативе. Это вполне соответствует выводам, сделанным по данным рис. 2. Таким образом, из рис.3 можно сделать вывод, что учащиеся самостоятельно возвращались на предложенный сайт и производили с ним некоторые действия.

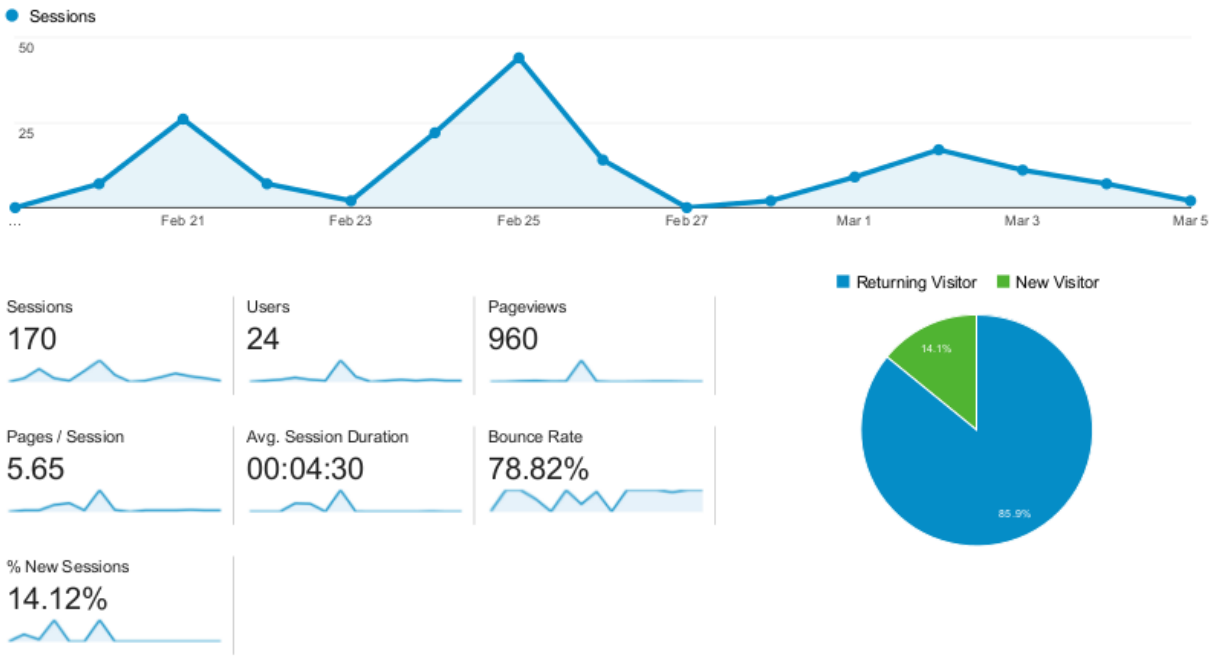
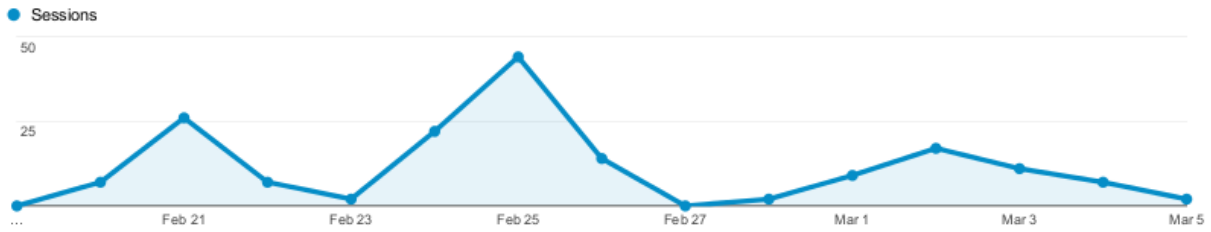
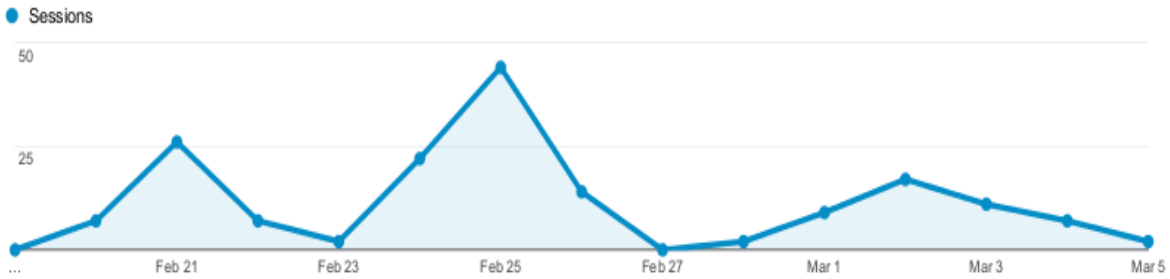


Рис. 1. Все посещения сайта за последний месяц (февраль 2015 г.)



User Type	Acquisition			Behavior			Conversions		
	Sessions	% New Sessions	New Users	Bounce Rate	Pages / Session	Avg. Session Duration	Goal Conversion Rate	Goal Completions	Goal Value
	170 % of Total: 100.00% (170)	14.12% Avg for View: 14.12% (0.00%)	24 % of Total: 100.00% (24)	78.82% Avg for View: 78.82% (0.00%)	5.65 Avg for View: 5.65 (0.00%)	00:04:30 Avg for View: 00:04:30 (0.00%)	0.00% Avg for View: 0.00% (0.00%)	0 % of Total: 0.00% (0)	$0.00 % of Total: 0.00% ($0.00)
1. Returning Visitor	146 (85.88%)	0.00%	0 (0.00%)	88.36%	4.42	00:03:23	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
2. New Visitor	24 (14.12%)	100.00%	24 (100.00%)	20.83%	13.12	00:11:17	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)

Рис. 2. Соотношение новых посетителей к общему числу

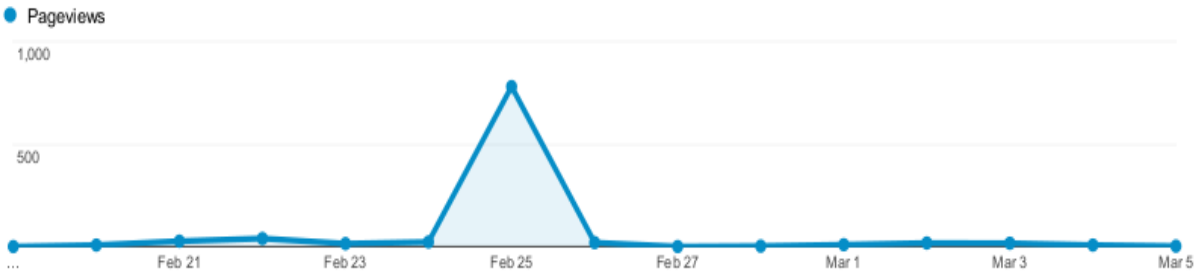


Browser	Acquisition			Behavior			Conversions		
	Sessions	% New Sessions	New Users	Bounce Rate	Pages / Session	Avg. Session Duration	Goal Conversion Rate	Goal Completions	Goal Value
	170 % of Total: 100.00% (170)	14.12% Avg for View: 14.12% (0.00%)	24 % of Total: 100.00% (24)	78.82% Avg for View: 78.82% (0.00%)	5.65 Avg for View: 5.65 (0.00%)	00:04:30 Avg for View: 00:04:30 (0.00%)	0.00% Avg for View: 0.00% (0.00%)	0 % of Total: 0.00% (0)	$0.00 % of Total: 0.00% ($0.00)
1. Firefox	147 (86.47%)	9.52%	14 (58.33%)	84.35%	4.12	00:03:18	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
2. Chrome	10 (5.88%)	40.00%	4 (16.67%)	30.00%	12.30	00:14:33	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
3. Safari	10 (5.88%)	50.00%	5 (20.83%)	50.00%	18.70	00:11:02	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
4. Internet Explorer	3 (1.76%)	33.33%	1 (4.17%)	66.67%	15.00	00:08:14	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)

Рис. 3. Следы перемещения по сайтам

Учащимся было предложено посетить сайт по ссылкам /info и /obz (см. рис. 4), переходы на все остальные страницы (в том числе на главную) – результат проявления их инициативы.

На рис. 5 подтверждается информация о том, что учащимся были предложены ссылки /info и /obz. Наличие большого числа посещений главной страницы объясняется тем, что дописывать ссылку до конца детям не хотелось, особенно при повторном посещении сайта (при первом посещении удалось добиться точного написания ссылки, так как на это обращалось отдельное внимание).

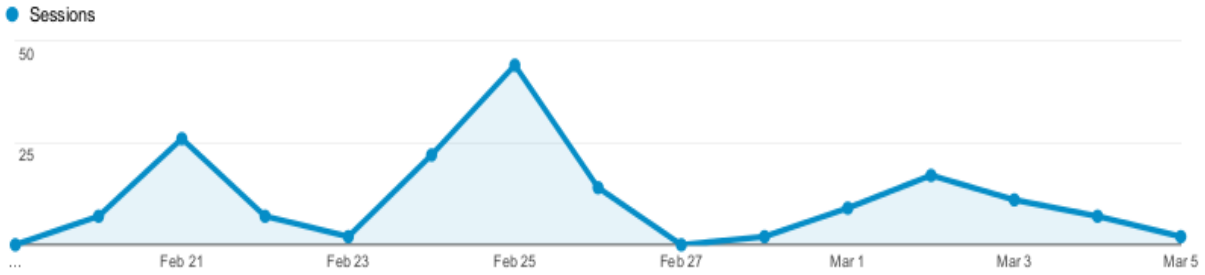


	Page	Pageviews	Unique Pageviews	Avg. Time on Page	Entrances	Bounce Rate	% Exit	Page Value
		960 % of Total: 100.00% (960)	394 % of Total: 100.00% (394)	00:00:58 Avg for View: 00:00:58 (0.00%)	170 % of Total: 100.00% (170)	78.82% Avg for View: 78.82% (0.00%)	17.71% Avg for View: 17.71% (0.00%)	$0.00 % of Total: 0.00% ($0.00)
1.	/	**284** (29.58%)	153 (38.83%)	00:00:24	132 (77.65%)	94.70%	46.13%	$0.00 (0.00%)
2.	/?q=node/13	**77** (8.02%)	13 (3.30%)	00:01:01	3 (1.76%)	66.67%	6.49%	$0.00 (0.00%)
3.	/?q=node/7	**71** (7.40%)	11 (2.79%)	00:00:46	3 (1.76%)	66.67%	2.82%	$0.00 (0.00%)
4.	/?q=node/6	**51** (5.31%)	14 (3.55%)	00:02:28	0 (0.00%)	0.00%	11.76%	$0.00 (0.00%)
5.	/info	**43** (4.48%)	26 (6.60%)	00:01:31	21 (12.35%)	9.52%	9.30%	$0.00 (0.00%)
6.	/obz	**37** (3.85%)	8 (2.03%)	00:00:22	5 (2.94%)	0.00%	0.00%	$0.00 (0.00%)
7.	/?q=node/5	**30** (3.12%)	14 (3.55%)	00:01:43	0 (0.00%)	0.00%	10.00%	$0.00 (0.00%)
8.	/?q=node/9	**30** (3.12%)	9 (2.28%)	00:00:30	0 (0.00%)	0.00%	0.00%	$0.00 (0.00%)
9.	/?q=node/2	**28** (2.92%)	7 (1.78%)	00:01:36	1 (0.59%)	0.00%	7.14%	$0.00 (0.00%)
10.	/?q=node/19	**26** (2.71%)	8 (2.03%)	00:01:44	0 (0.00%)	0.00%	11.54%	$0.00 (0.00%)

Rows 1 - 10 of 63

Рис. 4. Количество посещений школьниками различных страниц

Из рис. 6 следует, что, как правило, дети уходят со страниц, на которые они были первоначально были направлены. Это говорит о потенциально высокой активности учащихся как пользователей сети.

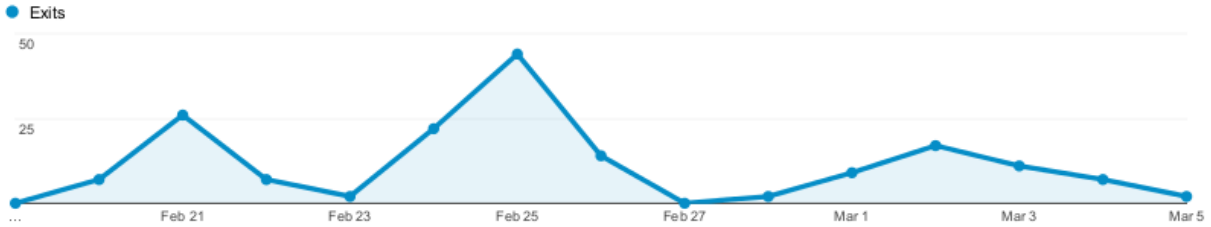


	Landing Page	Acquisition			Behavior			Conversions		
		Sessions	% New Sessions	New Users	Bounce Rate	Pages / Session	Avg. Session Duration	Goal Conversion Rate	Goal Completions	Goal Value
		170 % of Total: 100.00% (170)	14.12% Avg for View: 14.12% (0.00%)	24 % of Total: 100.00% (24)	78.82% Avg for View: 78.82% (0.00%)	5.65 Avg for View: 5.65 (0.00%)	00:04:30 Avg for View: 00:04:30 (0.00%)	0.00% Avg for View: 0.00% (0.00%)	0 % of Total: 0.00% (0)	$0.00 % of Total: 0.00% ($0.00)
1.	/	132 (77.65%)	3.79%	5 (20.83%)	94.70%	1.97	00:01:12	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
2.	/info	21 (12.35%)	52.38%	11 (45.83%)	9.52%	16.48	00:17:18	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
3.	/obz	5 (2.94%)	80.00%	4 (16.67%)	0.00%	55.00	00:36:49	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
4.	/?q=node/13	3 (1.76%)	33.33%	1 (4.17%)	66.67%	2.67	00:00:33	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
5.	/?q=node/7	3 (1.76%)	33.33%	1 (4.17%)	66.67%	15.00	00:08:14	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
6.	/?q=node	2 (1.18%)	50.00%	1 (4.17%)	100.00%	1.00	00:00:00	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
7.	/?q=info	1 (0.59%)	0.00%	0 (0.00%)	0.00%	11.00	00:22:46	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
8.	/?q=node/12	1 (0.59%)	0.00%	0 (0.00%)	100.00%	1.00	00:00:00	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
9.	/?q=node/2	1 (0.59%)	100.00%	1 (4.17%)	0.00%	8.00	00:05:29	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)
10.	/?q=node/3	1 (0.59%)	0.00%	0 (0.00%)	0.00%	4.00	00:04:53	0.00%	0 (0.00%)	$0.00 (0.00%)

Rows 1 - 10 of 10

Рис. 5. Информация о ссылках, по которым приходили посетители

Анкетирование показало, что дети позиционируют себя в опросных листах «активными» пользователями сети, но фактически активность заключается лишь в перепубликации (перепосте), а не в способности вести связный диалог или монолог (налицо обрывки мыслей, не организованный текст и т.п.). Анализ данных проведен с участием ученика ГБОУ гимназии г. Москвы № 1788 структурное подразделение № 5 Д. Бачина.



	Page	Exits	Pageviews	% Exit
		170 % of Total: 100.00% (170)	960 % of Total: 100.00% (960)	17.71% Avg for View: 17.71% (0.00%)
1.	/	**131** (77.06%)	284 (29.58%)	46.13%
2.	/?q=node/6	**6** (3.53%)	51 (5.31%)	11.76%
3.	/?q=node/13	**5** (2.94%)	77 (8.02%)	6.49%
4.	/info	**4** (2.35%)	43 (4.48%)	9.30%
5.	/?q=node/12	**3** (1.76%)	25 (2.60%)	12.00%
6.	/?q=node/19	**3** (1.76%)	26 (2.71%)	11.54%
7.	/?q=node/5	**3** (1.76%)	30 (3.12%)	10.00%
8.	/?q=node	**2** (1.18%)	2 (0.21%)	100.00%
9.	/?q=node/2	**2** (1.18%)	28 (2.92%)	7.14%
10.	/?q=node/3	**2** (1.18%)	14 (1.46%)	14.29%

Rows 1 - 10 of 63

Рис. 6. Информация о страницах,
на которых дети заканчивали свое путешествие по сайту

В результате проведенной работы сделан вывод о том, что мотивировать детей на создание контента, не направленного на них самих можно, однако этот контент должен быть максимально типизирован, короток и прост, так как создание материалов в свободной форме вызывает много проблем. Сделанные в работе выводы могут оказаться полезными при создании интернет-сервисов, ориентированных для детей.

Библиографический список

1. Яковлев, А. Веб-аналитика: основы, секреты, трюки / А. Яковлев, А. Довжиков. – СПб.: БХН-Петербург, 2010. – 272 с.

К содержанию

УДК 330.4+519.86

МОДИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ НЕЙМАНА ДЛЯ ЧЕТЫРЁХСЕКТОРНОЙ ЭКОНОМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ С ВЫДЕЛЕННЫМ ЦЕНТРОМ УПРАВЛЕНИЯ

В.А. Пьянков

В статье представлено краткое описание построенной математической модели для четырёхсекторной экономической системы с выделенным центром управления. Определяются критерии верификации модели и излагаются результаты.

Ключевые слова: экономическая система; математическое моделирование; модели межотраслевого баланса.

Современная ситуация в экономической жизни страны является сложной. Насущной является проблема моделирования развития кризисных ситуаций в экономике. Поэтому модели, позволяющие анализировать различные сценарии развития экономических систем и делать различные прогнозы, являются особенно актуальными.

Целью исследования является построение имитационной модели экономической системы, которая позволит анализировать, сравнивать и отрабатывать различные сценарии экономического развития, различные системы правил экономической деятельности. Она должна отвечать на вопросы о том, какие эффекты могут возникнуть в экономике под действием различных факторов, как внешних, так и внутренних, как стратегия развития, внешние факторы и реакция на них взаимодействуют в динамике.

Задачи моделирования макроэкономического развития и его планирования нашли отражения во многих работах [4, 5]. Одной из самых широко используемых является модель межотраслевого баланса Леонтьева и динамические модели на её основе [4, 5].

Однако такие модели дают лишь общий ответ на вопрос, какой должна быть интенсивность производства при заданном уровне потребления. Смоделировать различные сложные сценарии с взаимодействием стратегии развития, внешними факторами воздействия на экономическую систему и реакцией на них со стороны экономики эти модели не могут.

Также при построении этих моделей на интенсивность производственных процессов, как на независимую переменную, не накладывается никаких ограничений, тогда как она в реальности она ограничена производительностью имеющихся в наличии производственных фондов (сектор основных средств), а также затрачиваемыми в ходе производства материалами и услугами (сектор оборотных средств и сектор услуг).

Более того, во многих имеющихся моделях предполагается, что выпуск продукции какой-либо отрасли происходит либо ровно в момент затрат необходимой продукции других отраслей (если модель непрерывна), либо в следующем шаге (если модель дискретна). Такое упрощение реальности является недопустимым, поскольку длительности производственных процессов являются величинами существенными по сравнению с величинами временных интервалов, на которых производится моделирование, а также сами длительности между собой существенно различны (от нескольких минут до нескольких лет). Необходимость учета такого фактора как длительность производственного цикла при анализе макроэкономических процессов неоднократно отмечалась известным российским экономистом М.Л. Хазиным [9]. Придавая особое значение этой особенности производственных процессов, он показал, что она является одной из важных составляющих, приведших к нынешнему финансово-экономическому кризису.

Таким образом, создаваемая модель должна:

- учитывать длительности производственных процессов;
- учитывать ограничения, налагаемые на интенсивность производственных процессов;
- давать возможность анализировать и сравнивать различные сложные сценарии экономического развития.

Экономика как система

Экономика представляется как система, производящая заданные объемы товаров и услуг.

Для этого системе необходимо, чтобы внутри нее производился определенный набор товаров и услуг конечного потребления (этот набор не обязательно совпадает с полной потребностью общества, что компенсируется импортом, т.е. связью с внешней средой). В свою очередь для производства этого набора необходимо множество промежуточных товаров и услуг. Для устойчивого существования экономической системы требуется, чтобы необходимый набор потоков товаров и услуг поддерживался неубывающим во времени. Функцию по производству различных товаров и услуг, то есть по генерации потоков, выполняют элементы – производственные процессы (отрасли).

Каждый производственный процесс представляет собой центр, распоряжающийся накопленными от потребленных потоков товарами и потоками потребляемых услуг с целью генерации определенного набора потоков товаров и услуг. Предполагается, что процесс лишь производит генерацию потока, величина которого зависит от параметров его функционирования, которые являются управляющими и задаются для него извне.

Каждый производственный процесс является элементарной единицей экономической системы. Этот элемент может как совпадать, так и не совпадать с понятием отрасли.

Основой такого деления служит способность того или иного центра распоряжения ресурсами к генерации из потребляемых потоков товаров и услуг нового потока. С этой точки зрения минимальным процессом может быть элементарный трудовой процесс одного человека.

Между собой и с внешней средой производственные процессы связаны потоками товаров и услуг, часть которых создается самой системой. Часть является связью с внешней средой – потоки экспорта и импорта.

Каждый из потоков востребован различными производственными процессами и внешней средой, в то же время он сам может складываться благодаря различным силам и воздействию внешней среды.

Помимо функции по генерации необходимых потоков товаров и услуг, как для промежуточного, так и для конечного потребления, возникает необходимость по управлению параметрами функционирования каждого из производственных процессов, распределением потоков внутри системы и регулированием потоков через границу системы.

Данная функция реализуется субъектом(-ами) управления, подсистемой управления, определяющей величины потребления каждым процессом требуемого им потока, объемы генерации каждым потоком

Таким образом, внутри экономической системы можно выделить две подсистемы:

- производственное ядро (конгломерат производственных процессов системы), генерирующее различные потоки товаров и услуг, промежуточного или конечного потребления;
- центр управления, регулирующий пропорции деления потоков между производственными процессами, а также потоки через границу (экспорт и импорт), и определяющий параметры функционирования каждого производственного процесса.

При этом подсистему производственных сил можно в свою очередь поделить на четыре сектора:

- сектор основных средств;
- сектор оборотных средств;
- сектор услуг;
- сектор товаров конечного потребления.

Центр управления может быть как единым субъектом, определяющим сразу все параметры функционирования производственного ядра, так и множеством субъектов, каждый из которых определяет параметры функционирования одного или нескольких процессов, а параметры распределения потоков в таком случае определяются некоторой системой правил.

Разделение единой экономической системы на две подсистемы – физическое ядро и центр управления – является еще одной особенностью разработанной модели. Благодаря этому можно изучать влияние на производственные процессы в различных целях разных систем правил, а также поз-

воляет тестировать гибриды разных систем правил, тогда как в подавляющем большинстве существующих моделей система правил взаимодействия субъектов управления производственными процессами совмещена с ними же, в результате чего при изменении правил модель становится нерабочей.

Финансовая система и денежные потоки в ней являются вспомогательной подсистемой центра управления, когда он представлен конгломератом субъектов, принимающих решения, и действующих на основе капиталистической системы правил. Взаимодействие субъектов, определение ими на основе системы правил пропорций распределения осуществляется посредством финансовой системы. Иными словами, финансовая система есть реализация определенной системы правил взаимодействия субъектов.

В финансовую систему здесь включаются различные денежно-кредитные и финансовые институты, потоки наличных и безналичных денег.

Поскольку современная ситуация характерна тем, что экономической системе России разрываются такие связи с внешней средой, как потоки определенных товаров и услуг, а также связи на уровне финансовой системы, вследствие чего привычная система управления становится недееспособной, то предлагаемое описание экономической системы видится вполне адекватным.

Математическая модель производственного ядра

Пусть имеется множество величин $F(t)=\{f(t)\}$, изменяющихся во времени $t=0,1,2,...,t_N$, представляющих потоки товаров и услуг, и множество величин $X(t)=\left\{x(t), x(t)=x\left(F'\left(t-\tau_{f,x}\right)\right), F'\subset F\right\}$, представляющих интенсивности всех возможных производств, действующих на заданном множестве потоков, где $\tau_{f,x}$ – временная задержка, характерная для данной производства $x(t)$ при использовании ресурса $f(t)$, иными словами это временной лаг, показывающий задержку воздействия ресурса $f(t)$ на производство $x(t)$.

В качестве отправной точки для дальнейших рассуждений взята модель Неймана [5].

Пусть задан набор производств $x_j(t)\in X(t),\ j\in J$, характеризуемых парами векторов $(a_i,b_i)_j$ – коэффициентами выпуска и затрат потоков $f_i(t),\ i\in I$ при единичной интенсивности процесса $x_j(t)$.

Потоки складываются от работы всех производственных сил в данный момент:

$$f_i(t)=\sum_{j\in J}a_{ij}x_j(t);\ \forall i\in I\ . \qquad (1)$$

Интенсивность каждого производственного процесса ограничена производительностью основных фондов, количеством оборотных фондов и потоком оказываемых услуг. Производительность каждого из основных фондов –

интенсивность производства, которую он может обеспечить при своей полной загрузке и полном достатке оборотных средств и прилагающихся услуг.

Каждый из основных, оборотных фондов и услуг, используемых тем или иным производственным процессом, зависит от соответствующих потоков $f_i(t),\ i \in I$. Также тот или иной поток может быть расценен производственным процессом либо как поток основных фондов, либо как поток оборотных средств, либо как поток услуг.

Предельная производительность фонда $F_{ij}^{\varepsilon}(t)$ процесса $x_j(t)$, зависящая от определенного потока товаров $f_i(t),\ i \in I$, представляет собой накопленную величину потока этого товара $p_{ij}(t) f_i(t)$, умноженную на коэффициент c_{ij}, за вычетом накопленной интенсивности процесса $x_j(t)$, умноженной на коэффициент d_{ij}, что отражает износ основных фондов в хорде их работы:

$$F_{ij}^{\varepsilon}(T) = \sum_{t=0}^{T} \left[c_{ij} p_{ij}(t) f_i(t) - d_{ij} x_j(t) \right],\ \forall j \in J,\ i \in \varepsilon_j(I). \qquad (2)$$

Далее, как было указано выше, в ходе функционирования, производственный процесс потребляет b_{ij} оборотных фондов на единицу интенсивности в момент времени $t - \tau_{ij},\ \forall j \in J,\ i \in \theta_j(I)$.

К моменту времени T в распоряжении процесса $x_j(t)$ будет $\sum_{t=0}^{T} \left[p_{ij}(t) f_i(t) - b_{ij} x_j(t) \right],\ \forall j \in J,\ i \in \theta_j(I)$ каждого из оборотных фондов процесса $x_j(t)$. Тогда предельная производительность оборотных фондов в момент T будет определяться как:

$$F_{ij}^{\theta}(T) = \frac{1}{b_{ij}} \sum_{t=0}^{T} \left[p_{ij}(t) f_i(t) - b_{ij} x_j(t) \right],\ \forall j \in J,\ i \in \theta_j(I). \qquad (3)$$

Потребление услуг $f_i(t),\ i \in \gamma_j(I)$ процессом $x_j(t)$ происходит мгновенно в момент времени $t - \tau_{ij}$, что ограничивает интенсивность $x_j(t)$ величиной $\min\limits_{i \in \gamma_j(I)} b_{ij} p_{ij}\left(t - \tau_{ij}\right) f_{ij}\left(t - \tau_{ij}\right)$.

Таким образом, интенсивность производственного процесса $x_j(t)$ определяется как:

$$x_j(t) = \min \begin{bmatrix} \eta_j\left(t - \tau_{ij}\right) \min\limits_{i \in \varepsilon_j(I)} F_{ij}^{\varepsilon}\left(t - \tau_{ij}\right); \\ \min\limits_{i \in \theta_j(I)} F_{ij}^{\theta}\left(t - \tau_{ij}\right); \\ \min\limits_{i \in \gamma_j(I)} b_{ij} p_{ij}\left(t - \tau_{ij}\right) f_{ij}\left(t - \tau_{ij}\right) \end{bmatrix}, \qquad (4)$$

где $\eta_j(t)$ – загрузка основных фондов в момент времени t.

В конечном счете, подсистема центров распоряжения ресурсами описывается следующими соотношениями:

$$f_i(t) = \sum_{j \in J} a_{ij} x_j(t); \ \forall i \in I;$$

$$x_j(t) = \min \begin{bmatrix} \eta_j(t-\tau_{ij}) \min\limits_{i \in \varepsilon_j(I)} F_{ij}^{\varepsilon}(t-\tau_{ij}), \\ \min\limits_{i \in \theta_j(I)} F_{ij}^{\theta}(t-\tau_{ij}), \\ \min\limits_{i \in \gamma_j(I)} b_{ij} p_{ij}(t-\tau_{ij}) f_{ij}(t-\tau_{ij}) \end{bmatrix}; \quad (5)$$

$$F_{ij}^{\varepsilon}(T) = \sum_{t=0}^{T} \left[c_{ij} p_{ij}(t) f_i(t) - d_{ij} x_j(t) \right], \ \forall j \in J, \ i \in \varepsilon_j(I);$$

$$F_{ij}^{\theta}(T) = \sum_{t=0}^{T} \left[\frac{1}{b_{ij}} p_{ij}(t) f_i(t) - x_j(t) \right], \ \forall j \in J, \ i \in \theta_j(I).$$

Верификация

В литературе не раз упоминались сложности численной проверки моделей такого рода: начиная от отсутствия данных по имеющимся производственным мощностям, заканчивая неполнотой данных межотраслевых балансов или же их полным отсутствием.

Тем не менее, имеются явления в экономических системах, которые данные модели должны воспроизводить: кризисы перепроизводства и кризисы недостаточной эффективности капитала [4, 6, 8, 9].

Данные типы кризисов характерны для капиталистической системы управления. В ходе проведенных экспериментов были воспроизведены кризисы перепроизводства.

Кризис недостаточной эффективности капитала связан с ростом экономической системы капитализма, заключающимся в углублении разделении труда, которое упирается в ограничение рынков сбыта готовой продукции. Подробнее об этом кризисе написано в [8,9].

Для воспроизведения такого типа кризиса модель должна быть существенно достроена. Необходимо, чтобы в модели был описан процесс углубления разделения труда.

Также были найдены данные по межотраслевому балансу Российской Федерации на 2006 г. В настоящий момент ведется адаптация данный и выяснение вопроса возможности верификации модели по имеющимся данным.

Библиографический список

1. Пьянков, В.А. Имитационное моделирование экономических систем на основе принципов физической экономики. / В.А. Пьянков, А.Д. Липенков // Математическое и статистическое исследование социально-экономических процессов. – 2011 – № 3. – С. 21–28.

2. Лихтенштейн, В.Е. Введение в теорию развития. / В.Е. Лихтенштейн, Г.В. Росс. – М.: Финансы и статистика, 2011.

3. Пьянков, В.А. Управление нагрузкой отраслей и межотраслевыми поставками в математической модели абстрактной замкнутой экономической системы / В.А. Пьянков // ITIDS+RRS '2014 Proceedings. – 2014. – С. 104–108.

4. Петров, В.П. Стоимость. Деньги. Экономические кризисы перепроизводства / В.П. Петров. – М.: Либроком, 2012. – 104 с.

5. Шикин, Е.В. Математические методы и модели в управлении / Е.В. Шикин, А.Г. Чхартишвили. – М.: КДУ, 2009. – 440 с.

6. Люксембург, Р. Накопление капитала // Р. Люксембург. – М.: Государственное социально-экономическое издательство, 1931. – 504 с.

7. Люксембург, Р. Введение в политическую экономию / Р. Люксембург. – М.: Красанд, 2010. – 232 с.

8. Смит, А. Исследование о природе и причинах богатства народов. В 2 т. / А. Смит. – М.: Собрание, 2011. – 864 с.

9. Типы кризиса при капитализме. – URL: http://worldcrisis.ru/crisis/1763699/.

К содержанию

УДК 368:336.714 + 336.714

УПРАВЛЕНИЕ ИНВЕСТИЦИОННЫМ ПОРТФЕЛЕМ СТРАХОВОЙ КОМПАНИИ

И.А. Тетин

В статье рассмотрены различные подходы к управлению инвестиционным портфелем. Показано решение задачи определения желаемой доходности портфеля с помощью рисковой стратегии по квантильному критерию. Указана методика наполнения оптимального портфеля активами с использованием кластерного анализа.

Страховая компания обладает двумя источниками получения дохода: андеррайтинг и инвестиционная деятельность. Высокая конкуренция на рынке страхования не позволяет получать значительный доход от андеррайтинга, поэтому основным источником дохода для страховой компании остается инвестиционная деятельность, которая заключается в управлении инвестиционным портфелем (ИП). ИП состоит из набора рисковых и безрисковых финансовых активов. Рисковыми считаются активы, размеры денежных поступлений по которым точно определить невозможно, их можно оценить только с определенной вероятностью. Безрисковыми активами считаются такие, которые обеспечивают денежные поступления в заранее установленных размерах. Примером безрисковых вложений является вложение в недвижимость. Примерный способ оценки недвижимого имущества приведен в работе [2]. Под управлением ИП будем понимать изменение его структуры для получения требуемых параметров в терминах доходность-риск.

Среди возможных подходов к управлению ИП можно выделить два основных. Первый подход – подход Марковица (Mean-Variance Approach, 1952) [7]. В основе его лежит предположение о том, что инвестор хотел бы максимизировать как доходность портфеля, так и минимизировать риск, или минимизировать риск портфеля для получения нужной доходности. Тобиным [22] была обобщена модель Марковица включением в модель безрискового актива в дополнение к рисковым активам, возможностью коротких продаж и т.д.

Следует также отметить факторные модели ценообразования активов, в частности модель CAPM (Capital Asset Pricing Model) [13], [19], арбитражные модели [16], [17]. В данных моделях рассматривается большое число активов с помощью условного совместного распределения вероятностей. Риск портфеля делится на систематический и несистематический. Преимущество данного подхода в том, что эффективное множество портфелей представимо в виде луча. В этом случае задача поиска оптимального портфеля является не квадратичной, а линейной задачей оптимизации. Доказано, что при бесконечном числе активов, оптимальные портфели полностью диверсифицируют риск случайной доходности компонентов портфеля.

Недостаток модели CAPM в том, что модель является однофакторной (фактор – пропорциональный рыночный риск) и ограничена рядом нереалистичных предпосылок, поэтому получаемые результаты показывают значительные отклонения между реальными данными и модельными результатами.

В трехфакторной модели Фама-Френча [8] к модели CAPM были добавлены еще два фактора: размер компании и соотношение цены к балансовой стоимости, что повысило точность модели.

Проблема оптимизации структуры портфеля в зависимости от выбора функции риска в подходе Марковица сводится к решению задач линейного или стохастического программирования, является задачей в статической постановке и относится к классу однопериодных моделей. Из этого следуют недостатки: стратегии управления не зависят от текущего значения капитала и не учитывают динамику цен, ожидаемые доходности активов предполагаются постоянными на всем периоде инвестирования, минимум риска достигается лишь в конце горизонта инвестирования и т.д.

Второй подход – подход Мертона (1969) [14] и Самуэльсона [18], которые представили задачу оптимизации портфеля как частный случай задачи стохастического управления, такие задачи относятся к классу многопериодных моделей. Оптимизационная проблема в классической постановке Мертона заключается в определении стратегии управления портфелем в непрерывном времени, которая максимизирует некоторую интегральную функцию полезности, зависящую от уровня текущего потребления и капитала в конечной точке горизонта инвестирования. Для решения задачи Мертон предложил использовать стандартные методы динамического программирования – принцип оптимальности Беллмана [6] и уравнение Гамильтона-Якоби-Беллмана (Г-Я-Б). Мертон решил задачу оптимизации в конечном и бесконечном инвестиционном горизонте для дискретного и непрерывного времени.

Фрауендофер и Сейде [9], [10], [11], [20] ввели подход, исключающий необходимость стационарности доходностей активов и нормальности их распределения. Они предложили модель стохастической волатильности для отражения особенностей поведения рисковых активов.

Таким образом, подход Мертона позволяет решить задачу оптимизации для случая, когда портфель включает в себя один рисковый актив. В многомерном случае, имея диверсифицированный портфель из множества активов, применение традиционных подходов к оптимизации портфеля упирается в проблему численного решения дифференциальных уравнений динамического программирования Г-Я-Б, которая известна как «проклятье размерности» [15].

Следует также отметить, что использование критерия качества инвестиций в форме математического ожидания может привести в асимптотике к неограниченному в среднем доходу, но вероятность полного разорения при этом будет стремиться к единице, т.н. «биржевой парадокс» [4]. Для преодоления биржевого парадокса следует использовать квантильный критерий оптимальности. Известно, что метод динамического программирования не может быть непосредственно применен к задачам управления по квантильному критерию, но квантильная задача управления может быть сведена [1] к задаче оптимального управления по вероятностному критерию, для которой метод динамического программирования применим. Также можно использовать стационарные стратегии, например, стратегию Келли [12] или квантильный критерий [1].

В отличие от банков, инвестиционных компаний и частных инвесторов, инвестиционная деятельность страховой компании строго регламентирована. Государственные органы осуществляют контроль за размещением страховых резервов. В приказе Министерства финансов РФ от 2 июля 2012 г. № 100н приведены 20 категорий активов, принимаемых для обеспечения страховых резервов, перечислены требования к активам и указаны структурные соотношения активов и страховых резервов, т.е. государством установлены ограничения на долю каждого актива в портфеле.

Таким образом, вопрос выбора подходящей модели оценки финансовых активов и выбора их, с учетом законодательных ограничений, для формирования инвестиционного портфеля страховой компании представляет особый интерес.

Согласно Приказу Министерства финансов РФ от 2 июля 2012 г. № 100н инвестиционный портфель может целиком состоять только из рисковых активов. Минимальная же доля рисковых активов в портфеле равна 30 % [3].

Пусть страховой рынок в течение месяца $t = 0,1,...,T$ состоит из некоторого числа $J(t)$ страховщиков $j = 1,2,...,J(t)$. Инвестиционные активы $I_j(t)$ полагаем равными доле $k_j^0(t) \in (0,1)$ страховых резервов, $S_j(t-1)$ в предыдущем периоде, т.е. равными $I_j(t) = k_j^0(t) \cdot S_j(t-1)$.

Требуется распределить исходный капитал $I_j(t)$ с целью получения прибыли. Такое распределение необходимо осуществлять в течение заданного прогноза развития компании на периоде $t = t_0, t_0 + 1, ..T$, где t_0 – начало работы компании на рынке. Пусть $u_{1,j}(t) \in [0,25; 0,7]$ – доля группы безрисковых активов в инвестиционном портфеле. Доходность от вложения в безрисковые активы равна $L = b \cdot u_{1,j}(t) \cdot I_j(t)$, где b – процент от вклада в безрисковые активы. Доходность от вложения средств в рисковые активы является случайной величиной $H = x_i \cdot u_{2,j}(t) \cdot I_j(t)$, где x – процент от вклада в i – видов рисковых активов; x_i – независимые, одинаково распределенные случайные величины.

Для преодоления биржевого парадокса используется рисковая стратегия по квантильному критерию [1]:

$$\left(\forall i = \overline{1,t}\right)\left\{\begin{array}{l} u_{2i}^{\phi} = \begin{cases} 0,3, \text{ если } \dfrac{\phi}{I_{i,j}} \le (1+b)^{t+1-i}, \\ 0,75, \text{иначе;} \end{cases} \\ u_{1i}^{\phi} = 1 - u_{21}^{\phi} \cdot I_{i,j}. \end{array}\right.,$$

где ϕ – желаемый уровень дохода; $P_{\phi}(u)$ – вероятность получить доход ϕ, при использовании стратегии u. Разность $1 - P_{\phi}(u)$ характеризует риск получить доход меньший, чем ϕ.

Решение выбора рискового или безрискового портфеля зависит от требований страховой компании для размера желаемого дохода ϕ, достаточного для компенсации убытков от андеррайтинга. Значение величины желаемого дохода было найдено автором в работе [3].

Перейдем к решению второго этапа задачи – необходимо оптимально наполнить активами безрисковый и рисковый портфели. При формировании безрискового портфеля задача состоит в наполнении портфеля 30 % рисковых активов. Формирование рискового портфеля требует наполнения 75 % рисковых активов. Безрисковые активы выбираются произвольно, поскольку их доходность известна. Наполнение портфелей должно соответствовать нормативным ограничениям на долю каждой категории активов в портфеле. Каждая категория активов рассматривается отдельно. Например, акции составляют одну категорию активов, негосударственные облигации – вторую категорию, паи паевых инвестиционных фондов – третью и т.д. Из всего многообразия активов необходимо выбрать те активы, которые доставляют максимум доходности при подходящем для компании уровне риска.

С целью снижения несистематического риска воздействия случайных факторов на доходность активов, будем применять метод кластерного анализа [5].

Кластерный анализ – это метод разбиения выборки объектов на группы (кластеры) на основе расстояний и связей между ними, так, чтобы объекты внутри одного кластера были схожими, а объекты в разных кластерах существенно отличались. Если объектом является актив с определенной доходностью, то вместо случайного множества активов, исследователь получает набор кластеров, объединенных на основе сходных тенденций в динамике доходности [5].

На первом шаге стандартизируем исходные данные:

$$P_{i,t} = \frac{\hat{P}_{i,t}}{\sigma_i},$$

где $P_{i,t}$ – цена актива компании i на момент t, σ_i – среднеквадратическое отклонение цен актива i-ой компании. Затем вычисляем среднемесячные стоимости активов $\overline{P}_{i,t} = \frac{1}{T}\sum_{l=1}^{T} P_{i,l}$, здесь t – месяц, T – количество данных за месяц. На следующем шаге, скользящим окном находим доходности автивов:

$$R_t = \frac{\max(\overline{P}_t, \overline{P}_{t+1,} \overline{P}_{t+2}) - \min(\overline{P}_t, \overline{P}_{t+1,} \overline{P}_{t+2})}{\min(\overline{P}_t, \overline{P}_{t+1,} \overline{P}_{t+2})},$$

где R_t – доходность актива на момент времени t; $\overline{P}_t$ – среднемесячная цена актива.

Способ скользящего окна отражает пассивную (не спекулятивную) стратегию инвестирования, разница между покупкой и продажей не превышает двух месяцев. Такой способ нахождения доходностей исключает заведомо убыточные операции, но допустим только на известных данных (используется обучающая выборка). Полученные скользящим окном данные доходностей используются для прогноза [5].

Прогноз волатильности доходностей на период инвестирования можно осуществить с помощью модели авторегрессионной условной гетероскедастичности ARCH [5]. В результате, формируется матрица доходностей акций для кластерного анализа. Риск в этом случае вычисляется как среднеквадратическое отклонение доходностей от математического ожидания доходностей.

Подобная задача должна решаться в случае выбора различных категорий рисковых активов, как то стоимость драгоценных металлов, негосударственных облигаций, паев паевых инвестиционных фондов и т.д. Окончательный портфель будет сформирован при известных данных о доходностях и рисках всех возможных категорий активов. Категории рисковых активов должны заполняться в порядке убывания доходности-риска.

В большинстве случаев, страховая компания будет стараться избегать риска и размещать страховые резервы в кластер с низким уровнем риска, однако, в случае, когда результативность такого вложения меньше желаемого до-

хода ϕ, страховая компания меняет свое отношение к риску и должна выбирать кластер с умеренным или средним уровнем риска. Данный выбор осуществляется в зависимости от функции полезности страховой компании.

Библиографический список

1. Кибзун, А.И. Оптимальное управление портфелем ценных бумаг / А.И. Кибзун, Е.А. Кузнецов // Автоматика и Телемеханика. – 2001. – № 9. – С. 101–113.

2. Панюков, А.В. Эконометрическая модель нахождения стоимости квартиры на рынке вторичного жилья г. Челябинска / А.В. Панюков, И.А. Тетин // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Рынок: Теория и практика». – 2006. – Вып. 2. – № 1 (56). – С. 113–119.

3. Панюков А.В. Управление инвестиционным портфелем страховой компании / А.В. Панюков, И.А. Тетин // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: «Экономика и менеджмент». – 2012. – №. 22 (281). – С. 77–83.

4. Секей, Г. Парадоксы в теории вероятностей и математической статистике / Г. Секей. – М.: Мир, 1990.

5. Тетин, И.А. Выбор активов для формирования инвестиционного портфеля страховой компании / И.А. Тетин // Вестник НГУЭУ. – 2014. – № 4. – С. 144–152.

6. Bellman R. (1957). Dynamic Programming, 342 pp. Princeton, NJ, USA: Princeton University Press.

7. Markowitz H. Portfolio Selection // Journal of Finance. 1952. Vol.7, 1. Pp. 77–91.

8. Fama E., French K. The cross-section of expected stock returns // Journal of Finance. – 1992. – № 47. – Pp. 427–465.

9. Frauendorfer K. The stochastic programming extension of the Markowitz approach // International Journalon Neuraland Mas-Paralel Computing and Information Systems. – 1995. – № 5. – Pp. 449–460.

10. Frauendorfer K., Siede H. Portfolio Selection Using Multistage Stochastic Programming // Central European Journal of Operations Research. – 2000. - № 7. – Pp. 277–289.

11. Frauendorfer K., Siede H. Time Series Models in Intertemporal Portfolio Optimisation // St. Gallen, CH: Institute for Operations Research, University of St. Gallen. – 1998.

12. Kelly J. A new Interpretation of Information Rate // Bell System Tec. J., 1956 V. 35. Pp. 917–926.

13. Lintner J. The valuation of risky assets and the selection of risky investments in stock portfolios and capital budgets // Review of Economics and Statistics. – 1965. № 47. Pp. 13–37.

14. Merton R.C. Continuous-time finance. Maiden MA: Blackwell, 1990, Pp. 97–119.

15. Pham H. Smooth solutions to optimal investment models with stochastic volatilities and portfolio constraints Applied Mathematics and Optimization. 2002. 46. Pp. 55–78.

16. Roll R., Ross S. An empirical investigation of the arbitrage pricing theory // Journal of Finance. – 1980. № 35(5). Pp. 1073–1103

17. Ross S. The arbitrage theory of capital asset pricing // Journal of Economic Theory. – 1976. № 13. Pp. 341–360.

18. Samuelson P.A. Lifetime portfolio selection by dynamic stochastic programming // The Review of Economics and Statistics. – 1969. № 51(3). Pp. 239–246.
19. Sharpe W. Capital Asset Prices: A Theory of Market Equilibrium under Conditions of Risk // Journal of Finance. – 1964. № 19(3). Pp. 425–442.
20. Siede H. Multi-Period Portfolio Optimization – with Emphasis on an Mean–Variance Criterion: diss. PhD – Bamberg: University of St. Gallen, 2000. – 195 p.
21. The Theory of Interest Rates / Hahn F.H., Brechling F.P.R. – The Theory of Portfolio Selection / Tobin J. – London: Macmillan and Co., 1965.
22. Tobin J. Liquidity Preference as Behavior Towards Risk // Review of Economic Studies. – 1958. № 25. Pp. 68–85.

К содержанию

УДК 502.33(470.55) + 551.51

К ВОПРОСУ ОБЪЕКТИВНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ СЛУЧАЕВ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ ГОРОДСКОЙ АТМОСФЕРЫ (НА ПРИМЕРЕ ЧЕЛЯБИНСКА)

С.М. Абдуллаев, Е.А. Напольских, О.Ю. Ленская

Обоснована необходимость и предложен новый метод оценки степени экстремального загрязнения городской атмосферы. Объединяя традиционные методы «на конце трубы» и новые процедуры «жизненного цикла», метод включает стадии: 1) обработки многолетних данных мониторинга загрязняющих веществ (ЗВ) в различных районах города; 2) выбор критических квантилей распределений ЗВ, используемых затем как индивидуальные пороги; 3) расчет баллов суточного превышения этих порогов в целом по городу. Результатом применения метода является климатически репрезентативная выборка случаев экстремального загрязнения (СЭЗ) атмосферы в теплый и холодный периоды года. На примере трехлетних наблюдений в Челябинске приведен краткий анализ метеорологических условий и эколого-химической структуры СЭЗ. Обсуждаются вопросы трансформации первичных (оксид азота) и стоков вторичных (двуокись азота и формальдегид) примесей.

Ключевые слова: оценка и прогноз загрязнения атмосферы, ПДК, жизненный цикл, обработка данных, химическая активность атмосферы, формальдегид, окислы азота.

1. Введение

1.1. Актуальность и аспекты проблемы. Высокий уровень загрязнения воздушной среды – главная экологическая проблема Южного Урала. Так, по многолетним данным Челябинск и Магнитогорск занимают весьма не почетные места как в общероссийском рейтинге хронически загрязненных крупных городов России, так и по числу случаев экстремального загрязнения [9].

Очевидно, что хроническое загрязнение – это результат комбинации а) значительного уровня валовых выбросов загрязняющих веществ (ЗВ); б) степени непосредственной опасности выбрасываемых ЗВ; в) высокой химической активности смеси ЗВ, способствующей возникновению вторичных газовых примесей, таких как формальдегид, так и мельчайших аэрозольных частиц – PM_{10} и $PM_{2,5}$ [1, 8–9].

1.2. Цели и задачи работы лежат в плоскости второго аспекта проблемы, а именно, в поиске ответов на вопрос: возможно ли снизить уровни экстремального загрязнения Челябинска? В проблеме снижения уровня экстремального загрязнения крупных агломераций можно выделить два класса взаимосвязанных оперативных задач – это задачи анализа и прогноза неблагоприятных метеорологических условий (НМУ) накопления и трансформации примесей, и задача пространственно-временного регулирования выбросов промышленности и транспорта в крупной по масштабам управления системе. В целом, эти задачи краткосрочного прогноза в мире и ряде городов России нашли положительное научно-практическое решение[1].

В этой работе мы обращаемся к главной нерешенной научной проблеме – прогнозирование редких природно-антропогенных событий экстремальной опасности. В нашем конкретном случае – это случаи экстремального загрязнения (СЭЗ) атмосферы, сочетающие погодные и климатические факторы НМУ, мезомасштабные локальные циркуляции, техногенные и социальные факторы жизненного цикла мегаполиса. На основе многолетнего изучения проблем городской среды нами конкретизирована основная задача на развитие эвристического объектно-ориентированного подхода к прогнозированию СЭЗ.

1.3. Характеристика работы. Объектом работы являются события СЭЗ, а её предметом способы выделения СЭЗ на основе данных многолетнего мониторинга атмосферы города Челябинска. Для этого в разделе 2 описана выборка исходных данных (п. 2.1); дан краткий обзор оценок состояния воздушной среды (2.2) и представлена основная идея подхода к выделению случаев СЭЗ (2.3), а пункте 2.4 описаны 4 процедурных этапа методики, проиллюстрированные двумя частными примерами получения новых знаний о природе явления. В разделе 3 приводится краткий анализ выборки СЭЗ, сопровождаемый характеристикой крупномасштабных и локальных условий погоды эпизодов СЭЗ (3.1) и описанием структуры СЭЗ – слагающих СЭЗ химических компонент СЭЗ (3.2). Кроме этого, в п. 3.2 обсуждаются естественные и антропогенные причины различия структуры СЭЗ теплого и холодного периода года. Направление дальнейших исследований обсуждаются в разделе 4.

[1] Острая проблема качества воздуха в нашем городе до сих пор не решена лишь по субъективным причинам. Приемлемое для региона практическое решение этой экологической, экономической и социальной проблем неоднократно предлагалось первым автором, остается актуальным (см. Абдуллаев, 2005, 2007).

2. Исходные данные, основная идея и этапы методики

2.1. Характеристика данных и предварительная обработка. В работе были использованы данные 2009, 2010 и 2011 годов метеорологического и экологического мониторинга, производимого городской метеостанцией и на восьми стационарных постах наблюдения за загрязнением атмосферного воздуха (ПНЗ), а также метеорологического температурного профилемера МТП-5, установленного на базе Челябинского ЦГМС. Исходные сведения были занесены в таблицы и проанализированы согласно п. 2.3.

2.2. Оценки состояния воздушной среды. На практике мониторинга, прогноза и экологического проектирования используется как минимум пять типов оценок: 1) для оценки экстремального воздействия на человека используется отношение концентрации ЗВ к предельно-допустимой максимальной разовой концентрации ($ПДК_{мр}$); 2) для оценки хронического загрязнения воздуха за сроки от месяца до года используется индекс загрязнения атмосферы (ИЗА), суммирующий средние уровни ЗВ, превышавших среднесуточную ПДК с учетом класса опасности ЗВ; 3) при проектировании и для получения разрешения на выбросы важна «фоновая концентрация 5%-й повторяемости» в долях ПДК; 4) в процедуре краткосрочного прогноза вычисляется число Р – суммарное число проб за данный срок с концентрациями ЗВ выше среднемноголетних на ПНЗ по отношению к общему числу проб на всех ПНЗ; 5) «оценки жизненного цикла» [8–9] производятся с учетом экологического ущерба от всех поступающих выбросов, в том числе и по мере трансформации их во вторичные примеси (например, в единицах *ELU – Environment Load Units* или других).

2.3. Основная идея. Понимая необходимость соблюдения преемственности процедур в области охраны среды (см.[1]), в разрабатываемом подходе к выделению СЭЗ, максимально использованы элементы методик (1–5), но при этом введены новые компоненты, дополняющие и компенсирующие недостатки (1-5). Так, относительные характеристики (1) и (2), включающие в оценку только ЗВ, достигшие порога ПДК, страдают от довольно часто вносимых изменений в санитарно-гигиенические нормативы ЗВ[2]. На практике это ведет к увеличению допустимой проектируемой, а затем и фактической антропогенной нагрузки (3). С другой стороны, кумулятивные нормы, учитывают все измеряемые (4) или потенциальные величины ЗВ (5), но этот вид оценок страдает недостаточной информацией поступающих от ПНЗ с ограниченным количеством измерений ЗВ (4) либо сведений оценок «жизненного цикла» локальных природно-антропогенных

[2] Например, с 24 мая 2014 года, ПДКм.р и ПДКс.с. для формальдегида (вещество 1-го класса опасности) установлены соответственно 0,05 мг/м³ и 0,01 мг/м³. О внесении изменения N 10 в ГН 2.1.6.1338-03 «Предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест» // Постановление Главного государственного санитарного врача Российской Федерации от 7 апреля 2014 г. N 27 г. Москва.

процессов (5). Пространственная неравномерность числа измерений и суммирования всех (или почти всех) ЗВ ослабляет реакцию этих норм на случаи экстремального загрязнения, в том числе и от локальных источников примесей (например, фторида водорода, тяжелых металлов и др.).

В методику определения случаев экстремального загрязнения (СЭЗ) положена следующая идея – использовать в качестве пороговой концентрации одну из старших квантилей распределения концентраций ЗВ на каждом из пунктов наблюдения, а интенсивность загрязнения атмосферы города характеризовать числом таких проб за искомый период времени, например, за сутки, неделю.

2.3. Этапы методики

Для выделения случаев экстремального загрязнения за 2009–2011 годы была применена процедура, состоящая из 4 этапов.

i. Предварительно на каждом из 8 ПНЗ разовые концентрации каждого из наблюдаемых ЗВ за год[3] были ранжированы по возрастанию и, согласно идее методики, построены кривые накопленных частот концентраций каждого ЗВ за год.

ii. В качестве порогового значения, отделяющего потенциальную принадлежность события к СЭЗ от остальных событий, выбрана концентрация, соответствующая старшей 100–95 % = 5 % квантили распределения ЗВ. Для этого на кривых накопленных частот найдены значения концентраций 95%-й повторяемости (С95) на каждом из ПНЗ.

Иллюстрация этапа. Очевидно, что значения С95 различных ЗВ подвержены значительной пространственной и межгодовой изменчивости. Например, пониженные годовые уровни С95 формальдегида колеблются в интервале 0,010–0,016 мг/м^3 и наблюдались на 16, 17 и 18 ПНЗ расположенных вблизи юго-восточной, северной и западной окраины города (см. табл. 1). Напротив, повышенные значения С95, от 0,028 до 0,035 мг/м^3, тяготеют к границам промышленных зон, в том числе ОАО «Мечел» и ОАО «ЧМЭК» (ПНЗ 22 и 20).

iii. На следующем этапе были идентифицированы так называемые **критические дни** – дни когда в течение суток зарегистрировано событие с превышением С95, хотя бы одним ЗВ на каком-либо ПНЗ. Всего в 2009, 2010 и 2011 год выделено соответственно 272, 285 и 284 критических дня. Таким образом, не менее, чем в ¾ периода наблюдений концентрации ЗВ одной из проб ЗВ равны или превышают критерий С95.

Иллюстрация этапа. На рисунке 1 изображена последовательность критических дней во времени, характеризуемых в баллах «суточного превышения порога» – суммарное по городу количество событий с регистрацией концентраций ЗВ, превышавших локальный критерий С95. Очевидно, что

[3] Это порядка тысячи измерений одного из веществ, т.е. от 5 до 20 тыс. измерений различных ЗВ на одном ПНЗ за год.

введенная кумулятивная характеристика демонстрирует значительную межсезонную и внутрисезонную изменчивость. Так, в летний период 2009 года её максимальные значения достигали ≈50 баллов, что примерно в 2 раза больше зимних максимумов около 25 баллов.

Таблица 1

Границы старшей 5 % квантили (мг/м3) распределения концентраций формальдегида на постах мониторинга атмосферы Челябинска (приведены концентрации 95 % повторяемости – С95 и максимальные Смах)

Пост	2009 год		2010 год		2011 год	
	С95	Смах	С95	Смах	С95	Смах
16	0,016	0,080	0,015	0,023	0,012	0,033
17	0,020	0,067	0,013	0,020	0,010	0,027
18	0,018	0,034	0,012	0,020	0,013	0,030
20	**0,031**	0,052	**0,028**	0,057	0,021	0,071
22	0,024	0,200	0,014	0,038	**0,035**	0,057
23	0,021	0,033	0,017	0,039	0,021	0,042
27	0,028	0,050	0,027	0,045	0,029	0,071
28	0,018	0,025	0,018	0,030	0,031	0,060

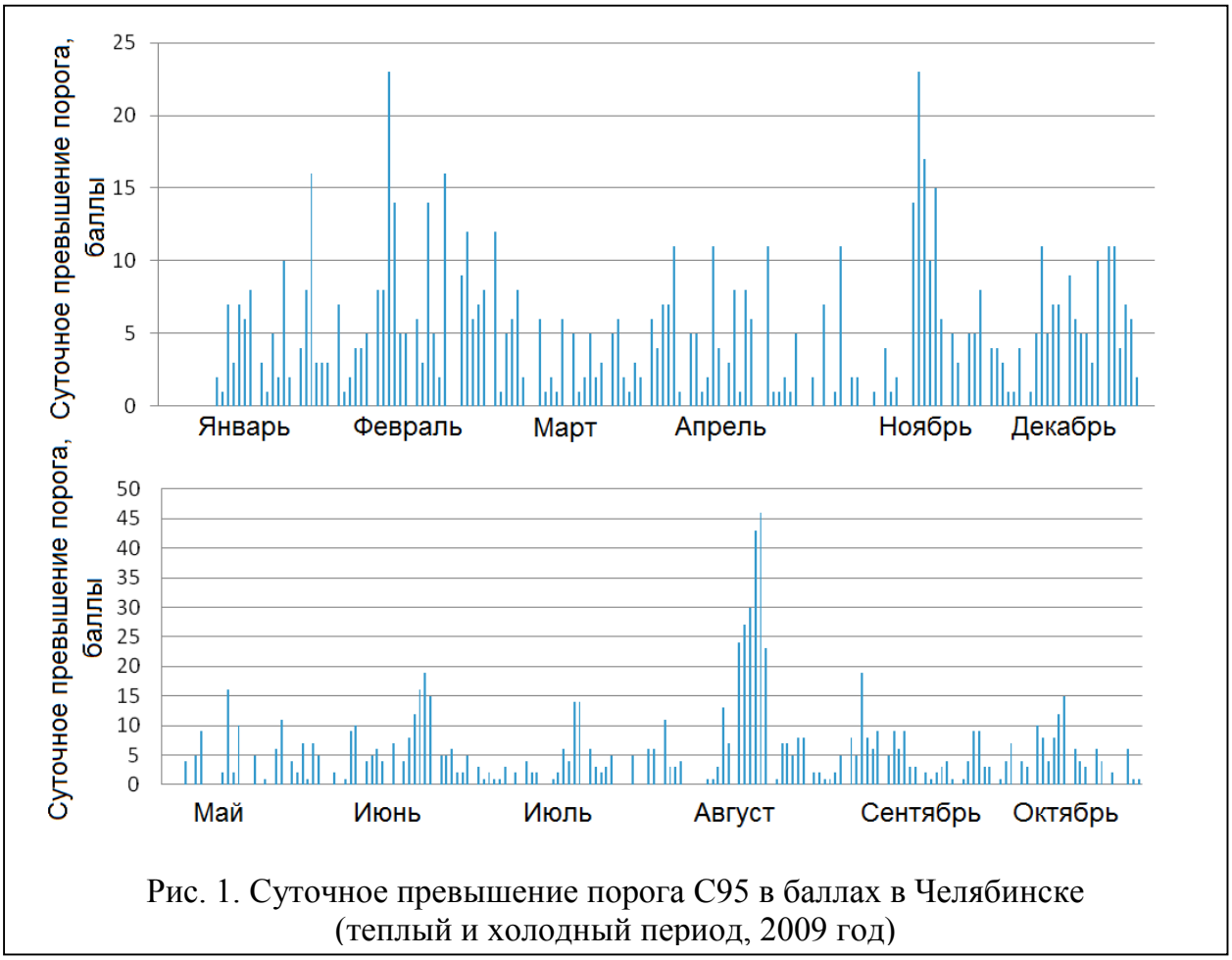


Рис. 1. Суточное превышение порога С95 в баллах в Челябинске (теплый и холодный период, 2009 год)

Для внутрисезонной изменчивости (рис. 1, вверху и внизу) характерны как единичные «всплески» загрязнения, наблюдаемые почти еженедельно, так и разделенные двумя – четырьмя неделями «пакеты загрязнения» с непрерывном 3–5 дневным эпизодом СЭЗ, доминирующем в сезонном ходе негативного воздействия.

iv. **Случаи экстремального загрязнения (СЭЗ)** выделены из общей выборки критических дней за год по сумме проб с концентрациями, превышавшими С95, или баллов. Затем для климатической и сезонной адекватности выборки в годовом ходе, выделено по 10 дней [4] теплого (май–октябрь) и холодного периода (ноябрь–апрель) с наибольшей суточной суммой числа проб в городе с концентрацией большей С95.

Иллюстрация результатов этапа. Использование кумулятивной нормы, позволяет с большой уверенностью выделять дни с СЭЗ в сравнении со способом по числу случаев превышения $ПДК_{мр}$, как в летний, так и зимней период. Это отчетливо заметно при сравнении последовательности дней с СЭЗ с числом событий с концентраций ЗВ выше ПДК м.р. (см. табл. 2 и 3, два последних столбца).

Таблица 2

Интенсивность и структура эпизодов СЭЗ теплого периода 2009 года

№ п/п	Дата СЭЗ	Формальдегид	Угарный газ	Взвешенные веще-	Сернистый газ	Двуокись азота	Аммиак	Монооксись азота	Сероводо-	Фенол	Фторид во-	Сумма, баллы	ЗВ ≥ ПДКм.р.
1	13.05	1	2	3	3	5	1				1	16	2
2	18.06	8			1	2	2			3		16	3
3	19.06	9	1	3	4	2	1		1			21	5
4	20.06	10			3		1				1	15	3
5	17.07	8			6							14	3
6	17.08		19	1						1		21	8
7	18.08	5	9	1	12							26	3
8	19.08	7	5	1	17	2				1		33	3
9	20.08	7	21	2	4	1				3	1	43	6
10	21.08	11	19	4		5			1	3		46	12
11	сумма	66	76	15	50	17	5	0	2	11	3	245	48

Действительно, пятикратное превышение суммы баллов СЭЗ (160–250) в сравнении с числом случаев концентраций больших $ПДК_{м.р}$ (30–50) дает не только более точную шквалу для ранжирования СЭЗ по интенсивности, но и возможность для интерпретации эколого-химической структуры, формирующей индивидуальный СЭЗ (см. п. 3.2).

[4] Выбор 10 дней как СЭЗ в теплый и холодный период объясняется достаточно просто. Это примерно 5 % от общего годового числа суточных наблюдений равно 0,05×365 суток≈19 суток.

Таблица 3

Интенсивность и структура эпизодов СЭЗ холодного периода 2009 года

№ п/п	Дата СЭЗ	Формальде-гид	Угарный газ	Взвешен-ные веще-	Сернистый газ	Двуокись азота	Аммиак	Монооксись азота	Сероводо-род	Фенол	Фторид во-дорода	Сумма, баллы	ЗВ ≥ ПДКм.р.
1	28.01		4	1	1	7		1		1	1	16	1
2	11.02	1	1	2	5	8		4		1	1	23	1
3	12.02				8	3		2				14	1
4	18.02		3	1		7		3				14	3
5	21.02			4	5	3		1	1		2	16	4
6	25.02		5	2	3			1			1	12	2
7	16.11		4	4	1	4		1				14	3
8	17.11		4	4	4	9		1	1			23	7
9	18.11			4	2	7		3		1		17	1
10	20.11	1	1	4		5		4				15	7
11	сумма	2	22	26	29	53	0	21	2	3	5	163	30

3. Результаты

3.1. Повторяемость метеорологических факторов, способствующих развитию **СЭЗ** выражена в процентах от общего числа СЭЗ. Температурная инверсия в нижнем слое атмосферы наблюдалась в 87 % СЭЗ холодного сезона и в 86 % случаях в теплый период. Штиль и слабый переменный ветер в течение СЭЗ отмечался в 72 % в холодный период и 57 % в теплый. В оставшихся СЭЗ ветер не превышал 5 м/с, причем в холодный период это были ветра ЮВ и ЮЗ четвертей ~25 %, а в теплый период, в равной мере ЮВ, СЗ и СВ ветра (33 %). Явления, наблюдавшиеся в СЭЗ холодного периода, это туманы и дымки (13 %), а в СЭЗ теплого периода наблюдались слабые осадки, ливневые дожди и грозы (18 %).

3.2. Эколого-химическая структура экстремального загрязнения Челябинска определяется комплексом из 10 типичных для городской атмосферы поллютантов, суммарные годовые и сезонные вклады которых представлены в таблице 4. Основной вклад (75 %) в годовую повторяемость СЭЗ (табл. 4, строка 1) вносят традиционные для городской атмосферы газы – монооксид углерода, двуокись азота, сернистый газ и формальдегид.

Таблица 4

Сводная химическая структура экстремального загрязнения воздушной среды Челябинска (сумма в баллах за трехлетку)

№ п.п.	Повторяемость	Фор-мальде-гид,	Угарный газ, CO	Взвешен-ные веще-	Сернистый газ	Двуокись азота (NO_2)	Аммиак	Окись азота (NO)	Серово-до-род	Фенол	Фторид во-дорода
1	За три года	197	355	87	186	202	35	59	13	87	35
2	Три теплых сезона	171	272	29	94	30	33	1	2	51	4
3	Три холодных сезона	26	83	58	92	172	2	58	11	36	31
4	Теплые–холодные	145	189	-29	2	-142	31	-57	-9	15	-27

Сезонные компоненты химического состава СЭЗ и его изменения демонстрируется в строках 2, 3 и 4 таблицы 4. В СЭЗ теплых сезонов преобладают процессы, ведущие к доминированию концентраций оксида углерода и формальдегида. В формировании СЭЗ холодного периода, напротив, доминирует процессы с участием окислов азота II и IV. Заметен вклад взвешенных веществ. Примечательно, что ряд веществ является маркером специфических аэрохимических условий. Например, явным «термофилом» является аммиак, а окись азота, фторид водорода и сероводород – типичные «криофилы». Сернистый газ и фенол – «мезофиллы».

3.3. Обсуждение. Сезонность эколого-химической структуры экстремального загрязнения Челябинска частично объяснима тем, что интенсивность и структура выбросов всех элементов городской системы имеют сезонные колебания, причем реакция этих элементов на температурный фон может быть различной. В холодный период, увеличивается нагрузка на теплоэнергетические техногенные элементы и с ней растут валовые выбросы продуктов сгорания – оксидов углерода и азота. Неконтролируемое поступление продуктов (аммиак, метан) биологического разложения от биотехнических элементов, подобных полигонам бытовых отходов (проще «городской свалке») или системам очистки сточных вод, максимально в теплый период. Заметим, что депонирование загрязнений городским ландшафтом имеет собственный сезонный цикл, а в отдельные периоды ландшафты сами могут быть источником примесей.

С другой стороны, химический состав воздушной среды зависит от скорости трансформации первичных примесей во вторичные продукты, т.н. химической активности атмосферы. В практике мониторинга городской атмосферы [3] химическая активность часто оценивается как отношение концентрации двуокиси азота NO_2 к сумме концентраций оксидов азота NO_x присутствующих в воздушной среде, и обычно сводится к коэффициенту трансформации $КТ=[NO_2]/([NO]+[NO_2])$. Повышенный КТ обычно означает не только ускорение превращения NO_x в NO_2, но косвенно интенсификацию последовательных фотохимических реакциях, ведущих к появлению новых ЗВ, в том числе формальдегида.

На химическую активность влияет интенсивность солнечного излучения, температура и влажность воздуха, наличие малых примесей-катализаторов и ингибиторов процессов и др. факторы. Анализ этой проблемы сотрудниками ГГО [2–3] выявил факты, важные для интерпретации физико-химических процессов, ведущих к наблюдаемой структуре СЭЗ. Во-первых, по пока неизвестным причинам химическая активность атмосферы Челябинска резко возросла. Во-вторых, более чем 60-процентное изменение КТ, произошедшее с 1997 по 2010 год в Челябинске, является одним самых значимых среди городов России [3], и в итоге коэффициент трансформации до-

стиг почти предельных значений ~ 0,7. С другой стороны, сезонное увеличение либо уменьшение температуры и интенсивности инсоляции ведет к интенсификации процессов по всей цепочке превращений от оксидов азота до формальдегида. Этим можно объяснить высокий вклад формальдегида в формирование летних СЭЗ и отсутствие такового от оксида азота NO. Низкая скорость реакции $NO \rightarrow NO_2$ зимой, качественно объясняет накопление первичного NO. Очевидно, что накопление NO_2 зимой и его «отсутствие» летом, контрастирующее с накоплением HCHO летом и его «отсутствие» летом связано с какой-то реакцией, ингибируемой в зимних СЭЗ и катализируемой летом.

4. Перспективы исследований

Уровень загрязнения атмосферного воздуха г. Челябинска формируется под влиянием высоких и средних источников выбросов крупных промышленных предприятий длительного производственного цикла и приземных выбросов автотранспорта. Регулирование обоих источников выбросов осуществляется с использованием результатов традиционного краткосрочного прогноза НМУ, который основан на анализе систем погоды синоптического масштаба и интерполяционных технологий.

Объективный метод выделения СЭЗ и краткая характеристика этих событий позволяет по-новому взглянуть на проблему прогноза, регулирования СЭЗ и экологического проектирования. Корреляция летних и зимних СЭЗ с инверсионным типом погоды почти однозначно свидетельствует, что СЭЗ формируются вблизи центров малоподвижных высоких антициклонов. Очевидно, что в этих условиях, в накоплении примесей играет роль не столько локальная техногенной нагрузка, сколько локальные условия рассеяния примесей, сильно различающиеся в пределах мегаполиса, из-за возникновения характерных циркуляций «острова тепла», бризовых и долинных циркуляций – объектов мезомасштабного прогноза [6]. Очевидно также, что градостроительная политика и индивидуальное проектирование должны учитывать мезоциркуляции СЭЗ до и после строительства.

Несомненно, что наличие крупных инфраструктурных источников загрязнения затрудняет оперативную их реакцию на традиционный прогноз НМУ. В этом аспекте важно климатическое описание частоты и структуры СЭЗ и поиск методов долгосрочного прогноза таких случаев, в частности блокирующих атмосферных ситуаций.

Сосредоточение на СЭЗ, как на особых интенсивных и длительных случаях загрязнения дает новый импульс работам по интерпретации химического состава депонирующих сред [7, 9, 10] исследованиям касающихся ранжирования факторов риска здоровью населению [4–5] и многим другим аспектам охраны среды.

Библиографический список

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

2. Безуглая, Э.Ю. Возможность оценки высоких концентраций формальдегида при изменении температуры воздуха / Э.Ю. Безуглая. М.С. Загайнова, Т.П. Ивлева // Труды Главной геофизической обсерватории им. А.И. Воейкова. – 2012. – № 565. – С. 89–102.

3. Безуглая, Э.Ю. Химическая активность атмосферы на территории России / Э.Ю. Безуглая, И.А. Воробьева, Т.П. Ивлева // Труды Главной геофизической обсерватории им. А.И. Воейкова. – 2009. – № 559. – С. 121–133.

4. Захарова, И.А. Анализ влияния антропогенных факторов риска на респираторное здоровье населения молодого возраста г. Челябинска / И.А. Захарова // Врач-аспирант. – 2014. – С. 161–165.

5. Игнатова, Г.Л. Выявление хронических неспецифических заболеваний легких при амбулаторном обследовании лиц молодого возраста в условиях крупного промышленного города / Г.Л. Игнатова, И.А. Захарова // Лечебное дело. – 2014. – № 2. – С. 8–12.

6. 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.

7. Нестеров, Е.М. Об информативности показателей общей минерализации и кислотно-щелочных свойств при определении степени загрязненности снегового покрова урбанизированных территорий / Е.М. Нестеров, И.В. Грачева, Л.М. Зарина // Экология урбанизированных территорий. – 2012. – № 3. – С. 81–88.

8. Сапельцева, Ю.А. Жизненный цикл природно-антропогенных систем: оценка уровня экологической опасности / Ю.А. Сапельцева, С.М. Абдуллаев // Вестник Воронежского государственного университета. Серия География. Геоэкология. – 2014. – № 1. – С. 78–83.

9. 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.

10. Янченко, Н.И. Особенности изменения величины pH и электропроводности снежного покрова в Братске / Н.И. Янченко // Известия Томского политехнического университета. Химия и химические технологии. – 2014. – Т. 325. – № 3. – С. 23–30.

К содержанию

УДК 519.21 + 621.315.2:519.21

ПОСТРОЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТНОЙ МОДЕЛИ ПРОГНОЗА ПОВРЕЖДАЕМОСТИ КЛ 6(10) КВ

М.Е. Коржова, А.В. Коржов

В статье рассматривается метод построения вероятностной модели прогноза повреждаемости кабельных линий 6(10) кВ, основанный на аппарате теории нечётких множеств.

Ключевые слова: функция принадлежности нечётких множеств; нечёткие бинарные отношения на множестве; декартово произведение.

Для оценки прогнозирования повреждаемости КЛ могут быть использованы детерминированные (на основе принципа соответствия их нормативным и базовым показателям) и вероятностные (при наличии множества случайных параметров) математические методы, однако, они мало подходят для отображения процессов, в которых существенную роль играет человеческий фактор.

В связи с этим гораздо лучше, чем вероятностный аппарат, для решения задачи прогнозирования, подходит теория нечётких множеств, в которой оценки принадлежности элементов нечёткому множеству могут быть результатом обработки заключений экспертов и модели, которые способны учитывать характер «расплывания» смыслов выражений естественного языка.

Рассмотрим возможность применения теории нечётких множеств для прогноза повреждаемости КЛ 6(10) кВ. Для этого в таблице 1 представлены 4 ряда удельной повреждаемости КЛ: первый ряд – возрастающий (с приращением 0,005); второй – колебательный; третий ряд – постоянный; четвертый – случайный, не обладающий закономерностью.

Таблица 1

Удельная повреждаемость КЛ

Месяц	Годы						
	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014
1	0,01	0,015	0,02	0,025	0,03	0,035	0,04
2	0,01	0,008	0,01	0,008	0,01	0,008	0,01
3	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
4	0,01	0,02	0,05	0,025	0,01	0,012	0,004

Располагая данными на период с 2008 по 2014 гг. по месяцам о проведении ремонтных работ на кабелях и муфтах, положим: 4 и 3 года – периоды удельной повреждаемости кабелей в предшествующий и последующий моменты времени и определим связь между ними с помощью нечёткого отношения.

Определим среднеарифметические показатели удельного количества проведённых ремонтных работ за рассматриваемые периоды по месяцам года, а также определим функцию принадлежности этого количества нечётких подмножеств A и B, данные представлены в таблице 2.

Таблица 2

Показатели удельного количества проведённых ремонтных работ

Месяц	Максимальный показатель	Среднеарифметическое за		μ_A	μ_B
		4 года	3 года		
1	0,175	0,018	0,035	0,103	0,200
2	0,064	0,009	0,009	0,141	0,141
3	0,070	0,010	0,010	0,143	0,143
4	0,121	0,024	0,009	0,198	0,074

Определим нечёткие подмножества A и B:

$$A=\{u_1/0{,}103; u_2/0{,}141;\ u_3/0{,}143;\ u_4/0{,}198\};$$

$$B=\{u_1/0{,}200; u_2/0{,}141;\ u_3/0{,}143;\ u_4/0{,}074\}.$$

Определим и соответствующие подмножества $\overline{A}$ и $\overline{B}$ по формуле:

$$\int u_i/(1-\mu_i).$$

Тогда:

$$\overline{A}=\{u_1/0{,}897; u_2/0{,}859;\ u_3/0{,}857;\ u_4/0{,}802\};$$

$$\overline{B}=\{u_1/0{,}800; u_2/0{,}859;\ u_3/0{,}857;\ u_4/0{,}926\}.$$

Найдя декартовы произведения $A\times B$ и $\overline{A}\times\overline{B}$, можно определить нечёткое бинарное отношение R, определяющее взаимосвязь между предшествующим и последующим состояниями по правилу:

$$R=A\times B+\overline{A}\times\overline{B}.$$

Найдём $A\times B$ и $\overline{A}\times\overline{B}$, используя формулу:

$$A\times B=\min\left(\mu_{i(A)}(u_i),\mu_{k(B)}(u_k)\right),$$

где u_i- элемент множества $A(u_i\in A)$; u_k- элемент множества $B(u_k\in B)$; $i,k=\overline{1,m}$.

По аналогичной формуле определяется и декартово произведение $\overline{A}\times\overline{B}$.

$$A\times B=\begin{pmatrix}0{,}103 & 0{,}141 & 0{,}143 & 0{,}198\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}0{,}200\\0{,}141\\0{,}143\\0{,}074\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0{,}103 & 0{,}103 & 0{,}103 & 0{,}074\\0{,}141 & 0{,}141 & 0{,}141 & 0{,}074\\0{,}143 & 0{,}141 & 0{,}143 & 0{,}074\\0{,}198 & 0{,}141 & 0{,}143 & 0{,}074\end{pmatrix}.$$

$$\overline{A}\times\overline{B}=\begin{pmatrix}0{,}897 & 0{,}859 & 0{,}857 & 0{,}802\end{pmatrix}\times\begin{pmatrix}0{,}800\\0{,}859\\0{,}857\\0{,}926\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0{,}800 & 0{,}859 & 0{,}857 & 0{,}897\\0{,}800 & 0{,}859 & 0{,}857 & 0{,}859\\0{,}800 & 0{,}857 & 0{,}857 & 0{,}857\\0{,}800 & 0{,}802 & 0{,}802 & 0{,}802\end{pmatrix}.$$

Определим отношение, характеризующее предыдущее и последующее состояния, используя свойство: если $A\times B=X$, $\overline{A}\times\overline{B}=Y$, то $X+Y$ определяется выражением:

$$\mu_{X+Y}(a,b)=\max\left(\mu_X(a,b),\mu_Y(a,b)\right).$$

Получаем, что бинарное отношение равно:

$$R=\begin{pmatrix}0{,}103 & 0{,}103 & 0{,}103 & 0{,}074\\0{,}141 & 0{,}141 & 0{,}141 & 0{,}074\\0{,}143 & 0{,}141 & 0{,}143 & 0{,}074\\0{,}198 & 0{,}141 & 0{,}143 & 0{,}074\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0{,}800 & 0{,}859 & 0{,}857 & 0{,}897\\0{,}800 & 0{,}859 & 0{,}857 & 0{,}859\\0{,}800 & 0{,}857 & 0{,}857 & 0{,}857\\0{,}800 & 0{,}802 & 0{,}802 & 0{,}802\end{pmatrix}=$$

$$=\begin{pmatrix}0{,}800 & 0{,}859 & 0{,}857 & 0{,}897\\0{,}800 & 0{,}859 & 0{,}857 & 0{,}859\\0{,}800 & 0{,}857 & 0{,}857 & 0{,}857\\0{,}800 & 0{,}802 & 0{,}802 & 0{,}802\end{pmatrix}.$$

Используя композиционное правило вывода, имеем:

$$B^*=A^*\circ R,$$

здесь A^* и B^* – нечёткие множества, характеризующие предыдущее и последующее состояния соответственно.

Композиция определяется выражением:

$$\mu_{A^*\circ R}\left(a,(a,b)\right)=\max\left(\min\left(\mu_{A^*}(a),\mu_R(a,b)\right)\right).$$

Таким образом, множество A^* характеризует состояние удельного числа пробоев изоляции кабельной сети в период, предшествующий прогнозируемому.

Так, в нашем случае, например, для прогноза удельной повреждаемости КЛ 6(10) кВ на 2014 год используем нечёткое подмножество:

$$A^* = \{u_1/0,200; u_2/0,125; u_3/0,143; u_4/0,099\}, \text{ где } \mu_i = \frac{u_i(2013)}{u_{\max}}.$$

$$B^* = (0,200 \quad 0,125 \quad 0,143 \quad 0,099) \times \begin{pmatrix} 0,800 & 0,859 & 0,857 & 0,897 \\ 0,800 & 0,859 & 0,857 & 0,859 \\ 0,800 & 0,857 & 0,857 & 0,857 \\ 0,800 & 0,802 & 0,802 & 0,802 \end{pmatrix} =$$

$$= (0,200 \quad 0,200 \quad 0,200 \quad 0,200).$$

Переходя от значений функции принадлежности к показателям удельной повреждаемости КЛ, получаем следующие результаты прогноза по апробации данной методики на 2014 год.

Удельная повреждаемость в первом месяце составила $0,175 \cdot 0,200 = 0,035$ (фактически 0,04); во втором – $0,064 \cdot 0,200 = 0,0128$ (фактически 0,01); в третьем – $0,070 \cdot 0,200 = 0,014$ (фактически 0,01); в четвёртом $0,121 \cdot 0,200 = 0,0242$ (фактически 0,004).

Сравнение полученных данных с фактическими показывает, что применение теории нечётких множеств в рассматриваемой предметной области удовлетворительно для рядов, обладающих закономерностью (1-3) и имеет наибольшую погрешность для случайного ряда (4). Таким образом получаем, что прогнозируемые значения пробоев изоляции позволяют оценивать истинную тенденцию пробоев.

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. Заде, Л. Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближенных решений / Л. Заде. – М.: «Мир», 1976. – 166 с.

К содержанию

УДК 519.6 + 544.77

ФУРЬЕ – ПРЕДСТАВЛЕНИЕ КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

М.Е. Коржова, Б.А. Марков

В настоящей работе предлагается новый подход к записи химических реакций в коллоиде, имеющих колебательный характер. Вводится новая характеристика превращений вещества – фаза, для которой строится уравнение типа «реакция-диффузия». Далее строится задача типа Флорина, решение которой единственно. Приводится простой пример решения для частного случая.

Ключевые слова: коллоиды, задача Флорина, задача с запаздыванием, химическая кинетика.

Обычно для решения вопроса о химических превращениях используется система уравнений «реакция-диффузия», представляющие собой параболические уравнения с линейными или нелинейными правыми частями. Такая запись предполагает, что химическая реакция проходит с той или иной вероятностью пропорционально концентрации химических веществ.

В случае коллоида сложно не только определить химические реакции, которые происходят, но остаётся открытым вопрос о химических веществах, составляющих коллоид. Вопрос можно поставить даже так: будет ли коллоид, смесь веществ, обнаруживать свойства того или иного вещества из своего состава или же в смеси будет проявляться нечто иное?

Поэтому для коллоида представляется разумным использовать другой подход, основанный на состоянии коллоида. Вещества в коллоиде выделить трудно, поэтому будем использовать понятие фазы превращения – текущего состояния мицелл коллоида и их взаимодействия с межмицеллярной жидкостью [4].

Пусть фаза коллоида может быть задана некоторой величиной Φ, которая зависит, вообще говоря, от времени и пространства (в настоящем сообщении ограничимся только пространственной зависимостью). Пусть реакция обратима, тогда концентрацию мицелл можно задать как Фурье-ряд от фазы превращения коллоида, $n = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \cos(j\Phi) + \sum_{j=1}^{\infty} b_j \sin(j\Phi)$, где a_j, b_j – некоторые числовые коэффициенты. Предположим, что правая часть уравнения «реакция-диффузия», определяющая ход взаимодействия концентрации n с межмицеллярной жидкостью, может быть задана как $m = \sum_{j=0}^{\infty} A_j \cos(j\Phi) + \sum_{j=1}^{\infty} B_j \sin(j\Phi)$, где A_j, B_j – числа.

Тогда мы получаем уравнение «реакция-диффузия» в виде:

$$\frac{\partial n}{\partial t} - D\Delta n = m,$$

где D – диффузия, Δ – обычный оператор Лапласа.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы поставить задачу и построить её решение в стационарном одномерном случае для частного модельного случая $m = \cos(2\Phi)$, $n = \cos(\Phi) + \sin(\Phi)$.

Постановка математической задачи. Заметим, что диаграмма правой и левой частей (рис. 1).

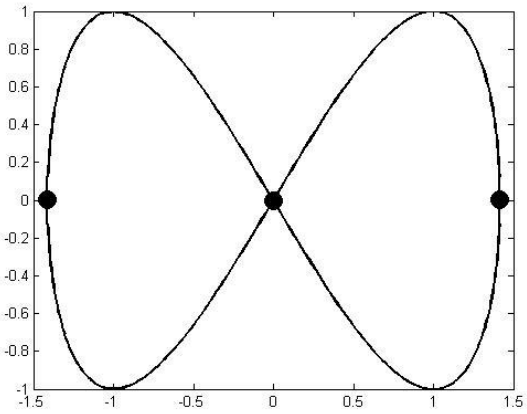


Рис. 1. Диаграмма $n = \cos(\Phi) + \sin(\Phi)$ по оси абсцисс и $m = \cos(2\Phi)$ по оси ординат. Чёрными точками выделены особые точки системы

Задача нелинейна, и её решение может быть и не единственным. Например, если $\Phi = \frac{\pi}{4}$ или $\Phi = \frac{3\pi}{4}$, то решение может быть просто постоянной. Такое решение, по-видимому, лишено физико-химического смысла, и его следует исключить из рассмотрения.

Чтобы этого достичь, применим подход, предложенный А.М. Ильиным [3] для уравнения с оператором Лизеганга [4] (уравнения с частной формой запаздывания). Выразим $m = \cos(2\Phi)$ через $n = \cos(\Phi) + \sin(\Phi)$. Получим $m = \pm n\sqrt{2 - n^2}$. Теперь наша задача состоит в том, чтобы организовать «переключение» между этими ветвями.

Пусть есть точка, где $\Phi = \frac{\pi}{4}$ и точка, где $\Phi = \frac{5}{4}\pi$. Решение уравнения в этих точках может быть и постоянным, и чтобы этого избежать, потребуем у нормальной производной в этой точке, чтобы она была бы отлична от нуля: $\left.\frac{\partial n}{\partial \nu}\right|_{x_0} = \lambda \neq 0$. В результате мы получим новую задачу с тремя краевыми условиями – в стационарном случае это будет задача на собственные значе-

ния для нелинейного уравнения. Конечно, такая задача не будет вполне соответствовать исходному уравнению, так как в точках, где поставлено условие $\left.\frac{\partial n}{\partial \nu}\right|_{x_0} = \lambda \neq 0$, производная может не существовать.

Пусть нам необходимо решить задачу $-D\Delta n = m$ в области S, скажем, на отрезке $x \in [0;1]$. Тогда пусть точка $x = x_1$ – та точка, где решение уравнения $-D\Delta n = m$ достигло значения $n = \sqrt{2}$. Тогда задача на этом отрезке имеет вид:

$$\begin{cases} n'' = n\sqrt{2-n^2} \\ n|_{x=1} = 0, n|_{x=x_i} = \sqrt{2} \\ \left.\frac{dn}{dx}\right|_{x=x_i} = \lambda, \ x \in [x_1;1] \end{cases} \quad (1)$$

Несложно видеть, что в (1) мы получаем стационарный аналог задачи Флорина [1, 2], для которого существует решение при определённом значении x_1.

Таким образом, вся область будет разбита на строго определённые участки, где нужно пользоваться той или иной формулой.

Скажем, задача (1) на следующем участке, где решение будет меняться от $\sqrt{2}$ до $-\sqrt{2}$, имеет вид:

$$\begin{cases} n'' = -n\sqrt{2-n^2} \\ n|_{x=x_2} = -\sqrt{2}, n|_{x=x_1} = \sqrt{2}, \\ \left.\frac{dn}{dx}\right|_{x=x_2} = \lambda, \ x \in [x_2;x_1] \end{cases} \quad (2)$$

и так далее. В результате мы получаем цепочку квазилинейных стационарных задач Флорина вида (2), для каждой из которых существует единственное решение.

Численное решение задачи (пример). Решение построенных задач можно построить методом, например, стрельбы. В результате на каждом из фрагментов можно построить решение, довольно слабо отличающееся от прямой линии.

Для построения решения необходимо разбить область на фрагменты, поставив на каждом соответствующие краевые условия.

Пусть необходимо решить задачу (1) на отрезке $x \in [-1;3]$.

Разобьём участок на 4 и на каждом поставим краевую задачу:

$$\begin{cases} n_1'' = -n_1\sqrt{2-n_1^2} \\ n_1|_{x=-1} = \sqrt{2},\ n_1|_{x=0} = -\sqrt{2}\ ; \\ \left.\dfrac{dn_1}{dx}\right|_{x=0} = -\sqrt{2},\ \ x \in [-1;0] \end{cases} \tag{3.1}$$

$$\begin{cases} n_2'' = -n_2\sqrt{2-n_2^2} \\ n_2|_{x=0} = -\sqrt{2},\ n_2|_{x=1} = +\sqrt{2}\ ; \\ \left.\dfrac{dn_2}{dx}\right|_{x=1} = +\sqrt{2},\ \ x \in [0;1] \end{cases} \tag{3.2}$$

$$\begin{cases} n_3'' = -n_3\sqrt{2-n_3^2} \\ n_3|_{x=1} = \sqrt{2},\ n_3|_{x=2} = -\sqrt{2}\ ; \\ \left.\dfrac{dn_3}{dx}\right|_{x=2} = -\sqrt{2},\ \ x \in [1;2] \end{cases} \tag{3.3}$$

$$\begin{cases} n_4'' = -n_4\sqrt{2-n_4^2} \\ n_4|_{x=2} = -\sqrt{2},\ n_4|_{x=3} = +\sqrt{2}\ . \\ \left.\dfrac{dn_4}{dx}\right|_{x=3} = +\sqrt{2},\ \ x \in [2;3] \end{cases} \tag{3.4}$$

А решением всей задачи будем считать функцию u, построенную следующим образом:

$$u = \begin{cases} u_1,\ \ x \in [-1;0] \\ u_2,\ \ x \in [0;1] \\ u_3,\ \ x \in [1;2] \\ u_4,\ \ x \in [2;3] \end{cases}.$$

Результат численного решения приведён на рисунке 2.

Задача (3.1–3.4) решалась методом итераций, отклонение составило 10^{-8}.

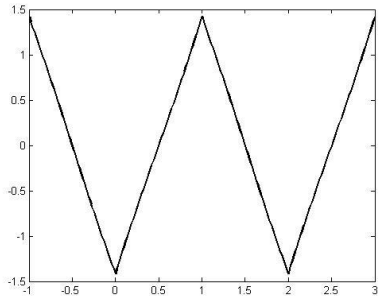


Рис. 2. Результат численного решения задачи (3.1–3.4), полученный методом разбиения на отрезки

Из рисунка видно, что решение действительно имеет разрывы производных в точках, где происходит смена знака правой части. Более гладкое решение невозможно.

Выводы. Рассмотрена постановка задачи, не имеющей классического единственного решения, позволяющая находить неклассическое решение с разрывами производной искомой функции.

Библиографический список

1. Флорин, В.А. Одномерная задача уплотнения с учетом старения, нелинейной ползучести и разрушения структуры грунта / В.А. Флорин // Известия АН СССР, О.Т.Н. – 1953. – № 9.

2. Бижанова, Г.И. О классической разрешимости одномерных задач со свободной границей Флорина, Маскета–Веригина и Стефана / Г.И. Бижанов // Зап. научн. сем. ПОМИ, 243. – 1997. – 30–60.

3. Ильин, А.М. Нелинейное уравнение диффузии и кольца Лизеганга / А.М. Ильин, Б.А. Марков // Доклады Академии наук. – 2011. – Т. 440, N 2, сентябрь. – С. 164–167.

4. Сухарев, Ю.И. Нелинейность гелевых оксигидратных систем / Ю.И. Сухарев, Б.А. Марков. – Изд-во УрО РАН, 2005.

К содержанию

УДК 517.95 + 517.98

О ВЫБОРЕ ПАРАМЕТРА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ НЕЛИНЕЙНЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ

Е.В. Табаринцева

Рассматривается задача с обратным временем для нелинейного дифференциального уравнения. Устойчивы приближенные решения строятся с помощью подхода, обобщающего схему А.Б. Бакушинского. Параметр регуляризации выбирается с помощью подхода, основанного на схеме М.М. Лаврентьева, который не требует использования априорной информации о точном решении. Показано, что рассмотренная схема выбора параметра регуляризации обеспечивает оптимальный порядок точности приближенного решения.

Ключевые слова: нелинейное дифференциальное уравнение, обратная задача, метод приближенного решения, параметр регуляризации.

Введение. Рассматривается задача с обратным временем для полулинейного дифференциально-операторного уравнения. Основными вопросами при исследовании данной некорректно поставленной задачи являются вопросы построения устойчивого приближенного решения и оценки точности

полученного приближенного решения. Многие классы линейных некорректно поставленных подробно исследованы теоретически, для их решения разработан аппарат, позволяющий строить устойчивые приближенные решения и оценивать их точность. Однако, аппарат для исследования и численного решения нелинейных обратных задач разработан недостаточно. В [1] был предложен общий способ построения регуляризующих алгоритмов для линейных операторных уравнений. В работе [6] предложен способ построения приближенных решений одного класса нелинейных обратных задач, обобщающий схему, исследованную в [1]. В работе [7] получены двусторонние оценки модуля непрерывности нелинейной обратной задачи, что позволяет исследовать методы приближенного решения на оптимальность. Большую роль при численном решении неустойчивых задач играет выбор параметра регуляризации. В частности, в [6] для выбора параметра регуляризации применяется схема М.М. Лаврентьева, которая обеспечивает оптимальный порядок точности полученного приближенного решения, но использует априорную информацию о точном решении (например, о гладкости точного решения), которая на практике не всегда доступна. Другие известные способы выбора параметра регуляризации (принцип невязки, метод минимальных ошибок и др.) не всегда обеспечивают оптимальную точность или требуют численного решения достаточно сложных вспомогательных задач. В настоящей работе предложен способ выбора параметра регуляризации, основанный на схеме М.М. Лаврентьева и общем подходе, развитом в [10] для решения нелинейных операторных уравнений. Рассмотренный подход обеспечивает оптимальный порядок точности приближенных решений и не требует использования априорной информации о точном решении.

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

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

$$\frac{du}{dt} = -Au + f(t,u(t));\ t \in (t_0;T), \qquad (1)$$

$$u(t_0) = \varphi,\ \ \varphi \in H,\ \ 0 < t_0 < T,$$

удовлетворяет условию $u(T) = \chi$.

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

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

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

Рассмотрим множество $M \subset H$, которое является классом корректности нелинейной обратной задачи.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

,

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

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

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

В качестве приближенного решения нелинейной обратной задачи будем рассматривать элемент:

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

,

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

Оценка погрешности приближенного решения. Будем предполагать, что заданное множество $M \subset H$ является классом корректности как для нелинейной задачи (1), так и для соответствующей линейной задачи (2). Рассмотрим следующие величины:

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

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

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

погрешность метода приближенного решения линейной задачи (2), определенного формулой (3), на множестве M.

Воспользуемся неравенством:

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

где

$$\Delta_2(\alpha,\delta) = \sup_{\|\chi-\chi_\delta\| \le \delta} \| \varphi_\delta^\alpha - \varphi^\alpha \|;$$

$$\Delta_1(\alpha) = \sup_{\phi \in M_i} \| \varphi^\alpha - \varphi \| .$$

Аналогично:

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

где

$$\tilde{\Delta}_2(\alpha,\delta) = \sup_{\|\tilde{\chi}-\tilde{\chi}_\delta\| \le \delta} \| R_\alpha^{T-t_0}(\tilde{\chi}_\delta - \tilde{\chi}) \| \le \frac{\delta}{\lambda(\alpha)};$$

$$\tilde{\Delta}_1(\alpha) = \sup_{\varphi \in M} \| R_\alpha^{T-t_0} \tilde{\chi} - \varphi \| = g(\alpha).$$

Здесь $l(a)$, $g(a)$ – возрастающие функции на $[0; a_0]$, $l(0) = 0$; $0 = g(0)$ J $g(a)$ J 1.

Выполняются неравенства:

$$\frac{1}{4} e^{-LTe^{LT}} \tilde{\Delta}_1(\alpha) \le \Delta_1(\alpha) \le 4e^{LT} \tilde{\Delta}_1(\alpha);$$

$$\frac{1}{4} e^{-LTe^{LT}} \tilde{\Delta}_1(\alpha,\delta) \le \Delta_2(\alpha,\delta) \le 4e^{LT} \tilde{\Delta}_1(\alpha,\delta).$$

Теорема. ([6]) Существует постоянная $\delta_0 > 0$, такая, что для всех $0 < \delta < \delta_0$ выполняются неравенства:

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

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

Пример 1 (метод проекционной регуляризации). Обозначим через $\{E_\lambda : \lambda \geq 0\}$ разложение единицы, порожденное оператором A.

Пусть A_α – линейный ограниченный оператор в H, определяемый формулой:

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

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

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

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

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

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

$$\frac{du}{dt} = -Au + f(t, u(t));\ t \in (t_0; T),$$

$$u(T) + \alpha u(t_0) = \chi_\delta \ ,\ 0 < t_0 < T,$$

Другой пример (метод квазиобращения, см. [4]), в нелинейном случае исследован в [5].

Выбор параметра регуляризации

Для выбора параметра регуляризации на практике может быть использована следующая схема, не использующая явно априорную информацию о точном решении поставленной обратной задачи (см. е [10]).

Пусть параметр регуляризации выбирается из конечного множества:

$$\Lambda_N = \{\alpha_i : 0 < \alpha_0 < \alpha_1 < ... < \alpha_N\}.$$

Обозначим через $\varphi_{\alpha_i}^{\delta} = R_{\alpha_i}\chi_{\delta}$ соответствующие приближенные решения. Пусть φ_0 – точное решение задачи (1), $\varphi_0 \in M$. Обозначим через α_{opt} квазиоптимальное значение параметра регуляризации, полученное по схеме М.М. Лаврентьева, примененной к линейной задаче (2), т.е. параметр регуляризации выбирается из условия $\tilde{D}_1(a(d)) = \tilde{D}_2(a(d), d)$. Как известно, такой выбор параметра регуляризации обеспечивает оптимальный порядок погрешности приближенного решения и выполняется неравенство:

$$\tilde{\Delta}(\alpha_{opt}(\delta), \delta) \le 2g((g\lambda)^{-1}(\delta)).$$

Из теоремы следует, что при таком выборе параметра регуляризации порядок погрешности метода решения нелинейной задачи (2) также будет оптимальным, причем:

$$\Delta(\alpha_{opt}(\delta), \delta) \le 8e^{LT} g((g\lambda)^{-1}(\delta)).$$

Обозначим через $\alpha*$ оптимальное значение параметра регуляризации, выбираемое из множества Λ_N, т.е.:

$$\alpha^* = \max\{\alpha_i : \alpha_i \in M(\Lambda_N)\},$$

где

$$M(\Lambda_N) = \left\{\alpha_i \in \Lambda_N : g(\alpha_i) \le \frac{\delta}{\lambda(\alpha_i)}\right\}.$$

Наряду с $M(\Lambda_N)$, рассмотрим множество:

$$M^+(\Lambda_N) = \left\{\alpha_i \in \Lambda_N : \left\|\varphi_{\alpha_i}^{\delta} - \varphi_{\alpha_j}^{\delta}\right\| \le \frac{16e^{LT}\delta}{\lambda(\alpha_j)} \ (j = 0,1,...,i)\right\}.$$

Лемма 2. $M(\Lambda_N) \subseteq M^+(\Lambda_N)$

Доказательство. Рассмотрим значения параметра регуляризации $\alpha_i, \alpha_j \in \Lambda_N$; $\alpha_i \in M(\Lambda_N)$, $j < i$. Имеем неравенство:

$$\left\|\varphi_{\alpha_i}^{\delta} - \varphi_{\alpha_j}^{\delta}\right\| \le \left\|\varphi_{\alpha_i}^{\delta} - \varphi_{\alpha_i}\right\| + \left\|\varphi_{\alpha_i} - \varphi_0\right\| + \left\|\varphi_{\alpha_j} - \varphi_0\right\| + \left\|\varphi_{\alpha_j} - \varphi_{\alpha_j}^{\delta}\right\| \le$$

$$\le 8e^{LT}\varphi(\alpha_i) + \frac{4e^{LT}\delta}{\lambda(\alpha_i)} + \frac{4e^{LT}\delta}{\lambda(\alpha_j)} \le \frac{16e^{LT}\delta}{\lambda(\alpha_j)}.$$

Следовательно, $\alpha_i \in M^+(\Lambda_N)$.

Обоснование одного из правил апостериорного выбора параметра регуляризации дает следующая теорема.

Теорема. Пусть $M(\Lambda_N) \neq \varnothing$; $\Delta_N \setminus M(\Lambda_N) \neq \varnothing$ и для любого a_i OD_N выполняется неравенство:

$$l(a_i) \mathrm{J}\ ql(a_{i-1}) \quad (i = 1,\ldots,N).$$

Пусть параметр регуляризации выбран из условия:

$$\alpha^+ = \max\left\{\alpha_i : \alpha_i \in M^+(\Lambda_N)\right\}.$$

Тогда:

$$\Delta(\alpha^+(\delta),\delta) = \sup\left\{\left\|\varphi_\delta^{\alpha^+} - \varphi_0\right\| : \varphi_0 \in M; \|\varphi - \varphi_\delta\| \le \delta\right\} \le 24e^{2LT} qg((g\lambda)^{-1}(\delta)).$$

Доказательство. Из определения $\alpha^* = \alpha_l$ следует, что для α_{l+1} выполняется неравенство:

$$g(\alpha_{l+1})\lambda(\alpha_{l+1}) > \delta = g(\alpha_{opt})\lambda(\alpha_{opt}).$$

Следовательно, в силу монотонности функций $g(\alpha)$ и $\lambda(\alpha)$, $\alpha_{l+1} \ge \alpha_{opt}$ и, следовательно:

$$\lambda(\alpha_{opt}) < \lambda(\alpha_{l+1}) \le q\lambda(\alpha_l) = q\lambda(\alpha_*).$$

Таким образом:

$$\frac{\delta}{\lambda(\alpha_*)} \le q\frac{\delta}{\lambda(\alpha_{opt})}.$$

В силу леммы 2, так как $M(\Lambda_N) \subseteq M^+(\Lambda_N)$:

$$\alpha^* = \alpha_l = \max\left\{\alpha_i : \alpha_i \in M(\Lambda_N)\right\} \le \alpha^+ = \max\left\{\alpha_i : \alpha_i \in M^+(\Lambda_N)\right\}.$$

Из определения $M^+(\Lambda_N)$ и неравенства:

$$\left\|\varphi_\delta^{\alpha^+} - \varphi_0\right\| \le \left\|\varphi_\delta^{\alpha^+} - \varphi^{\alpha^+}\right\| + \left\|\varphi^{\alpha^*} - \varphi^{\alpha^+}\right\| + \left\|\varphi_\delta^{\alpha^*} - \varphi_0\right\|,$$

Следует:

$$\Delta(\alpha^+(\delta),\delta) = \sup\left\{\left\|\varphi_\delta^{\alpha^+} - \varphi_0\right\| : \varphi_0 \in M; \|\varphi_0 - \varphi_\delta\| \le \delta\right\} \le$$

$$\le 8e^{LT} g(\alpha_l) + \frac{8e^{LT}\delta}{\lambda(\alpha_l)} + \frac{8e^{LT}\delta}{\lambda(\alpha_l)} \le \frac{24e^{LT}\delta}{\lambda(\alpha_*)} \le q\frac{24e^{LT}\delta}{\lambda(\alpha_{opt})} = 24e^{LT} qg((g\lambda)^{-1}(\delta)).$$

Теорема доказана.

Применение рассмотренного подхода к решению линейной задачи для эллиптического уравнения исследовано в [11].

Библиографический список

1. Бакушинский, А.Б. Один общий прием построения регуляризующих алгоритмов для линейного некорректного уравнения в гильбертовом пространстве / А.Б. Бакушинский // ЖВМиМФ. – 1967. – Т. 7. – № 3. – С. 672–677.

2. Иванов, В.К. Дифференциально-операторные уравнения и некорректные задачи / В.К. Иванов, И.В. Мельникова, А.И. Филинков. – М.: Наука, 1995.

3. Лаврентьев, М.М. О некоторых некорректных задачах математической физики / М.М.Лаврентьев. – Новосибирск: Наука, 1962.

4. Латес, Р. Метод квазиобращения и его приложения / Р. Латес, Ж.-Л. Лионс. – М.: Мир, 1970.

5. Табаринцева, Е.В. Об оценке погрешности метода квазиобращения при решении задачи Коши для полулинейного дифференциального уравнения / Е.В. Табаринцева // Сибирский журнал вычисл. математики. – 2005. – Т. 8, № 3. – С. 259–271.

6. Табаринцева, Е.В. О решении некорректно поставленной задачи для нелинейного дифференциального уравнения / Е.В. Табаринцева // Труды Института математики УрО РАН. – 2015. – Т. 21, № 1. – С. 231–237.

7. Табаринцева, Е.В. Об оценке модуля непрерывности одной нелинейной обратной задачи / Е.В. Табаринцева // Труды Института математики УрО РАН. – 2013. – Т. 19, № 1. – С. 253–257.

8. Танана, В.П. Об одном подходе к приближению разрывного решения некорректно поставленной задачи / В.П. Танана, Е.В. Табаринцева // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2005. – Т. 8, № 1(21). – С. 129–142.

9. 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.

10. Pereverzev, S. On the adaptive selection of the parameter in regularization of ill-posed problems / S. Pereverzev, E. Schock // SIAM J.Numer.Anal. 2005. V. 43. № 5. Pp. 2060–2076.

11. Hui Cao. A Carleman estimate and the balancing principle in the quasi-reversibility method for solving the Cauchy problem for the Laplace equation / Hui Cao, M.V. Klibanov, S.V. Pereverzev // Inverse problems. 2009. V. 25. Pp. 21–34.

К содержанию

ФАКУЛЬТЕТ МАТЕМАТИКИ, МЕХАНИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК

УДК 519.63 + 517.956.2:539.4

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ ПЛАСТИН НА УПРУГИХ ОСНОВАНИЯХ

А.Л. Ушаков

Рассматриваются эллиптические уравнения четвёртого порядка в плоских областях, лежащие в основе математических моделей деформаций пластин на упругих основаниях. При их приближенных решениях используются модифицированные методы фиктивных компонент. После дискретизации исходных задач по методу конечных элементов на параболических восполнениях, получаются численные модификации методов фиктивных компонент эффективные по количеству арифметических операций.

Ключевые слова: моделирование деформаций пластин, эллиптические уравнения, методы фиктивных компонент.

Введение

Предлагаются модификации методов фиктивных компонент для приближённых решений эллиптических уравнений четвёртого порядка. Рассматриваются эллиптические дифференциальные уравнения четвёртого порядка при общих предположениях обеспечивающих каждому уравнению существование и единственность его решения. Решения этих уравнений с помощью метода конечных элементов и модификаций методов фиктивных компонент сводится к решениям вариационно-разностных аналогов эллиптических уравнений четвёртого порядка в прямоугольной области при смешанных краевых условиях.

Вариационные модели деформаций пластин

Рассматриваются неоднородные бигармонические уравнения со свободными членами при смешанных и однородных краевых условиях в вариационных постановках, т.е. рассматриваются вариационные задачи, обобщённые математические модели деформаций пластин на упругих основаниях при смешанных краевых условиях:

$$\breve{u}_\alpha \in \breve{H}_\alpha : \Lambda_\alpha(\breve{u}_\alpha, \breve{v}_\alpha) = \breve{g}_\alpha(\breve{v}_\alpha)\ \forall \breve{v}_\alpha \in \breve{H}_\alpha, \quad \breve{g}_\alpha \in \breve{H}'_\alpha,\ \alpha = 1,2. \tag{1}$$

где соболевские пространства функций:

$$\breve{H}_\alpha = \breve{H}_\alpha(\Omega_\alpha) = \left\{ \breve{v}_\alpha \in W_2^2(\Omega_\alpha) : \breve{v}_\alpha\big|_{\Gamma_{\alpha,0}\cup\Gamma_{\alpha,1}} = 0,\ \frac{\partial \breve{v}_\alpha}{\partial \vec{n}_\alpha}\Big|_{\Gamma_{\alpha,0}\cup\Gamma_{\alpha,2}} = 0 \right\},$$

на ограниченных плоских областях Ω_α с границами:

$$s_\alpha = \partial\Omega_\alpha = \bar{\Gamma}_{\alpha,0} \cup \bar{\Gamma}_{\alpha,1} \cup \bar{\Gamma}_{\alpha,2} \cup \bar{\Gamma}_{\alpha,3},$$

$\Gamma_{\alpha,i} \cap \Gamma_{\alpha,j} = \varnothing$, если $i \neq j$, $i, j = 0,1,2,3$, $\vec{n}_\alpha$ – внешние нормали к $\partial\Omega_\alpha$, билинейные формы с константами $\breve{a}_\alpha \in [0;+\infty)$, $\sigma_\alpha \in (0;1)$:

$$\Lambda_\alpha(\breve{u}_\alpha, \breve{v}_\alpha) = \int_{\Omega_\alpha} (\sigma_\alpha \Delta\breve{u}_\alpha \Delta\breve{v}_\alpha + (1-\sigma_\alpha)(\breve{u}_{\alpha xx}\breve{v}_{\alpha xx} + 2\breve{u}_{\alpha xy}\breve{v}_{\alpha xy} + \breve{u}_{\alpha yy}\breve{v}_{\alpha yy}) + a_\alpha \breve{u}_\alpha \breve{v}_\alpha) d\Omega_\alpha.$$

Для задач из (1) достаточно обычны предположения, обеспечивающие каждой задаче существование и единственность её решения, т.е.:

$$\exists c_1, c_2 \in (0;+\infty):\ c_1 \|\breve{v}_\alpha\|^2_{W_2^2(\Omega_\alpha)} \le \Lambda_\alpha(\breve{v}_\alpha, \breve{v}_\alpha) \le c_2 \|\breve{v}_\alpha\|^2_{W_2^2(\Omega_\alpha)}\ \ \forall \breve{v}_\alpha \in \breve{H}_\alpha,\ \alpha = 1,2,$$

с.м. [1, 2]. Если $\breve{u}_\alpha$ – деформации пластин, искомые функции достаточно гладкие, а $\breve{f}_\alpha$ – давления, заданные функции такие, что:

$\breve{g}_\alpha(\breve{v}_\alpha) = (\breve{f}_\alpha, \breve{v}_\alpha)$, где $(\breve{f}_\alpha, \breve{v}_\alpha) = \int_{\Omega_\alpha} \breve{f}_\alpha \breve{v}_\alpha d\Omega_\alpha$, то из задач в (1) получаются неоднородные бигармонические уравнения со свободными членами при смешанных и однородных краевых условиях:

$$\Delta^2 \breve{u}_\alpha + a_\alpha \breve{u}_\alpha = \breve{f}_\alpha,\ \alpha = 1,2, \qquad (2)$$

$$\breve{u}_\alpha\big|_{\Gamma_{\alpha,0}} = \frac{\partial \breve{u}_\alpha}{\partial \vec{n}_\alpha}\Big|_{\Gamma_{\alpha,0}} = 0,\ \ \breve{u}_\alpha\big|_{\Gamma_{\alpha,1}} = l_{\alpha,1}\breve{u}_\alpha\big|_{\Gamma_{\alpha,1}} = 0,$$

$$\frac{\partial \breve{u}_\alpha}{\partial \vec{n}_\alpha}\Big|_{\Gamma_{\alpha,2}} = l_{\alpha,2}\breve{u}_\alpha\big|_{\Gamma_{\alpha,2}} = 0,\ \ l_{\alpha,1}\breve{u}_\alpha\big|_{\Gamma_{\alpha,3}} = l_{\alpha,2}\breve{u}_\alpha\big|_{\Gamma_{\alpha,3}} = 0,$$

где:

$$l_{\alpha,1}\breve{u}_\alpha = \Delta\breve{u}_\alpha + (1-\sigma_\alpha) n_{\alpha,1} n_{\alpha,2} \breve{u}_{\alpha xy} - n^2_{\alpha,2}\breve{u}_{\alpha xx} - n^2_{\alpha,1}\breve{u}_{\alpha yy},$$

$$l_{\alpha,2}\breve{u} = \frac{\partial \Delta\breve{u}_\alpha}{\partial \vec{n}_\alpha} + (1-\sigma_\alpha)\frac{\partial}{\partial s_\alpha}(n_{\alpha,1} n_{\alpha,2}(\breve{u}_{\alpha yy} - \breve{u}_{\alpha xx}) + (n^2_{\alpha,1} - n^2_{\alpha,2})\breve{u}_{\alpha xy}),$$

$$n_{\alpha,1} = -\cos(n_\alpha, x),\ \ n_{\alpha,2} = -\cos(n_\alpha, y).$$

У пластин на $\Gamma_{\alpha,0}$ жесткая заделка, на $\Gamma_{\alpha,1}$ шарнирное опирание, на $\Gamma_{\alpha,2}$ условия симметрии, на $\Gamma_{\alpha,3}$ свободное опирание.

Фиктивные продолжения вариационных моделей

Предлагаются фиктивные продолжения непрерывных задач и их решений, т.е. предлагаются продолжения вариационных задач и их решений из (1), фиктивно продолженные обобщённые математические модели деформаций пластин на упругом основании при смешанных краевых условиях, следующего вида:

$$\breve{u} \in \breve{V} : \Lambda_1(\breve{u}, I_1\breve{v}) + \Lambda_2(\breve{u}, \breve{v}) = \breve{g}_1(I_1\breve{v}) + \breve{g}_2(\breve{v}) \ \forall \breve{v} \in \breve{V}, \quad \breve{g}_{3-\alpha}(\breve{v}) = 0 \ \forall \breve{v} \in \breve{V}_{3-\alpha}, \ \alpha = 1,2, \tag{3}$$

где соболевское пространство функций на области Ω:

$$\breve{V} = \breve{V}(\Omega) = \left\{ \breve{v} \in W_2^2(\Omega) : \breve{v}\big|_{\Gamma_0 \cup \Gamma_1} = 0, \ \frac{\partial \breve{v}}{\partial \vec{n}}\Big|_{\Gamma_0 \cup \Gamma_2} = 0 \right\},$$

$\Omega, \Omega_{3-\alpha}$ – ограниченные плоские области, такие, что $\Omega_1, \Omega_2 \subset \Omega$, $\bar{\Omega} = \bar{\Omega}_1 \bigcup \bar{\Omega}_2$, $\Omega_1 \bigcap \Omega_2 = \varnothing$, $\bar{\Gamma}_{1,0} \bigcap \bar{\Gamma}_{2,3} = \partial\Omega_1 \bigcap \partial\Omega_2 = \bar{S} \neq \varnothing$, $s = \partial\Omega = \bar{\Gamma}_0 \bigcup \bar{\Gamma}_1 \bigcup \bar{\Gamma}_2 \bigcup \bar{\Gamma}_3$, $\Gamma_i \bigcap \Gamma_j = \varnothing$, если $i \neq j$, $i, j = 0,1,2,3$, $\vec{n}$ – внешняя нормаль к $\partial\Omega$. Подпространства:

$$\breve{V}_{i^2} = \left\{ \breve{v}_{i^2} \in \breve{V} : \breve{v}_{i^2} = 0 \ на \ \Omega \setminus \Omega_i \right\} \ i = 1,2.$$

Полагается, что:

$$\Lambda(\breve{u}, \breve{v}) = \Lambda_1(\breve{u}, \breve{v}) + \Lambda_2(\breve{u}, \breve{v}) \ \forall \breve{u}, \breve{v} \in \breve{V},$$

считается, что:

$$\Lambda_i(\breve{u}, \breve{v}) = \Lambda_i(\breve{u}\big|_{\Omega_i}, \breve{v}\big|_{\Omega_i}), \ \breve{g}_i(\breve{v}) = \breve{g}_i(\breve{v}\big|_{\Omega_i}) \ \forall \breve{u}, \breve{v} \in \breve{V} \ i = 1,2.$$

Предполагается, что:

$$\exists c_1, c_2 \in (0; +\infty) : \ c_1 \|\breve{v}\|^2_{W_2^2(\Omega)} \le \Lambda(\breve{v}, \breve{v}) \le c_2 \|\breve{v}\|^2_{W_2^2(\Omega)} \ \forall \breve{v} \in \breve{V}.$$

Пусть $\breve{V}_0 = \breve{V}_1 \oplus \breve{V}_4$ прямая сумма подпространств $\breve{V}_{i^2} \ i = 1,2$ в скалярном произведении $\Lambda(\cdot,\cdot)$, подпространство:

$$\breve{V}_3 = \left\{ \breve{v}_3 \in \breve{V} : \Lambda(\breve{v}_3, \breve{v}_0) = 0 \ \forall \breve{v}_0 \in \breve{V}_0 \right\},$$

т.е. $\breve{V} = \breve{V}_0 \oplus \breve{V}_3$ в скалярном произведении $\Lambda(\cdot,\cdot)$, а $\breve{v}_0 \in \breve{V}$, $\breve{v}_3 \in \breve{V}$ обозначают проекции $\breve{v}$ на соответствующие подпространства. Вводятся следующие подпространства: $\breve{V}_{8-3i} = \breve{V}_3 \oplus \breve{V}_{i^2}$, $i = 1,2,$ тогда имеет место $\breve{V} = \breve{V}_1 \oplus \breve{V}_2$. Считается, что $\breve{H}_i = \breve{H}_i(\Omega_i) = \breve{V}_i(\Omega_i)$, $\breve{V}(\Omega_i) = \breve{V}\big|_{\Omega_i} \ i = 1,2. \ H_2 = V(\Omega_2).$

Вводятся $I_{i^2}\ i=1,2$ – ограниченные операторы, отображающие пространство $\breve{V}$ на подпространства $\breve{V}_{i^2}$, т.е. $\breve{V}_{i^2}=im\,I_{i^2}$, при этом $I_{i^2}=I_{i^2}^2$, т.е. I_{i^2} проекторы, но не обязательно ортопроекторы. Задается, что $I_0=I_1+I_4$. Здесь I_0 – ограниченный оператор, отображающий пространство $\breve{V}$ на подпространство $\breve{V}_0$, т.е. $\breve{V}_0=im\,I_0$, при этом $I_0=I_0^2$, т.е. I_0 проектор, но не обязательно ортопроектор. Можно отметить, что:

$$\Lambda_1(\breve{u},I_0\breve{v})=\Lambda_1(\breve{u},I_1\breve{v}),\ \breve{g}_1(I_0\breve{v})=\breve{g}_1(I_1\breve{v})\ \ \forall\breve{u},\breve{v}\in\breve{V}.$$

Основываясь на возможности продолжения функций с сохранением нормы в соответствующих соболевских пространствах будем считать, что имеет место, следующее предположение о продолжении функций.

Предположение 1. *Имеют место следующие неравенства:*

$$\exists\beta_1\in(0;1]\ \exists\beta_2\in[\beta_1;1]:\beta_1\Lambda(\breve{v}_3,\breve{v}_3)\le\Lambda_2(\breve{v}_3,\breve{v}_3)\le\beta_2\Lambda(\breve{v}_3,\breve{v}_3)\ \forall\breve{v}_3\in\breve{V}_3.$$

Можно считать, что $\beta_2=1$.

Утверждение 1. *Решение каждой задачи из (3)* $\breve{u}\in\breve{V}_\alpha$*, существует, единственно и на* Ω_α *совпадает с решением задачи из (1), на* $\Omega_{3-\alpha}$ *равно* $\breve{u}_3$ *(равно нулю при* $\alpha=1$*)* $\alpha=1,2$.

Что касается существования решений задач из (3), то решения уже указаны в условии утверждения.

Модификации методов фиктивных компонент

Предлагаются модификации методов фиктивных компонент, т.е. предлагаются следующие итерационные процессы, методы приближённых вычислений деформаций пластин на упругом основании при смешанных краевых условиях на непрерывном уровне[3]:

$$\begin{gathered}\breve{u}^k\in\breve{V}:\Lambda(\breve{u}^k-\breve{u}^{k-1},\breve{v})=-\tau_k(\Lambda_1(\breve{u}^{k-1},I_1\breve{v})+\Lambda_2(\breve{u}^{k-1},\breve{v})-\breve{g}_1(I_1\breve{v})-\breve{g}_2(\breve{v}))\ \forall\breve{v}\in\breve{V},\\ \tau_1=(2-\alpha)+(\alpha-1)\tau,\ \tau\in(0;2),\\ \tau_k=\tau\in(0;2\beta_2^{-1}),\ k\in N\setminus\{1\}\ \forall\breve{u}^0\in\breve{V}_\alpha\subset\breve{V},\ \alpha=1,2.\end{gathered}\qquad(4)$$

В пространстве $\breve{V}$ вводится следующая норма:

$$\|\breve{v}\|_{\breve{V}}=\sqrt{\Lambda(\breve{v},\breve{v})}.$$

Теорема 1. *Для итерационных процессов из (4) имеют место следующие оценки:*

$$\left\|\breve{u}^k-\breve{u}\right\|_{\breve{V}}\le\varepsilon_\alpha\left\|\breve{u}^0-\breve{u}\right\|_{\breve{V}},\ k\in N,\ \alpha=1,2,$$

$$\left\| I_1 \breve{u}^k - \breve{u} \right\|_{\breve{V}} \le \left\| I_1 \right\|_{\breve{V}} \left\| \breve{u}^k - \breve{u} \right\|_{\breve{V}} \quad \alpha = 1,$$

где:

$0 \le \varepsilon_\alpha \le \left((2-\alpha)\delta_1 + (\alpha - 1) q_1 \right) q^{k-1}$,

$\delta_1 = \sqrt{\left\| I_1 \right\|_{\breve{V}}^2 - 1}, \left\| I - I_1 \right\|_{\breve{V}}, \ 0 \le q_1 = max\left\{ \left| 1 - \tau\beta_1 \right|, \ \left| 1 - \tau \right| \right\}, \tau \in (0;2),$

$0 \le q = max\left\{ \left| 1 - \tau\beta_1 \right|, \ \left| 1 - \tau\beta_2 \right| \right\} < 1, \ \tau \in (0; 2\beta_2^{-1})$.

Здесь I *оператор тождественного преобразования из* $\breve{V}$ *в* $\breve{V}$. $\breve{V}$. *Если* $\alpha = 2, \tau_1 = \tau = 2/(1+\beta_1),$ *то* $q_1 = (1-\beta_1)/(1+\beta_1).$ *Если* $\tau_k = \tau = 2/(\beta_1 + \beta_2),$ *то* $q = (\beta_2 - \beta_1)/(\beta_2 + \beta_1), k \in N \setminus \{1\}.$

Дискретизация фиктивно продолженных моделей

Проводятся дискретизации фиктивно продолженных моделей. При дискретизации задач из (3) будем дополнительно предполагать, что:

$$\breve{V} = \breve{V}(\Omega) = \left\{ \breve{v} \in W_2^2(\Omega) : \breve{v}\big|_{\Gamma_0 \cup \Gamma_1} = 0, \ \frac{\partial \breve{v}}{\partial \vec{n}}\Big|_{\Gamma_0 \cup \Gamma_2} = 0 \right\},$$

где область $\Omega = (0;b_1) \times (0;b_2),$ с границами: $\Gamma_0 = \varnothing, \overline{\Gamma}_1 = \{b_1\} \times [0;b_2] \bigcup [0;b_1) \times \{b_2\}, s = \partial\Omega = \overline{\Gamma}_1 \bigcup \overline{\Gamma}_2, \Gamma_3 = \varnothing, \ b_1, b_2 \in (0;+\infty),$ т.е. рассматриваются задачи, решение которых изучалось уже ранее [4]. Предлагается рассматривать $СЛАУ-$системы линейных алгебраических уравнений, получающихся при дискретизации задач предложенных в (3) с учётом сказанного выше на основе метода конечных элементов, фиктивно продолженные численные модели деформаций пластин на упругом основании при смешанных краевых условиях, т.е.:

$$\overline{u} \in R^N : \ B\overline{u} = \overline{g}, \ \overline{g} \in R^N,, \qquad (5)$$

где $\overline{v} \in R^N : \ \overline{v} = (v_1, ..., v_N)'$, $N = m \cdot n$, m, $n \in N$, а $v_{n(i-1)+j} = v_{i,j}$, $i = 1, ..., m$, $j = 1, ..., n$, и $v_{i,j}$ являются значениями функции дискретного аргумента соответствующего узлам сетки $(x_i, y_j) = \left((i - 0{,}5)h_1, (j - 0{,}5)h_2 \right)$, шаги сетки $h_1 = b_1/(m + 0{,}5), \ h_2 = b_2/(n + 0{,}5)$, состоящей из указанных выше узлов, а матрица B размерности $N \times N$, определяется следующим образом:

$$\left\langle B\overline{u}, \overline{v} \right\rangle = \Lambda_1(\tilde{u}, I_1\tilde{v}) + \Lambda_2(\tilde{u}, \tilde{v}) \ \forall \tilde{u}, \tilde{v} \in \tilde{V} \subset \breve{V},$$

векторы $\overline{g}$ определяются следующим образом:

$$\left\langle \overline{g}, \overline{v} \right\rangle = \breve{g}_1(I_1\tilde{v}) + \breve{g}_2(\tilde{v}) \ \ \forall \tilde{v} \in \tilde{V}.$$

Здесь $\langle \cdot,\cdot \rangle$ – скалярное произведение векторов следующего вида $\langle \bar{u},\bar{v} \rangle = \sum_{k=1}^{N} u_k v_k h_1 h_2$ $\forall \bar{u},\bar{v} \in R^N$, а подпространство $\tilde{V} \subset \breve{V}$ определяется так, что:

$$\tilde{V} = \left\{ \tilde{v} : \tilde{v} = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} v_{i,j} \Phi^{i,j}(x,y), v_{i,j} \in R, \right\},$$

где базисные функции:

$\Phi^{i,j}(x,y) = \Psi_{1,i}(x)\Psi_{2,j}(y)$,

$\Psi_{1,i}(x) = \mathrm{E}(1/i)\Psi(x/h_1 - i + 3) + \Psi(x/h_1 - i + 2) - \mathrm{E}(i/m)\Psi(x/h_1 - i)$,

$\Psi_{2,j}(y) = \mathrm{E}(1/j)\Psi(y/h_2 - j + 3) + \Psi(y/h_2 - i + 2) - \mathrm{E}(j/n)\Psi(y/h_2 - j)$,

$i = 1,\ldots,m$, $j = 1,\ldots,n$,

$$\Psi(z) = \begin{cases} 0,5z^2, & z \in [0;1], \\ -z^2 + 3z - 1,5, & z \in [1;2], \\ 0,5z^2 - 3z + 4,5, & z \in [2;3], \end{cases}$$

$\Psi(z) = 0$, $z \notin [0;3]$, $E(\cdot)$ – функция целая часть числа. Будем предполагать, что оператор I_0 просто обнуляет все коэффициенты $v_{i,j}$ у базисных функций $\Phi^{i,j}(x,y)$ носители, которых имеют не пустое пересечение с границей S, т.е. с границей (частью границы области) через которую осуществляются продолжения задач и их решений. Предполагается, что оператор I_1 обнуляет все коэффициенты $v_{i,j}$ у базисных функций $\Phi^{i,j}(x,y)$, если их носители имеют не пустое пересечение с $\Omega \setminus \Omega_1$.

Отметим, что решение задач из (5) при каждом $\alpha = 1,2$ существует, единственно и известны оценки типа [2]:

1. $\|\breve{u} - \tilde{u}\|_{W_2^{m_1}(\Omega)} \le c\left|\bar{h}\right|^{m_2 - m_1} \|\breve{u}\|_{W_2^{m_2}(\Omega)}$,
2. $\lim_{|\bar{h}| \to 0} \|\breve{u} - \tilde{u}\|_{W_2^2(\Omega)} = 0$, $\left|\bar{h}\right| = \max\{h_1, h_2\}$.

Введём дополнительно в рассмотрение подпространства:

$$\tilde{V}_{i^2} = \left\{ \tilde{v}_{i^2} \in \tilde{V} : \tilde{v}_{i^2} \Big|_{\Omega \setminus \Omega_i} = 0 \right\} i = 1,2.$$

Пусть $\tilde{V}_0 = \tilde{V}_1 \oplus \tilde{V}_4$ прямая сумма подпространств $\tilde{V}_{i^2}\ i = 1,2$ в скалярном произведении $\Lambda(\cdot,\cdot)$, подпространство:

$$\tilde{V}_3 = \left\{\tilde{v}_3 \in \tilde{V} : \Lambda(\tilde{v}_3, \tilde{v}_0) = 0\ \forall \tilde{v}_0 \in \tilde{V}_0\right\},$$

т.е. $\tilde{V} = \tilde{V}_0 \oplus \tilde{V}_3$ в скалярном произведении $\Lambda(\cdot,\cdot)$, а $\tilde{v}_0 \in \tilde{V}$, $\tilde{v}_3 \in \tilde{V}$ есть проекции $\tilde{v}$ на соответствующие подпространства. Вводятся следующие подпространства: $\tilde{V}_{8-3i} = \tilde{V}_3 \oplus \tilde{V}_{i^2}$, $i = 1,2,$ тогда имеет место $\tilde{V} = \tilde{V}_1 \oplus \tilde{V}_2$.

Замечание 1. Имеют место следующие неравенства

$$\exists \hat{\beta}_1 \in (0;1]\ \exists \hat{\beta}_2 \in \left[\hat{\beta}_1;1\right] : \hat{\beta}_1 \Lambda(\tilde{v}_3, \tilde{v}_3) \le \Lambda_2(\tilde{v}_3, \tilde{v}_3) \le \hat{\beta}_2 \Lambda(\tilde{v}_3, \tilde{v}_3)\ \forall \tilde{v}_3 \in \tilde{V}_3.$$

Можно считать, что $\hat{\beta}_2 = 1$.

Дискретные модификации методов фиктивных компонент

Предлагается модификации методов фиктивных компонент на дискретном уровне, т.е. предлагаются итерационные процессы, численные методы приближённых вычислений деформаций пластин на упругих основаниях при смешанных краевых условиях следующего вида:

$$\tilde{u}^k \in \tilde{V} : \Lambda(\tilde{u}^k - \tilde{u}^{k-1}, \tilde{v}) = -\tau_k(\Lambda_1(\tilde{u}^{k-1}, I_1\tilde{v}) + \Lambda_2(\tilde{u}^{k-1}, \tilde{v}) - \breve{g}_1(I_1\tilde{v}) - \breve{g}_2(\tilde{v}))\ \forall \tilde{v} \in \tilde{V},$$

$$\tau_1 = (2-\alpha) + (\alpha - 1)\tau,\ \tau_k = \tau \in (0;2),\ k \in N \setminus \{1\},\ \forall \tilde{u}^0 \in \tilde{V}_\alpha \subset \tilde{V},\ \alpha = 1,2; \quad (6)$$

модификации методов фиктивных компонент на матричном уровне:

$$\bar{u}^k \in R^N : \Lambda(\bar{u}^k - \bar{u}^{k-1}) = -\tau_k(B\bar{u}^{k-1} - \bar{g}),$$

$$\tau_1 = (2-\alpha) + (\alpha - 1)\tau,\ \tau_k = \tau \in (0;2),\ k \in N \setminus \{1\},\ \forall \bar{u}^0 \in \bar{V}_\alpha \subset R^N,\ \alpha = 1,2, \quad (7)$$

где

$\tilde{V}_1 = \left\{\tilde{v}_1 \in \tilde{V} : \tilde{v}_1 \in \breve{V}_1\right\}$, $\tilde{V}_2 = \left\{\tilde{v}_2 \in \tilde{V} : \Lambda(\tilde{v}_2, \tilde{v}_1) = 0\ \forall \tilde{v}_1 \in \tilde{V}_1\right\}$, $\bar{V}_\alpha \subset R^N$ подпространства, соответствующие подпространствам, $\tilde{V}_\alpha\ \alpha = 1,2,$ а матрица Λ размерности $N \times N$, определяется следующим образом:

$$\left\langle \Lambda\bar{u}, \bar{v} \right\rangle = \Lambda(\tilde{u}, \tilde{v})\ \ \forall \tilde{u}, \tilde{v} \in \tilde{V} \subset \breve{V}.$$

Вводится следующая норма:

$$\|\bar{v}\|_\Lambda = \sqrt{\langle \Lambda\bar{v}, \bar{v} \rangle},\ \forall \bar{v} \in R^N.$$

Следствие 1. *Для итерационных процессов из (7) имеют место следующие оценки:*

$$\left\|\bar{u}^k - \bar{u}\right\|_\Lambda \le \hat{\varepsilon}_\alpha \left\|\bar{u}^0 - \bar{u}\right\|_\Lambda,\ k \in N,\ \alpha = 1,2,$$

где

$$0 \le \hat{\varepsilon}_\alpha \le \left((2-\alpha)\hat{\delta}_1 + (\alpha-1)\hat{q}_1\right)\hat{q}^{k-1},$$

$$\exists c \in (0+\infty): \hat{\delta}_1 \le c\left|\underline{h}\right|^{-3/2},\ \left|\underline{h}\right| = \min\{h_1, h_2\},$$

$$0 \le \hat{q}_1 = max\left\{\left|1-\tau\hat{\beta}_1\right|,\ \left|1-\tau\right|\right\},\ \tau \in (0;2),$$

$$0 \le \hat{q} = max\left\{\left|1-\tau\hat{\beta}_1\right|,\ \left|1-\tau\hat{\beta}_2\right|\right\} < 1,\ \tau \in (0; 2\hat{\beta}_2^{-1}).$$

Если $\alpha = 2,\ \tau_1 = \tau = 2/(1+\hat{\beta}_1),$ *то* $\hat{q}_1 = (1-\hat{\beta}_1)/(1+\hat{\beta}_1).$

Если $\tau_k = \tau = 2/(\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2),$ *то* $\hat{q} = (\hat{\beta}_2 - \hat{\beta}_1)/(\hat{\beta}_2 + \hat{\beta}_1),\ k \in N \setminus \{1\}.$

Вывод. Можно использовать, что задачи, возникающие на каждом шаге итерационных процессов (7) решались ранее в [4]. Тогда для решения задач с N неизвестными из (5) итерационными процессами из (7) требуется не более чем $O(N \ln N)$ арифметических операций, когда $\alpha = 1$ и не более чем $O(N)$ арифметических операций, когда $\alpha = 2$. Для выбора итерационных параметров τ_k не требуется знания констант $\hat{\beta}_1$, $\hat{\beta}_2$. Для выбора этих параметров можно рекомендовать, например, когда $\alpha = 1$ метод скорейшего спуска, когда $\alpha = 2$ метод минимальных поправок.

Библиографический список

1. Оганесян, Л.А. Вариационно-разностные методы решения эллиптических уравнений / Л.А. Оганесян, Л.А. Руховец. – Ереван: Изд-во АН Арм ССР, 1979. – 235 с.

2. Обэн, Ж.П. Приближённое решение эллиптических краевых задач / Ж.П. Обэн. – М.: Мир, 1977. – 383 с.

3. Ушаков, А.Л. Модификация метода фиктивных компонент / А.Л. Ушаков; Челябинск, гос. техн. ун-т. – Челябинск, 1991. – 40 с. – Деп. в ВИНИТИ 11.11.91, № 4232. – В91.

4. Ушаков, А.Л. Итерационная факторизация на фиктивном продолжении для численного решения эллиптического уравнения четвёртого порядка / А.Л. Ушаков // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика, Механика, Физика». – 2014. – Т. 6, № 2. – С. 17–22.

К содержанию

УДК 517.958 + 517.98

РАСЩЕПЛЕНИЕ ОБЛАСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО САМОСОПРЯЖЕННОГО ПСЕВДОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА В ПРОСТРАНСТВЕ ГЛАДКИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ K-ФОРМ, ОПРЕДЕЛЕННЫХ НА РИМАНОВОМ МНОГООБРАЗИИ БЕЗ КРАЯ

Е.А. Богонос, Д.Е. Шафранов

Получен результат о расщеплении области определения эллиптического самосопряженных псевдодифференциального оператора, в частности оператора Лапласа – Бельтрами, в пространстве гладких дифференциальных k–форм, определенных на гладком компактном ориентированном римановом многообразии без края. Данный результат можно использовать в теории моделей соболевского типа.

Ключевые слова: дифференциальные k-формы; риманово многообразие; модели соболевского типа, прямая сумма подпространств.

Введение

В настоящее время широко исследуются различные математические модели на основе уравнений соболевского типа вида

$$L\dot{u} = Mu, \qquad (1)$$

с необратимым оператором L при производной [1]. Стоит отметить, что исследования ведутся как для абстрактных уравнений, так и по конкретным приложениям такого вида [2]. Имеются качественные и численные исследования решений данных уравнений в самых различных постановках. Нас будет интересовать один из аспектов разрешимости задачи Коши в пространстве дифференциальных k-форм, определенных на римановом многообразии без края:

$$u(0) = u_0, \qquad (2)$$

для уравнений вида (1), а именно требующееся в теории относительных операторов расщепление области определения оператора $L \in \mathcal{L}(U, F)$ в прямую сумму подпространств:

$$U = U^0 \oplus U^1. \qquad (3)$$

В работе [5] исследовался частный случай операторов в пространстве дифференциальных k-форм на сфере.

Во введении формулируется задача и описывается ее связь с математическими моделями соболевского типа. В первом пункте (предварительные сведения) вводятся пространства дифференциальных k-форм, определен-

ных на многообразии без края и сведения из теории относительно ограниченных операторов Свиридюка [1] и теории Ходжа–Кодаиры [3] о расщеплении таких пространств. Во втором пункте (основные результаты) приведены: основной результат о расщеплении области определения эллиптического самосопряженного оператора и замечания.

Предварительные сведения

Пусть U и F банаховы пространства и операторы $L,M \in \mathcal{L}(U,F)$ т.е. линейны и ограниченны. Рассмотрим 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 точка ∞ – полюс порядка $p \in \{0\}\cup\mathbf{N}$ L – резольвенты оператора M.*

Пусть $\rho^L(M)\neq\emptyset$. Уравнение (1) 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 [1]. *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 $\ker P = \mathsf{U}^0, \mathrm{im}P = \mathsf{U}^1$, $\ker Q = \mathsf{F}^0,\ \mathrm{im}Q = \mathsf{F}^1$.

Пусть Ω_n является гладким компактным ориентированным римановым многообразием без края. Пространства гладких дифференциальных k-форм, определенных на многообразии Ω_n обозначим $H_k = H_k(\Omega_n), k = 0,1,...,n$. 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 $H_{kd} = d\delta[H_k], H_{k\delta} = \delta d[H_k], H_{k\Delta} = \ker\Delta,\ k = 0,1,...,n$.

Определим формулой:

$$(\xi,\eta)_0 = \int \xi \wedge *\eta, \text{ где } \xi,\eta \in H_k \tag{10}$$

скалярное произведение в пространстве $H_k, k = 0,1,...,n$, 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. [3] (теорема Ходжа – Кодаиры) *Для любого* $k = 0,1,...,n$ *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 следующими формулами:

$$(\xi,\eta)_1 = (-\Delta\xi,\eta)_0 + (\xi,\eta)_0,$$

$$(\xi,\eta)_2 = (\Delta\xi,\Delta\eta)_0 + (\xi,\eta)_1, \tag{12}$$

еще два скалярных произведения пространстве $H_k, k = 0,1,...,n,$ 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 пространства $\mathbf{H}_k^l = \left(\mathrm{H}_{k\Delta}^l\right)^\perp, l = 0,1,2$ (т.е. ортогональное дополнение к гармоническим k-формам). Пространства $\mathbf{H}_\mathbf{k}^\mathbf{i}, i = 1,2$ – банаховы, причем в силу непрерывности и плотности вложений $\mathbf{H}_\mathbf{k}^\mathbf{0} \subset \mathbf{H}_\mathbf{k}^\mathbf{1} \subset \mathbf{H}_\mathbf{k}^\mathbf{2}$, а также конечности ранга оператора $P_{k\Delta}$ и $k = 0,1,\ldots,n$ справедливо следующее.

Следствие. [4] *Для любого* $k = 0,1,\ldots,n$ *существуют расщепления пространств:*

$$\mathbf{H}_\mathbf{k}^\mathbf{i} = \mathbf{H}_{\mathbf{k}\Delta}^{\mathbf{i}\mathbf{1}} \oplus \mathbf{H}_{\mathbf{k}\Delta}, \tag{13}$$

где $\mathbf{H}_{\mathbf{k}\Delta}^{\mathbf{i}\mathbf{1}} = \mathbf{I} - P_{k\Delta}\mathbf{H}_{\mathbf{k}\Delta}, i = 1,2$.

Основные результаты

Пусть Ω_n – гладкое компактное ориентированное риманово многообразием без края. Используя предварительные сведения, определим:

$$\tilde{U} = \bigoplus_{k=0}^{n} \mathbf{H}_\mathbf{k}^\mathbf{2}, \tilde{F} = \bigoplus_{k=0}^{n} \mathbf{H}_\mathbf{k}^\mathbf{0}. \tag{14}$$

Пространства $\tilde{U}$ и $\tilde{F}$ вещественные векторные расслоения дифференциальных k-форм на многообразии Ω_n. Обозначим $U = C^\infty(\tilde{U}),\ F = C^\infty(\tilde{F})$ векторные пространства гладких сечений $\tilde{U}, \tilde{F}$ соответственно.

Определение 3. *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).*

Теорема 3. Пусть L линейный эллиптический самосопряженный дифференциальный оператор. Тогда пространства U и F разлагаются в прямые суммы:

$$F = \mathrm{im}L \oplus \ker L^*, \tag{15}$$

$$U = \mathrm{im}L^* \oplus \ker L. \tag{16}$$

Замечание 1. *Эта теорема дает возможность заменить требование фредгольмовости оператора L в моделях соболевского типа на его эллиптичность и самосопряженность в соответствующих пространствах.*

Замечание 2. *Для иллюстрации теоремы 3, очевидно, можно взять оператор Лапласа – Бельтрами, о котором говорилось выше, и рассмотреть расщепление действия этого оператора, которое соответствует теореме Ходжа – Кодаиры.*

Библиографический список

1. Sviridyuk, G.A. Linear Sobolev Type Equations and Degenerate Semigroups of Operators / G.A. Sviridyuk, V.E. Fedorov. – Utrecht etc.: VSP, 2003. – 268 p.

2. Свиридюк, Г.А. Неклассические модели математической физики / Г.А. Свиридюк, С.А. Загребина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 40 (299). – Вып. 14. – С. 7–18.

3. Морен, К. Методы гильбертова пространства / К. Морен – М.: Мир, 1965. – 572 с.

4. Шафранов, Д.Е. Уравнение Хоффа как модель упругой оболочки / Д.Е. Шафранов, А.И. Шведчикова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 18 (277). – Вып. 12. – С. 77–81.

5. Шафранов, Д.Е. О моделях соболевского типа в пространстве дифференциальных k-форм на сфере / Д.Е. Шафранов // Наука ЮУрГУ: мат-лы 66-й науч. конф. Секция естественных наук. – Челябинск, Издательский центр ЮУрГУ, 2014. – С. 234–238.

К содержанию

УДК 517.95 + 517.98 + 517.9

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ПОЛУЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ СОБОЛЕВСКОГО ТИПА ВЫСОКОГО ПОРЯДКА

Е.В. Бычков

Целью статьи является численное исследование задачи Шоуолтера–Сидорова для вырожденного уравнения Буссинеска–Лява, а также численное исследование задачи Коши для невырожденного уравнения Буссинеска–Лява в одномерном случае. В работе используется метод фазового пространства и метод Галеркина.

Ключевые слова: задача Шоуолтера–Сидорова; уравнение соболевского типа; фазовое пространство; метод Галеркина.

Введение

Пусть Ω ограниченная область в R^n, $n \in N$ с границей $\partial\Omega$ класса C^∞. В цилиндре $\Omega \times \overline{R_+}$ рассмотрим уравнение Буссинеска–Лява [1, 2]:

$$(\lambda - \Delta)\ddot{u} = \alpha(\Delta - \lambda')\dot{u} + \beta(\Delta - \lambda'')u + \Delta f(u), \qquad (1)$$

с краевыми условиями:

$$u(x,t)=0,(x,t)\in\partial\Omega\times\bar{R}_+, \tag{2}$$

и условиями Коши:

$$u(x,0)=u_0(x),\dot{u}(x,0)=u_1(x), \tag{3}$$

или условиями Шоуолтера–Сидорова:

$$(\lambda-\Delta)(u(x,0)-u_0(x))=0,(\lambda-\Delta)(\dot{u}(x,0)-u_1(x))=0, \tag{4}$$

где $\alpha,\beta,\lambda,\lambda',\lambda''\in R$, $f(u)$ – функция класса C^∞, $u(x,t)$ – искомая функция, она может иметь различный физический смысл в зависимости от задачи. Уравнение (1) является более общим случаем уравнения:

$$\frac{\partial^2\rho}{\partial t^2}-c_0^2\frac{\partial^2\rho}{\partial x^2}=mc_0^2\tau\frac{\partial^3\rho}{\partial t^2\partial x}-mc_0^2\frac{\partial^4\rho}{\partial t^2\partial x^2}, \tag{5}$$

где ρ – плотность, c_0 – скорость звука, τ – время релаксации, первый член в правой части отвечает за затухание звуковой волны вследствие теплопроводности и вязкости, а второй регулирует дисперсионные эффекты [3]. Уравнение (5) описывает распространение гравитационно-гироскопических волн в диспергирующих средах, например, поверхностно-акустические волны. Обозначим через $\sigma(\Delta)=\{\lambda_k\}$ множество собственных значений однородной задачи Дирихле для оператора Лапласа в области Ω. При $\lambda\notin\sigma(\Delta)$ задача (1), (2), (3) хорошо исследована и доказаны теоремы о существовании единственного решения. При $\lambda\in\sigma(\Delta)$ задача (1), (2), (3) является принципиально не разрешимой при произвольных начальных значениях $u_0(x),u_1(x)$, она была исследована ранее с помощью метода фазового пространства. Задача (1), (2), (4) сводится в подходящим образом выбранных банаховых пространствах к задаче Шоуолтера–Сидорова:

$$P(u(0)-u_0)=0,P(\dot{u}(0)-u_1)=0, \tag{6}$$

где P – некоторый спектральный проектор, а задача (1), (2), (3) – к задаче Коши:

$$u(0)=u_0,\dot{u}(0)=u_1, \tag{7}$$

для уравнения соболевского типа:

$$A\ddot{u}=B_1\dot{u}+B_0u+N(u). \tag{8}$$

Стоит заметить, что задача Шоуолтера–Сидорова является частным случаем начально-конечной задачи. Целью работы является исследование существования решения и численное решение задачи (1), (3), (4) при произвольных начальных значениях $u_0(x),u_1(x)$, а так же численное исследование задачи (1), (2), (4) при $\lambda\notin\sigma(\Delta)$ методом Галеркина.

Задача Шоуолтера – Сидорова для уравнения Буссинеска–Лява

Задачу (1), (2), (4) сведем к абстрактной задаче (6), (8), для этого зададим пространства:

$$U = \{u(x,t) \in W_2^{l+2}(\Omega \times \bar{R}_+) \mid u(x,t) = 0, (x,t) \in \partial\Omega \times \bar{R}_+\},$$

$$F = W_2^l(\Omega \times \bar{R}_+).$$

Тогда операторы A, B_1, B_0 имеют следующий вид $A = (\lambda - \Delta)$, $B_1 = \alpha(\Delta - \lambda')$, $B_0 = \beta(\Delta - \lambda'')$ и принадлежат пространству $L(U, F)$ (линейных и ограниченных операторов). Оператор, определенный формулой $N(u) = \Delta f(u)$ при $l > n/2 - 2$, принадлежит классу C^∞. Обозначим через $\{\varphi_k\}$ – множество соответствующих им собственных функций, ортонормированных в смысле скалярного произведения пространства $L_2(\Omega)$. Построим проектор $P(\bullet) = I - \sum_{\lambda = \lambda_k} < \bullet, \varphi_k > \varphi_k$, действующий в пространстве U, и проектор Q, имеющий тот же вид, но определенный в пространстве F. Обозначим через U^0 и F^0, соответственно, $\ker P$ и $\ker Q$. Тогда условия Шоуолтера–Сидорова (4) можно переписать в виде $I - \sum_{\lambda_k = \lambda} < u(0) - u_0(x), \varphi_k(x) > \varphi_k = 0$, $I - \sum_{\lambda_k = \lambda} < \dot{u}(0) - u_1(x), \varphi_k(x) > \varphi_k = 0$. Редукция задачи (1), (2), (4) к задаче (6), (8) окончена.

В [4] доказано, что если $\lambda \notin \sigma(\Delta)$ или $\lambda = \lambda' \neq \lambda''$, тогда пучок операторов B_1 и B_0 является полиномиально А-ограниченным и ∞ является устранимой особой точкой и выполнены все условия теоремы о существовании единственного локального решения абстрактной задачи (7), (8).

Заметим, что в случае задачи Шоуолтера–Сидорова начальные условия задаются как проекции на образ оператора при старшей производной, который в случае, когда ∞ – устранимая особая точка А-резольвенты пучка $\vec{B}$, совпадает с образом проектора P. Таким образом, начальные значения задачи Шоуолтера–Сидорова автоматически попадают в фазовое пространство заданного уравнения в отличие от начальных значений в задаче Коши.

Следовательно, для задачи (1), (2), (4) справедлива:

Теорема 1. Пусть $l > n/2 - 2$, $\lambda = \lambda' \neq \lambda''$ *или* $\lambda \notin \sigma(\Delta)$ *и отображение* $(I - Q)(B_0 + N'_{u_0}): U^0 \to F^0$ *является топлинейным изоморфизмом. Тогда для любых* $u_0, u_1 \in U$ *существует единственное решение задачи (1), (2), (4) (задачи (1), (2), (3)).*

Численное моделирование колебаний в диспергирующих средах

На основе теоретических результатов был разработан и реализован алгоритм численного решения задачи Шоуолтера–Сидорова для уравнения Буссинеска–Лява (1) в среде Maple 15.0. Разработанная программа позволяет:

1. Ввести коэффициенты $\alpha, \beta, \lambda, \lambda', \lambda''$, функцию $f(u)$, начальные данные $u_0(x), u_1(x)$ и длину отрезка.

2. Вывести приближенное решение задачи Шоуолтера–Сидорова (Коши) для уравнения (1) с условиями Дирихле.

3. Получить графическое изображение полученного приближенного решения.

4. Построить фазовое пространство уравнения (1).

Решение задачи (1), (2), (4) будем искать в виде галеркинской суммы:

$$\tilde{u}(x,t) = \sum_{n=1}^{3} u_k(t)\varphi_k(x), \tag{9}$$

где $\varphi_k(x)$ – собственные функции оператора Лапласа.

Пример. Требуется найти численное решение задачи (1), (2), (4) при $\lambda = \lambda' = -9$, $\lambda'' = 0$, $\alpha = \beta = 1$, $f(u) = u^3$, $u(0,t) = u(\pi,t) = 0$, $u_0 = \sin(x) - \sin(2x) + 3\sin(3x)$, $u_1 = 5\sin(x)$ на отрезке $[0,\pi]$.

Решение. Задача (1), (2), (4) примет вид:

$$(-9-\Delta)\ddot{u} = (\Delta+9)\dot{u} + \Delta u + \Delta(u^3), \tag{10}$$

$$u(0,t) = u(\pi,t) = 0, \tag{11}$$

$$(-9-\Delta)\left(u(x,0) - \sin x + \sin 2x - 3\sin 3x\right) = 0,\ (-9-\Delta)\left(\dot{u}(x,0) - 5\sin x\right) = 0. \tag{12}$$

Уравнение (10) является вырожденным. Собственные функции $\varphi_k(x)$ однородной задачи Дирихле для оператора Лапласа на отрезке $[0,\pi]$ имеют вид $\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin(kx)$. В силу (9) решение имеет вид: $\tilde{u}\ (x,t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(u_1(t)\sin(x) + u_2(t)\sin(2x) + u_3(t)\sin(3x))$. Подставив $\tilde{u}(x,t)$ в уравнение (12) и, умножив скалярно в смысле $L_2([0,\pi])$ полученное равенство на функции $\varphi_k(x)$, $k = 1,2,3$, получим систему нелинейных алгебро-дифференциальных уравнений (13) для нахождения $u_k(t)$.

Алгебраическое уравнение определяет фазовое пространство уравнения (10). Решив систему из двух дифференциальных уравнений, подставив результат в алгебраическое уравнение, получим решение задачи (10)–(12).

На рисунке построено численное решение с шагами $\Delta x = 0.002$ и $\Delta t = 0.1$.

$$\begin{cases} -10,0265\left(\dfrac{d^2}{dt^2}u_1(t)\right)=10,0265\left(\dfrac{d}{dt}u_1(t)\right)+0,598414(u_1(t))^2u_3(t)-0,598414(u_2(t))^2u_3(t)- \\ \quad -1,19683u_1(t)(u_2(t))^2-1,19683u_1(t)(u_3(t))^2-2,50663u_1(t)-0,598414(u_1(t))^3, \\ -6,26657\left(\dfrac{d^2}{dt^2}u_2(t)\right)=-6,26657\left(\dfrac{d}{dt}u_2(t)\right)-6,26657u_2(t)-4,78732u_2(t)(u_3(t))^2- \\ \quad -4,78732(u_1(t))^2u_2(t)-4,78732u_1(t)u_2(t)u_3(t)-2,39366\left(u_2(t)\right)^3, \\ 0=10,7715u_1(t)(u_2(t))^2+10,7715(u_2(t))^2u_3(t)-1,79524(u_3(t))^3+12,5313u_3(t)+ \\ \quad +5,38573(u_3(t))^3+5,38573u_1(t)(u_2(t))^2. \end{cases} \qquad (13)$$

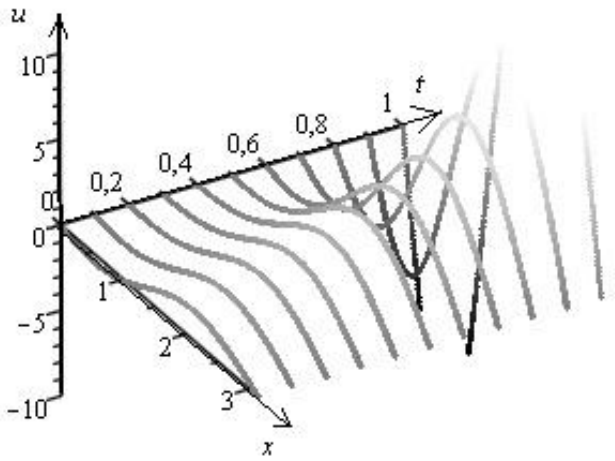


График приближенного решения задачи (16)–(18)

Библиографический список

1. Замышляева, А.А. Фазовые пространства одного класса линейных уравнений соболевского типа второго порядка / А.А. Замышляева // Вычислительные технологии. – 2003. – Т. 8. № 4.– С. 45–54.

2. Замышляева, А.А. Начально-конечная задача для неоднородного уравнения Буссинеска–Лява / А.А. Замышляева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2011. – №. 37 (254). – Вып 10. – С. 22–29.

3. Солдатов, А.П. Краевые задачи с нелокальными условиями А.А. Самарского для псевдопараболического уравнения высокого порядка / А.П. Солдатов, М.Х. Шхануков // ДАН. – 1987.– Т. 297, № 3. – С. 547–552.

4. Замышляева, А.А. Исследование одного класса линейных уравнений соболевского типа высокого порядка: дис. … канд. физ.-мат. наук / А.А. Замышляева. – Челябинск, 2003.

К содержанию

УДК 538.911 + 538.955 + 537.622

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА CO_2CRAL В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИСКАЖЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И СТЕПЕНИ БЕСПОРЯДКА

М.А. Загребин

С помощью теории функционала плотности проведено исследование зависимости структурных, магнитных и электронных свойств сплавов Гейслера Co2CrAl в зависимости от искажения структуры и степени структурной упорядоченности. Показано, что степень беспорядка и внешнее давление оказывают существенное влияние на электронные и магнитные свойства.

Ключевые слова: первопринципные вычисления; теория функционала плотности; сплавы Гейслера.

Ферромагнитные полуметаллы (ФМПМ) являются перспективными кандидатами для применения в устройствах спинтроники, из-за 100 % спиновой поляризации плотности электронных состояний (DOS) на уровне Ферми. Это означает, что в данном случае имеется энергетическая щель в DOS одной из спиновых конфигураций, и можно извлечь 100 % спин-поляризованный ток в данных материалах [1, 2].

Одним из примеров такого ФМПМ является сплав Co_2CrAl. В данном сплаве подзона электронов со спинами, направленными вверх, является полностью занятой, в то время как подзона с противоположным направлением спинов вблизи уровня Ферми E_F оказывается пустой. Сплав Co_2CrAl в упорядоченном состоянии выделяется в ряду ФМПМ тем, что спиновая поляризации в нем достигает предельного значения ≈ 100 % [3]. Поэтому перспективы возможного использования этого сплава в устройствах спинтроники вызывают постоянный интерес к исследованию его физических свойств. Исследования показывают, что зонная структура сплава Co_2CrAl чувствительна к искажению структуры и эффектам разупорядочения. Под действием указанных факторов ширина энергетической щели и степень спиновой поляризации могут меняться [3, 4].

В связи с вышесказанными обстоятельствами, целью данной работы является теоретическое исследование свойств сплава Co_2CrAl в зависимости от искажения структуры и степени структурной упорядоченности.

Исследования в данной работе проводились с помощью первопринципных вычислений. Для выполнения расчетов был использован первопринципный пакет spin-polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker (SPR-KKR) [5]. Структурная оптимизация выполнялась с использованием обменно-корреляционного потенциала в рамках приближения обобщенного градиента в формулировке Пердью, Бюрка и Эрнзерхофа (Perdew, Burke and Ernzerhof – PBE) [6]. Для оптимизированного параметра решетки были расчитаны спиновый

магнитный момент, объемный модуль упругости, DOS и параметры обменного взаимодействия, с использованием спин-поляризованного скалярно-релятивистского гамильтониана (SP-SREL) [5]. Параметры обменного взаимодействия Гейзенберга J_{ij} были рассчитаны с помощью выражения, предложенного Лихтенштейном с соавторами [7].

В работе для расчетов использована $L2_1$структурная фаза, которая состоит из четырех взаимопроникающих гранецентрированных кубических подрешеток. Расположение атомов на позициях в элементарной ячейке сплава Co_2CrAl представлено в таблице 1 [8].

Таблица 1

Расположение атомов в элементарной ячейке сплава Co_2CrAl

Атом	Позиция Уайкова	Координаты		
		x	*y*	*z*
Co	8*c*	0,25	0,25	0,25
		0,75	0,75	0,75
Cr	4*b*	0,5	0,5	0,5
Al	4*a*	0	0	0

Степень структурного беспорядка моделировалась путем замещения доли атомов на позициях 4*b* и 4*a*. Были исследованы 4 структуры с беспорядком. В первой структуре 5 % атомов Cr было помещено на позиции Al, в то время как 5 % Al было помещено на позиции Cr; во второй структуре были замещены 10 % атомов; в третьей – 20 %. В фазе *B*2 50 % атомов Cr расположено на позициях Al и 50 % атомов Al расположено на позициях Cr. Структурный беспорядок моделировался с помощью приближения когерентного потенциала (coherent potential approximation – CPA) [5].

На рис. 1 представлены результаты оптимизации параметра кристаллической решетки для разной степени структурного беспорядка.

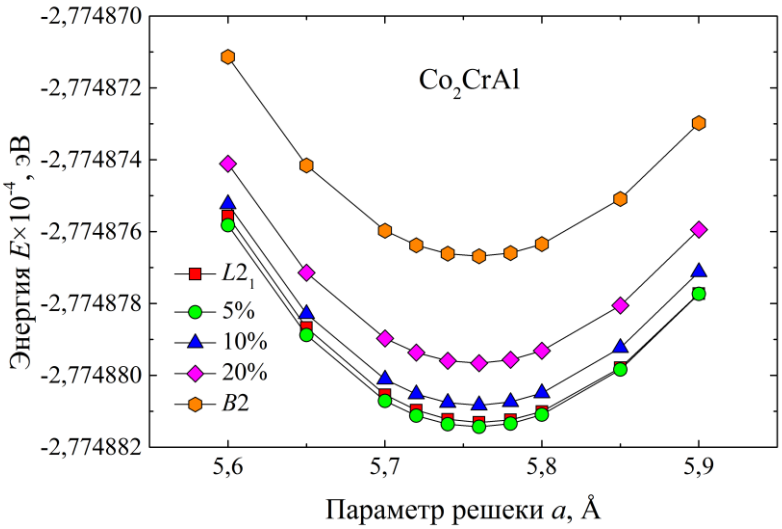


Рис. 1. Зависимость энергии от параметра кристаллической решетки сплава Гейслера Co_2CrAl с различной степенью беспорядка

Из рисунка видно, что с упорядоченная фаза $L2_1$ и фаза со степенью беспорядка 5 % имеют близкую энергию. При увеличении степени беспорядка энергия увеличивается. Разница энергий упорядоченной $L2_1$ фазы и неупорядоченной фазы $B2$ составляет ≈ 0,01 Р. Равновесный параметр решетки для всех структурных фаз составляет ≈ 5,76 Å. Данный результат находится в хорошем согласии с экспериментальными и теоретическими результатами [3, 4].

Полученные результаты были использованы для расчетов зависимости объемного модуля упругости и спинового магнитного момента от параметра кристаллической решетки (рис. 2).

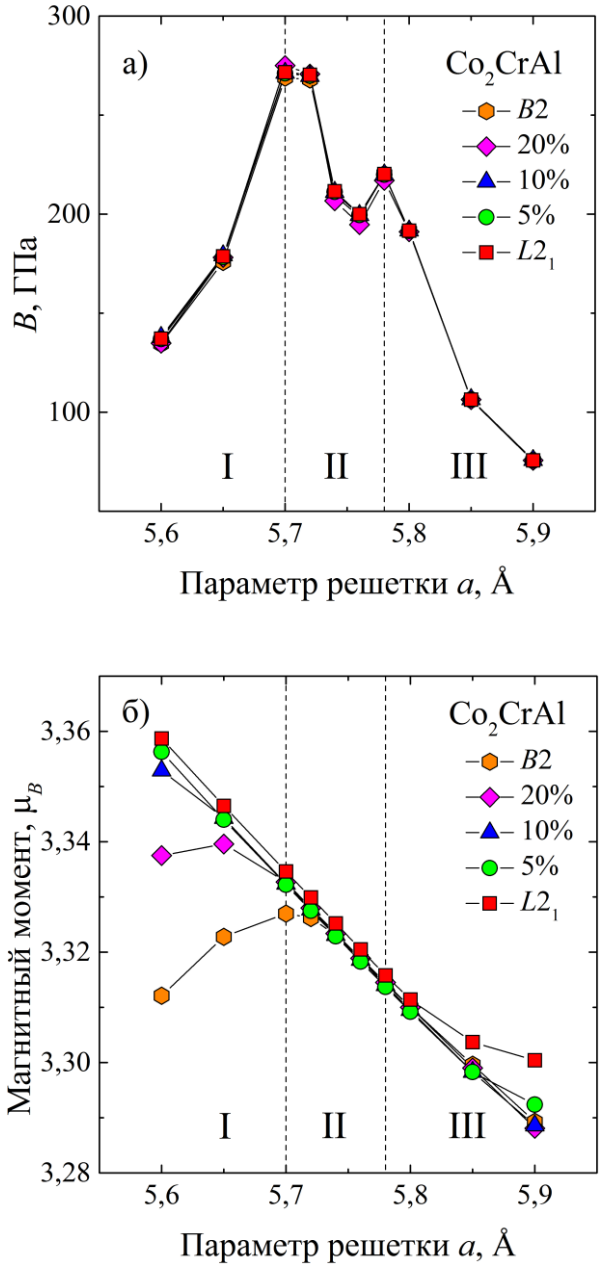


Рис. 2. Зависимость объемного модуля упругости (а) и спинового магнитного момента (б) сплава Гейслера Co_2CrAl с различной степенью беспорядка

Как видно из рис. 2а поведение объемного модуля упругости в зависимости от изменения параметра кристаллической решетки имеет сложный характер. Зависимость можно условно разделить на 3 области: $a \leq 5{,}7$ Å; 5,7 Å < a < 5,78 Å; $a \geq 5{,}8$ Å. В первой области модуль объемной упругости с увеличением параметра решетки увеличивается до ≈ 270 ГПа при значении a = 5,7 Å. Во второй области зависимость имеет минимум $B \approx 199$ ГПа, который соответствует равновесному значению параметра a =5,76 Å. В третьей области модуль упругости B уменьшается со значения $B \approx 191$ ГПа при значении a = 5,78 Å. Величина объемного модуля упругости не претерпевает существенного изменения для сплавов с различной степенью структурного беспорядка.

Рассмотрим поведение спинового магнитного момента при изменении параметра кристаллической решетки (рис. 2б). Можно отметить линейный характер зависимости на всем интервале для сплава Co_2CrAl со степенью беспорядка 10 %. На интервале от a = 5,6 Å до a = 5,8 Å магнитный момент линейно уменьшается. Сплавы с высокой степенью беспорядка (B2 и 20 %) в первой области демонстрируют нелинейное увеличение магнитного момента, в то время как сплавы с низкой степенью беспорядка (5 % и $L2_1$) демонстрируют нелинейное поведение магнитного момента в области III. Можно отметить, что во второй области величина магнитного момента существенно не зависит от степени беспорядка.

Значения объемного модуля упругости и спинового магнитного момента для равновесного значения параметра кристаллической решетки в зависимости от степени беспорядка приведены в таблице 2.

Таблица 2

Параметр кристаллической решетки, объемный модуль упругости и спиновый магнитный момент сплава Co_2CrAl в зависимости от степени беспорядка

Сплав	a, Å	B, ГПа	Магнитный момент, μ_B
$L2_1$	5,761	199,915	3,321
5 %	5,758	199,558	3,318
10 %	5,759	199,476	3,319
20 %	5,758	194,747	3,319
$B2$	5,758	198,732	3,319

Величина спинового магнитного находится в хорошем согласии с теоретическими результатами [9].

Полученные равновесные значения параметров кристаллической решетки были использованы для вычисления DOS и параметров обменного взаимодействия для сплавов со степенью беспорядка: $L2_1$, 5 % и $B2$. Данные вычисления были проведены для внешнего давления 0 и 8 ГПа. На рис. 3 представлены зависимости DOS. Видно, что вблизи уровня Ферми E_F для электронов со спинами «вниз», выявляется полоса шириной около 1 eV

с несколькими узкими пиками. В то время как, для электронов со спинами «вниз», в окрестности E_F формируется глубокая энергетическая щель также шириной около 1 eV. Внешнее давление существенно не изменяет поведение DOS. В разупорядоченном состоянии структура электронного спектра, особенно вблизи E_F, претерпевает значительные изменения (рис. 3г).

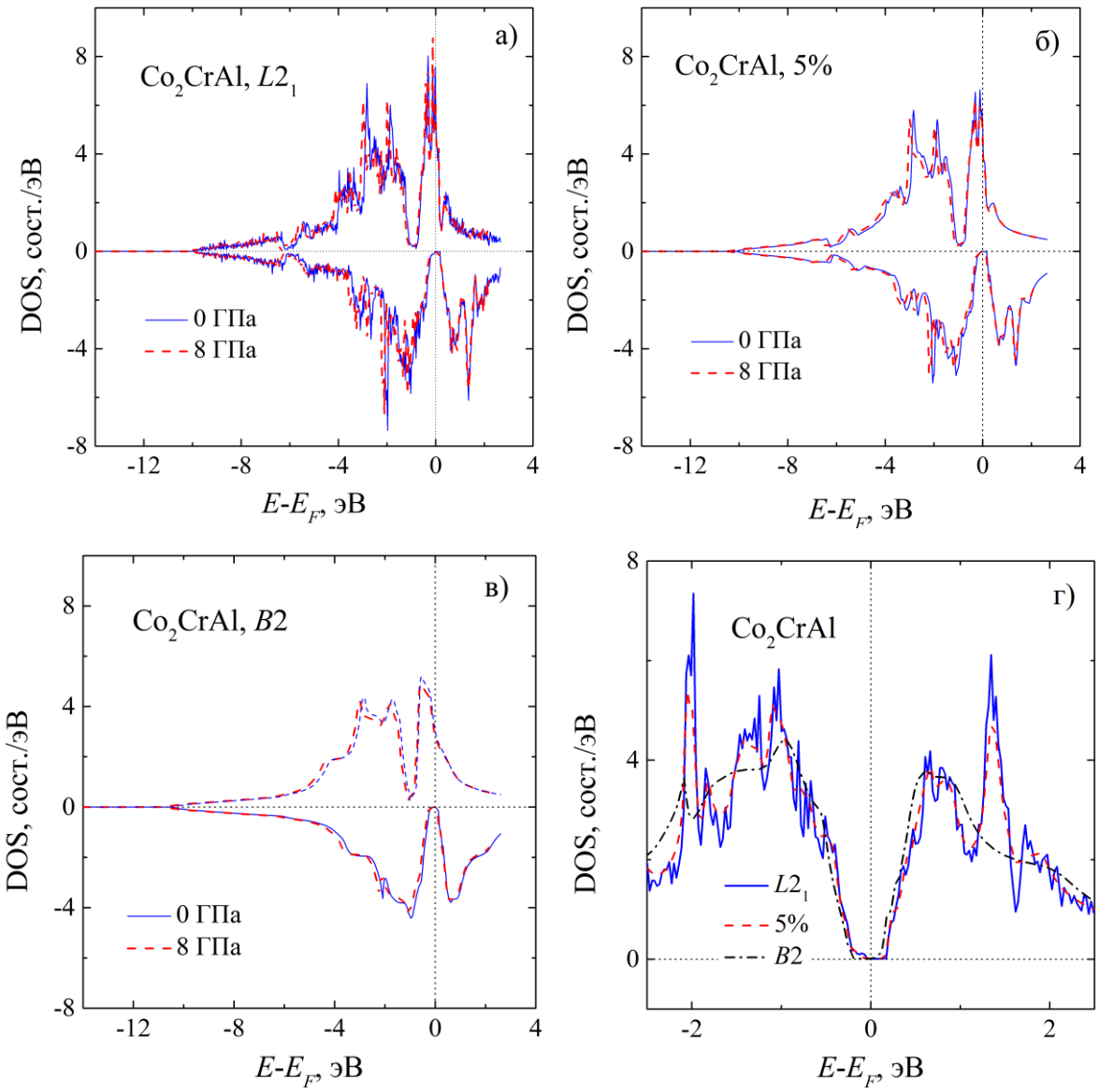


Рис. 3. Плотность электронных состояний сплава Гейслера Co_2CrAl при внешнем давлении 0 и 8 Гпа: а) фаза $L21$; б) фаза со степенью беспорядка 5 %; в) фаза B2; плотность электронных состояний подзоны со спинами «вниз» при внешнем давлении 0 ГПа

На рис. 4 представлены зависимости параметров обменного взаимодействия сплавов от межатомного расстояния. Здесь и далее, положительные обменные постоянные ($J_{ij} > 0$) соответствуют ферромагнитному (ФМ) состоянию, в то время как отрицательные постоянные ($J_{ij} < 0$) соответствуют

анти-ФМ (АФМ) состоянию. На зависимостях наблюдается осциллирующее поведение J_{ij}. В случае Co_2CrAl наиболее сильное ФМ взаимодействие соответствует взаимодействию Co-Cr. Величина его составляет ≈3,4 мэВ. Внешнее давление 8 ГПа усиливает взаимодействие на 1 мэВ. С увеличением степени беспорядка данное взаимодействие увеличивается. Взаимодействия Cr_I-Cr_I и Cr_{II}-Cr_{II} (здесь в качестве Cr_I обозначены атомы Cr расположенные на регулярных позициях, Cr_{II} – атомы Cr на позициях Al) имеют АФМ характер. С увеличением степени беспорядка данные взаимодействия увеличиваются.

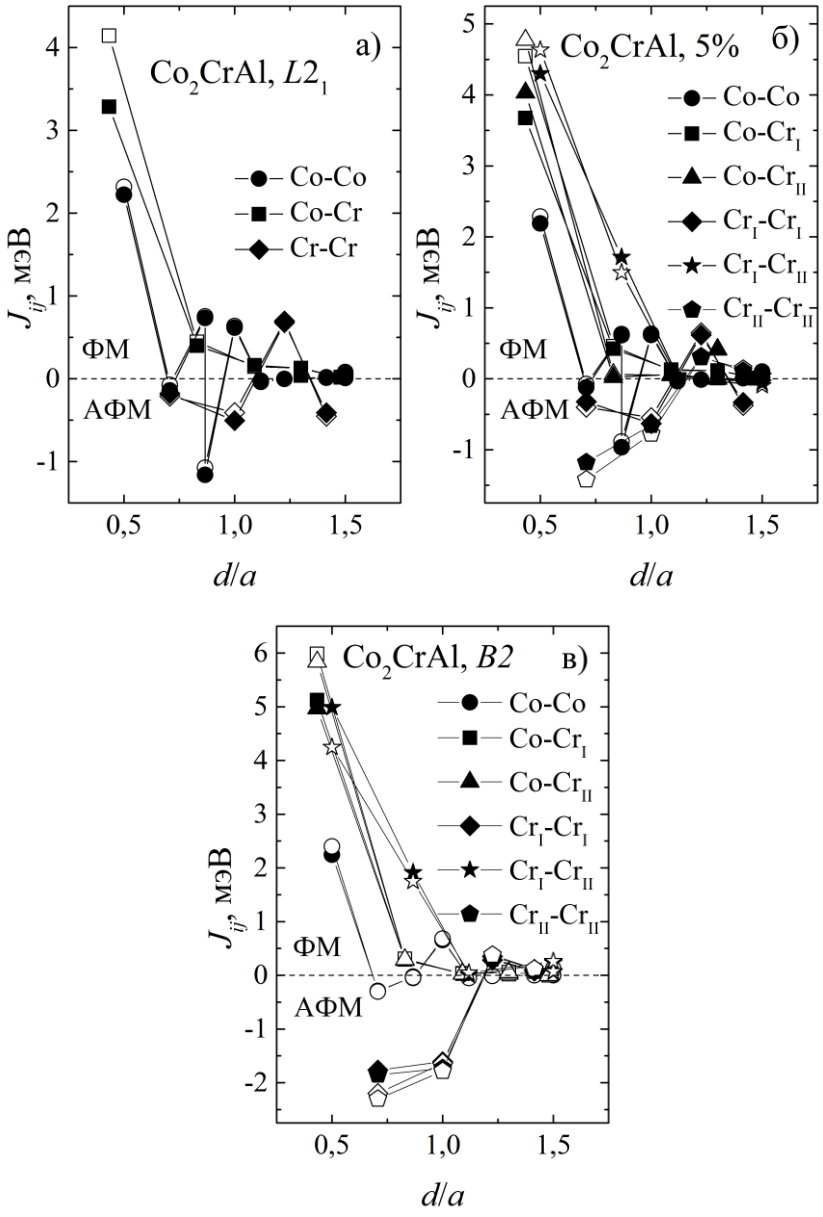


Рис. 4. Зависимость параметров магнитного обменного взаимодействия от межатомного расстояния (в единицах параметра кристаллической решетки *a*) сплава Co2CrAl: а) упорядоченная фазы L21; б) фаза со степенью беспорядка 5 %; в) фаза B2. Закрытыми символами показаны параметры при внешнем давлении 0 ГПа, открытыми при внешнем давлении 8 ГПа

Следует отметить, что внешнее давление Внешнее давление 8 ГПа оказывает влияние на взаимодействие CrII-CrII увеличивая АФМ характер.

Таким образом, в данной работе были исследованы структурные, электронные и магнитные свойства сплава Гейслера Co2CrAl в зависимости от искажения структуры и степени структурной упорядоченности с помощью первопринципных методов. Определено, что упорядоченное состояние L21 является устойчивым. Сплав со степенью беспорядка 5 % имеет энергию близкой к энергии L21. Показано, что степень беспорядка и внешнее давление оказывают существенное влияние на электронные и магнитные свойства.

Библиографический список

1. Ирхин, В.Ю. Полуметаллические ферромагнетики / В.Ю. Ирхин, М.И. Кацнельсон // Усп. физ. наук. – 1994. – Т. 164. – № 7. – С. 705–724.

2. Comtesse, D. First-principles study of spin-dependent thermoelectric properties of half-metallic Heusler thin films between platinum leads / D. Comtesse, B. Geisler, P. Entel et al // Phys. Rev. B. 2014. V. 89. Pp. 094410.

3. Kudryavtsev, Y.V. Effect of disorder on various physical properties of Co_2CrAl Heusler alloy films: Experiment and theory / Y.V. Kudryavtsev, V.N. Uvarov and V.A. Oksenenko et al // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. Pp. 195104.

4. Магнитные и электрические свойства полуметаллического ферромагнетика Co_2CrA / Н.И. Коуров, А.В. Королев, В.В. Марченков и др. // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55. – Вып. 5. – С. 899–906.

5. Ebert, H. Calculating condensed matter properties using the KKR-Green's function method – recent developments and applications / H. Ebert, D. Ködderitzsch, J. Minár // Reports on Progress in Physics. 2011. V. 74. Pp. 096501.

6. Perdew, J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // Phys. Rev. Letters. 1996. Vol. 77. Pp. 3865–3868.

7. Liechtenstein, A.I. Local spin density functional approach to the theory of exchange interactions in ferromagnetic metals and alloys / A.I. Liechtenstein, M.I. Katsnelson, V.P. Antropov et al // J. of Magnetism and Magnetic Materials. 1987. V. 67. Pp. 65–74.

8. Wedel, B. Low temperature crystal structure of Ni-Mn-Ga alloys / B. Wedel, M. Suzuki, Y. Murakami et al // J. of Alloys and Compounds. 1999. V. 290. Pp. 137–142.

9. Abu Alhaj, B. Electronic and magnetic properties of $Co_{2-x}Fe_xCrAl$ alloys: Ab initio calculations / Bedor Abu Alhaj and Bothina Hamad // Phys. status solidi (b). 2014. V. 251. Pp.184–189.

К содержанию

УДК 517.9 + 517.977

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЯ БУССИНЕСКА–ЛЯВА

А.А. Замышляева, О.Н. Цыпленкова

Работа посвящена исследованию разрешимости начально-конечной задачи, разрешимости задачи оптимального управления решениями начально-конечной задачи и задачи Шоуолтера–Сидорова для линейной математической модели Буссинеска–Лява. Начально-конечные условия являются обобщением условий Шоуолтера–Сидорова, которые в свою очередь являются обобщением условий Коши. Как известно, задача Коши для уравнений соболевского типа является принципиально неразрешимой при произвольных начальных значениях. В работе применяется метод фазового пространства, разработанный Г.А. Свиридюком, теория относительно полиномиально ограниченных пучков операторов, разработанная А.А. Замышляевой.

Ключевые слова: уравнение соболевского типа, оптимальное управление, математическая модель продольных колебаний, начально-конечная задача, задача Шоуолтера–Сидорова.

1. Введение

Пусть Ω – ограниченная область из R^n, $n \in N$ с границей $\partial\Omega$ класса C^∞.

Математическая модель Буссинеска–Лява продольных колебаний в упругом стержне с учетом инерции описывается следующей начально-краевой задачей:

$$(\lambda - \Delta)\ddot{x} = \alpha(\Delta - \lambda')\dot{x} + \beta(\Delta - \lambda'')x + \Delta f(x), \quad (1)$$

$$x(s,t) = 0, \quad (s,t) \in \partial\Omega \times R, \quad (2)$$

$$x(s,0) = x_0(s), \quad \dot{x}(s,0) = x_1(s). \quad (3)$$

Функция $x(s,t)$ характеризует продольное смещение поперечных сечений стрежня, параметры α, β, λ, λ', λ'' – свойства материала, из которого изготовлен стержень, и связывают между собой плотность, модуль Юнга, коэффициент Пуассона и коэффициент упругости. В работах А.А. Замышляевой уравнение (1) рассматривалось в линейном случае, а в работах G. Chen – только в невырожденном [1].

В работе указанная математическая модель исследована не только с условиями Коши, но и с условиями Шоуолтера–Сидорова:

$$P(x(0) - x_0) = 0, \quad P(\dot{x}(0) - x_1) = 0, \quad (4)$$

где P – некоторый спектральный проектор.

Условия Шоуолтера–Сидорова (4) задают проекции решений в начальный момент времени. Они обобщают условия Коши и являются более естественными для уравнений соболевского типа. Обобщением условий Шоуолтера–Сидорова являются начально-конечные условия. В работе так же исследуется задача оптимального управления решениями уравнения Буссинеска–Лява:

$$(\lambda-\Delta)x_{tt}=\alpha(\Delta-\lambda')x_t+\beta(\Delta-\lambda'')x+u, \tag{5}$$

с граничным условием:

$$x(s,t)=0,\ \ (s,t)\in\partial\Omega\times(0,\tau), \tag{6}$$

и начально-конечными условиями:

$$\begin{aligned} &P_{in}(\dot{x}(0)-x_1^0)=0, P_{in}(x(0)-x_0^0)=0;\\ &P_{fin}(\dot{x}(\tau)-x_1^\tau)=0, P_{fin}(x(\tau)-x_0^\tau)=0. \end{aligned} \tag{7}$$

Задача оптимального управления заключается в отыскании пары $(\hat{x},\hat{u})$, минимизирующей некоторый функционал штрафа, где $x(s,t)$ – функция, которая имеет различный физический смысл в зависимости от модели, а $u(s,t)$ – внешнее воздействие. Например, для модели продольных колебаний, целью управления является минимизация амплитуды внутренних волн.

Математическая модель (1), (2), (3) или (4) может быть сведена к задаче Коши или Шоуолтера–Сидорова для полного полулинейного уравнения соболевского типа второго порядка:

$$A\ddot{x}=B_1\dot{x}+B_0x+N(x). \tag{8}$$

Исследование проведено на основе теории относительно полиномиально ограниченных пучков операторов и теории дифференцируемых банаховых многообразий [2].

Задачу (5)–(6) в подходящих гильбертовых пространствах X и Y, U удается редуцировать к уравнению соболевского типа:

$$A\ddot{x}=B_1\dot{x}+B_0x+Cu, \tag{9}$$

с условиями Шоуолтера–Сидорова или начально-конечными условиями, где операторы $A,B_1,B_0\in L(X;Y),\ C\in L(U;Y)$, функции $u:[0,\tau)\subset R_+\to U$, $y:[0,\tau)\subset R_+\to Y(\tau<\infty)$.

Задача Коши для уравнения соболевского типа является принципиально неразрешимой при произвольных начальных значениях. Одним из подходов к ее решению является метод фазового пространства, разработанный Г.А. Свиридюком и Т.Г. Сукачевой.

2. Относительно полиномиально ограниченные пучки операторов

Пусть X и Y – банаховы пространства, операторы $A, B_1, B_0 \in L(X;Y)$. Обозначим через $\vec{B}$ пучок операторов B_1, B_0.

Определение 1. Множества $\sigma^A(\vec{B}) = \overline{C} \setminus \rho^A(\vec{B})$ и $\rho^A(\vec{B}) = \{\mu \in C : (\mu^2 A - \mu B_1 - B_0)^{-1} \in L(Y;X)\}$ будем называть, соответственно, A-спектром пучка и A-резольвентным множеством $\vec{B}$.

Оператор-функцию комплексной переменной $R_\mu^A(\vec{B}) = (\mu^2 A - \mu B_1 - B_0)^{-1}$ с областью определения $\rho^A(\vec{B})$ назовем A-резольвентой пучка $\vec{B}$.

Определение 2. [3] Пучок операторов $\vec{B}$ называется полиномиально A-ограниченным, если:

$$\exists a \in R_+ \quad \forall \mu \in C \quad (|\mu| > a) \Rightarrow (R_\mu^A(\vec{B}) \in L(Y;X)).$$

Введем в рассмотрение дополнительное условие:

$$\int_\gamma R_\mu^A(\vec{B}) d\mu \equiv O, \qquad \text{(A)}$$

где контур $\gamma = \{\mu \in C : |\mu| = r > a\}$.

Лемма 1. [3] Пусть пучок $\vec{B}$ полиномиально A-ограничен и выполнено (A). Тогда операторы:

$$P = \frac{1}{2\pi i}\int_\gamma R_\mu^A(\vec{B}) \mu A d\mu, \quad Q = \frac{1}{2\pi i}\int_\gamma \mu A R_\mu^A(\vec{B}) d\mu$$

– проекторы в пространствах X и Y соответственно.

Положим $X^0 = \ker P$, $Y^0 = \ker Q$, $X^1 = \operatorname{im} P$, $Y^1 = \operatorname{im} Q$. Из предыдущей леммы следует, что $X = X^0 \oplus X^1$, $Y = Y^0 \oplus Y^1$. Через A^k (B_l^k) обозначим сужение оператора A (B_l) на $X^k, k = 0,1;\ l = 0,1$.

Теорема 1. [3] Пусть пучок операторов $\vec{B}$ полиномиально A-ограничен, и выполнено (A). Тогда:

(i) $A^k \in L(X^k;Y^k), k = 0,1;$

(ii) $B_l^k \in L(X^k;Y^k), k = 0,1, l = 0,1;$

(iii) существует оператор $(A^1)^{-1} \in L(Y^1;X^1)$;

(iv) существует оператор $(B_0^0)^{-1} \in L(Y^0;X^0)$.

Построим операторы $H_0 = (B_0^0)^{-1}A^0 \in L(X^0)$ и $H_1 = (B_0^0)^{-1}B_1^0 \in L(X^0)$.

Определение 3. Определим семейство операторов $\{K_q^1, K_q^2\}$ следующим образом:

$$K_1^1 = H_0, K_1^2 = -H_1, \ \dots \ K_{q+1}^1 = K_q^2 H_0, K_{q+1}^2 = K_q^1 - K_q^2 H_1, \ q = 1,2,\dots.$$

Определение 4. Точка ∞ называется (i) устранимой особой точкой A-резольвенты пучка $\vec{B}$, если $K_1^1 \equiv O$, $K_1^2 \equiv O$;

(ii) полюсом порядка $p \in N$ A-резольвенты пучка $\vec{B}$, если $K_p^1 \not\equiv O$, $K_p^2 \not\equiv O$, но $K_{p+1}^1 \equiv O, K_{p+1}^2 \equiv O$;

(iii) существенно особой точкой A-резольвенты пучка $\vec{B}$, если $K_k^2 \not\equiv O$ при любом $k \in N$.

Определение 5. Если пучок операторов $\vec{B}$ полиномиально A-ограничен, ∞ – полюс порядка $p \in \{0\} \cup N$ A-резольвенты пучка $\vec{B}$, то будем называть пучок операторов $\vec{B}$ (A, p)-ограниченным.

Пусть пучок $\vec{B}$ полиномиально A-ограничен и выполняется (A). Зафиксируем контур $\gamma = \{\mu \in C : |\mu| = r > a\}$. Тогда семейство операторов:

$$N^t = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma R_\mu^A(\vec{B}) A e^{\mu t} d\mu, t \in R,$$
$$M^t = \frac{1}{2\pi i} \int_\gamma R_\mu^A(\vec{B})(\mu A - B_1) e^{\mu t} d\mu, t \in R \qquad (10)$$

определяют пропагаторы однородного уравнения (9).

Введем условия:

$\sigma^A(\vec{B}) = \sigma_0{}^A(\vec{B}) \bigcap \sigma_1{}^A(\vec{B})$, причем $\sigma_k{}^A(\vec{B}) \neq \varnothing$,
$k = 0,1$ и существует контур $\gamma_0 \subset C$, ограничивающий
область $\Gamma_0 \subset C$, такую, что $\Gamma_0 \bigcap \sigma_0{}^A(\vec{B}) = \sigma_0{}^A(\vec{B})$, (B)
$\bar{\Gamma}_0 \bigcap \sigma_1{}^A(\vec{B}) = \varnothing$,

$$\int_{\gamma_0} R_\mu^A(\vec{B}) d\mu \equiv O. \qquad (A_0)$$

3. Оптимальное управление решениями начально-конечной задачи в модели Буссинеска–Лява

Введем временно обозначение $Cu = y$.

Определение 6. Вектор-функцию $x \in H^2(X) = \{x \in L_2(0,\tau;X) : \ddot{x} \in L_2(0,\tau;X)\}$ назовем сильным решением уравнения (9), если она п. в. на $(0,\tau)$ обращает его в тождество. Сильное решение $x = x(t)$ уравнения (9) назовем сильным решением задачи (7), (9), если оно удовлетворяет (7).

Построим пространство $H^{p+2}(Y) = \{v \in L_2(0,\tau;Y) : v^{(p+2)} \in L_2(0,\tau;Y)\}$ со скалярным произведением $[v,w] = \sum_{q=0}^{p+2} \int_0^\tau \left\langle v^{(q)}, w^{(q)} \right\rangle_Y dt.$

Теорема 3. [5] Пусть пучок операторов $\vec{B}$ (A,p)-ограничен, $p \in \{0\} \cup N$, выполнены условия (A), (B), (A_0). Тогда для любых $x_k^0, x_k^\tau \in X$, $k = 0,1$ и $y \in H^{p+2}(Y)$ существует единственное сильное решение задачи (7) для уравнения (9).

Рассмотрим начально-конечную задачу (7) для линейного неоднородного уравнения соболевского типа (9), где функции x, y, u лежат в гильбертовых пространствах X, Y, U соответственно. Операторы $A, B_1, B_0 \in L(X;Y)$ оператор $C \in L(U;Y)$, пучок операторов $\vec{B}$ (A,p) – ограничен.

Введем в рассмотрение пространство управлений $H^{p+2}(U) = \{u \in L_2(0,\tau;U) : u^{(p+2)} \in L_2(0,\tau;U)\}$ со скалярным произведением $[v,w] = \sum_{q=0}^{p+2} \int_0^\tau \left\langle v^{(q)}, w^{(q)} \right\rangle_U dt.$

Выделим в пространстве $H^{p+2}(U)$ замкнутое и выпуклое подмножество $H_\partial^{p+2}(U)$ – множество допустимых управлений.

Определение 7. Пару $(\hat{x},\hat{u}) \in H^2(U) \times H_\partial^{p+2}(U)$ назовем решением задачи оптимального управления (7), (9), если:

$$J(\hat{x},\hat{u}) = \min_{(x,u) \in H^2(X) \times H_\partial^{p+2}(U)} J(x,u), \qquad (11)$$

где $(x,u) \in H^2(X) \times H_\partial^{p+2}(U)$ удовлетворяют соотношениям (7), (9); вектор-функцию $\hat{u}$ назовем оптимальным управлением решениями задачи (9), (7).

Функционал (11) запишем в виде:

$$J(x,u) = \mu \sum_{q=0}^{2} \int_0^\tau \| x^{(q)} - \tilde{x}^{(q)} \|^2_{H^2(X)} dt + \nu \sum_{q=0}^{p+2} \int_0^\tau \left\langle N_q u^{(q)}, u^{(q)} \right\rangle_U dt, \qquad (12)$$

где $\mu,\nu>0,\ \mu+\nu=1,\ N_q\in L(U)$ $(q=\overline{0,\ p+2})$ – самосопряженные и положительно определенные операторы, $\tilde{x}(t)$ – требуемое состояние системы.

Теорема 4. [6] Пусть пучок операторов $\vec{B}\ \ (A,p)-$ ограничен, $p\in\{0\}\cup N$, выполнены условия $(A),\ (B),\ (A_0)$. Тогда для любых $x_k^0, x_k^\tau\in X$, $k=0,1$ и $y\in H^{p+2}(Y)$ существует единственное оптимальное управление решениями задачи (7) для уравнения (9).

Лемма 3. [4] Пусть выполнено одно из следующих условий:

(i) $\lambda\notin\sigma(\Delta)$;

(ii) $(\lambda\in\sigma(\Delta))\wedge(\lambda\neq\lambda')$;

(iii) $(\lambda\in\sigma(\Delta))\wedge(\lambda=\lambda')\wedge(\lambda\neq\lambda'')$.

Тогда пучок $\vec{B}$ полиномиально A-ограничен.

Если выполнены условия (i) или (iii) леммы 3, то имеет место и условие (A). Если $(\lambda\in\sigma(\Delta))\wedge(\lambda\neq\lambda')$, т.е. выполнено условие (ii) леммы 3, условие (A) не выполняется, и мы исключим его из дальнейших рассмотрений.

Обозначим через $\sigma(\Delta)=\{\lambda_k\}$ множество собственных значений однородной задачи Дирихле для оператора Лапласа в области $\Omega,$ занумерованных по невозрастанию с учетом кратности, а через $\{\varphi_k\}$ – множество соответствующих им собственных функций, ортонормированных в смысле скалярного произведения пространства $L_2(\Omega)$. A-спектр пучка $\vec{B}$ составляют решения $\mu_k^{1,2}$ $(k\in N)$ уравнения:

$$(\lambda-\lambda_k)\mu^2+\alpha(\lambda'-\lambda_k)\mu+\beta(\lambda''-\lambda_k)=0. \qquad (13)$$

Построим проектор P:

$$P=\begin{cases} I, \text{ выполнено условие (i);} \\ I-\sum\limits_{\lambda=\lambda_k}\left\langle\cdot,\varphi_k\right\rangle\varphi_k, \text{ выполнено условие (iii).}\end{cases}$$

Для построения проектора P_{fin} выберем область $\Gamma_0\subset C$, содержащую, например, конечное множество точек $\mu_{k_s}^{1,2}$ A-спектра $\sigma_0^A(\vec{B})$ и такую, что $\partial\Gamma_0\bigcap\sigma_0^A(\vec{B})=\varnothing.$ Как нетрудно видеть, область Γ_0 можно выбрать такой, что $\partial\Gamma_0=\gamma_0$ – контур.

Рассмотрим начально-конечную задачу:

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mu_k^{1,2}\neq\mu_{k_s}^{1,2}} <\varphi_k, x(s,0)-x_1^0(s)>\varphi_k = 0, \quad \lambda\neq\lambda_k \\
&\sum_{\mu_k^{1,2}\neq\mu_{k_s}^{1,2}} <\varphi_k, x_t(s,0)-x_0^0(s)>\varphi_k = 0, \quad \lambda\neq\lambda_k \\
&\sum_{\mu_k^{1,2}=\mu_{k_s}^{1,2}} <\varphi_k, x(s,\tau)-x_1^\tau(s)>\varphi_k = 0, \quad \lambda\neq\lambda_k \\
&\sum_{\mu_k^{1,2}=\mu_{k_s}^{1,2}} <\varphi_k, x_t(s,\tau)-x_0^\tau(s)>\varphi_k = 0, \quad \lambda\neq\lambda_k
\end{aligned} \tag{14}$$

для уравнения (5) с граничными условиями (6).

Теорема 5. [6] При любых $\alpha,\beta\in R\setminus\{0\}$ и $\lambda\in R$ таком, что выполнено условие либо (i), либо (iii) леммы 3, и любых $\tau\in R_+$, $x_k^0, x_k^\tau\in X$, $k=0,1$, существует единственное решение задачи оптимального управления $(\hat{x},\hat{u})$ для уравнения Буссинеска–Лява (5) с условиями (6), (14), минимизирующее функционал (12).

Библиографический список

1. Chen G. Existence and nonexistence of global solutions for the generalized IMBq equation / G. Chen, Sh. Wang // Nonlinear Analysis TMA. 1999. № 36. Pp. 961–980.

2. Ленг, С. Введение в теорию дифференцируемых многообразий / С. Ленг; пер. с англ. И.М. Дектярев. – Волгоград: Платон, 1996.

3. Замышляева, А.А. Линейные уравнения соболевского типа высокого порядка / А.А. Замышляева. – Челябинск: Изд. центр ЮУрГУ, 2012.

4. Замышляева, А.А. Оптимальное управление решениями задачи Шоуолтера–Сидорова–Дирихле для уравнения Буссинеска–Лява / А.А. Замышляева, О.Н. Цыпленкова // Дифференциальные уравнения. – 2013. – Т. 49, № 11. – С. 1390–1398.

5. Замышляева, А.А. Оптимальное управление решениями начально-конечной задачи для уравнения Буссинеска–Лява / А.А. Замышляева, О.Н. Цыпленкова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 5 (264). – Вып. 11. – С. 13–24.

6. Цыпленкова, О.Н. Численное решение задачи оптимального управления в модели Буссинеска – Лява / О.Н. Цыпленкова // Измерения: состояние, перспективы развития: тез.докл. междунар. науч.-практ. конф., г. Челябинск, 25–27 сент. 2012 г. В 2 т. – Челябинск, 2012. – Т. 1. – С. 245–246.

7. Замышляева, А.А. Фазовое пространство полулинейного уравнения Буссинеска / А.А. Замышляева, Е.В. Бычков // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 18 (277). – Вып. 12. – С. 13–19.

8. Бычков, Е.В. Численное решение задачи Шоуолтера–Сидорова–Дирихле для уравнения Буссинеска–Лява / Е.В. Бычков // Измерения: состояние, перспективы развития: тез.докл. междунар. науч.-практ. конф., г. Челябинск, 25–27 сент. 2012 г. В 2 т. – Челябинск, 2012. – Т. 1. – С. 60–62.

К содержанию

УДК 519.63+532.529.5

О НЕКОТОРЫХ МОДИФИКАЦИЯХ МЕТОДА КРУПНЫХ ЧАСТИЦ НА ПРИМЕРЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕЧЕНИЙ ГАЗОВЗВЕСЕЙ

Ю.М. Ковалев, Е.Е. Пигасов

В работе приводятся новая модификации метода крупных частиц в приложении к исследованиям течений газовзвесей. Показано, что предложенная модификация позволяют проводить расчеты поведения ударных волн в газовзвесях без введения в явном виде искусственной вязкости, что позволяет избежать искажения физической картины течения газовзвеси, связанной с наличием осцилляций.

Ключевые слова: численный метод, математическая модель, газовзвесь, законы сохранения, ударные волны, число Куранта.

Введение

Появление новых математических моделей механики сплошных сред, с одной стороны, связано с отсутствием в природе чистых веществ, что требует активного развития математических моделей многокомпонентных сред. С другой стороны, развитие вычислительной техники позволяет получать численные решения для новых все более сложных математических моделей многокомпонентных сред. Несмотря на наличие большого числа вычислительных пакетов и увеличение быстродействия вычислительной техники, разработка эффективных численных методов для решения задач в рамках новых математических моделей механики сплошных сред в настоящее время является актуальной задачей. Успешное решение многочисленных задач газовой динамики и аэродинамики методом крупным частиц [1] и его модификациями [2] позволяет надеяться на то, что идеология метода может быть применена и для решения задач распространения ударных волн в газовзвесях. Поэтому целью данной работы является разработка модификации метода крупных частиц, которая позволит эффективно решать проблемы, связанные с распространением ударных волн в газовзвесях.

1. Математическая модель газовзвеси

Рассмотрим одномерный плоский случай математической модели течения газа с твердыми частицами (аэровзвесь), которая описывается системой уравнений сохранения [3].

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t}+\frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial x}=0,\ \ \frac{\partial \rho_2}{\partial t}+\frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial x}=0,\ \ \frac{\partial n}{\partial t}+\frac{\partial n v_2}{\partial x}=0, \tag{1.1}$$

$$\rho_1 \frac{d_1 v_1}{dt}=-\alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x}-nf,\ \ \rho_2 \frac{d_2 v_2}{dt}=-\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x}+nf, \tag{1.2}$$

$$\rho_1 \frac{d_1 e_1}{dt} = \frac{p\alpha_1}{(\rho_1^\circ)} \frac{d_1 \rho_1^\circ}{dt} + nf(v_1 - v_2) - nq, \tag{1.3}$$

$$\rho_2 \frac{d_2 e_2}{dt} = \frac{p\alpha_2}{(\rho_2^\circ)} \frac{d_2 \rho_2^\circ}{dt} + nq \tag{1.4}$$

$$\begin{gathered} p = p_1(\rho_1^\circ, T_1) = p_2(\rho_2^\circ, T_2), \quad e_1 = e_1(\rho_1^\circ, T_1), \quad e_2 = e_2(\rho_2^\circ, T_2) \\ \rho_1 = \rho_1^\circ \alpha_1, \ \rho_2 = \rho_2^\circ \alpha_2, \ \alpha_1 + \alpha_2 = 1, \\ E_i = e_i + \frac{v_i^2}{2} (i = 1, 2). \end{gathered} \tag{1.5}$$

$$f = \frac{\pi d^2 \rho_1^\circ C_d (v_1 - v_2)|v_1 - v_2|}{8}, \qquad q = \pi d \lambda_1 Nu(T_1 - T_2). \tag{1.6}$$

Система уравнений (1.1)–(1.6) замыкается уравнениями состояния газовой фазы и частиц:

$$e_1 = c_{v1}(T_1 - T_0) + C_0, \quad e_1 = \frac{p}{(k-1)\rho_1^\circ}, \quad e_2 = c_2(T_2 - T_0). \tag{1.7}$$

Здесь индексы 1, 2 относятся соответственно к газу и частицам; $\rho_i^\circ, \alpha_i (i = 1, 2)$ – 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; c_{v1} и c_2 – теплоемкости фаз: C_0 – постоянная для нормирования внутренней энергии газовой фазы: 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 соответственно: k – показатель адиабаты Пуассона; d – диаметр частиц.

Уравнения (1.1) – уравнения неразрывности газа и частиц и уравнение сохранения числа частиц в единице объема смеси; (1.2) – уравнения импульса газа и частиц; (1.3) и (1.4) – уравнения сохранения внутренней энергии газа и частиц соответственно. (1.6) – уравнения, определяющие члены теплового *(q)* и силового (*f*) взаимодействия между фазами: (1.7) – уравнения состояния фаз. В данной работе не рассматриваются более сложные уравнения состояния [4].

Для того чтобы воспользоваться идеологией метода крупных частиц, необходимо получить уравнения кинетической энергии 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:

$$\frac{\partial \rho_1 \frac{{v_1}^2}{2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1 \frac{v_1^2}{2}}{\partial x} = -\alpha_1 v_1 \frac{\partial p}{\partial x} - nf v_1, \tag{1.8}$$

$$\frac{\partial \rho_2 \frac{{v_2}^2}{2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2 \frac{v_2^2}{2}}{\partial x} = -\alpha_2 v_2 \frac{\partial p}{\partial x} + nf v_2. \quad (1.9)$$

С учетом равенств (1.1) уравнения сохранения внутренней энергии газа (1.3) и частиц (1.4) в дивергентном виде запишутся следующим образом:

$$\frac{\partial \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 e_1 v_1}{\partial x} = \frac{p\alpha_1}{\left(\overset{\circ}{\rho_1}\right)} \frac{d_1 \overset{\circ}{\rho_1}}{dt} + nf(v_1 - v_2) - nq, \quad (1.10)$$

$$\frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 v_2}{\partial x} = \frac{p\alpha_2}{\left(\overset{\circ}{\rho_2}\right)} \frac{d_2 \overset{\circ}{\rho_2}}{dt} + nq. \quad (1.11)$$

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 (1.10) и (1.11) соответственно, получим:

$$\frac{\partial \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 e_1 v_1}{\partial x} = -p\left(\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1 v_1}{\partial x}\right) + nf(v_1 - v_2) - nq, \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 v_2}{\partial x} = -p\left(\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2 v_2}{\partial x}\right) + nq, \quad (1.13)$$

В случае несжимаемости конденсированной фазы уравнения сохранения внутренней энергии газовой (1.3) и конденсированной (1.4) фаз легко преобразуются к виду:

$$\frac{\partial \rho_1 e_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 e_1 v_1}{\partial x} = -p\left(\frac{\partial \alpha_1 v_1}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_2 v_2}{\partial x}\right) + nf(v_1 - v_2) - nq, \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 v_2}{\partial x} = nq, \quad (1.15)$$

Для получения уравнение сохранения полной энергии смеси просуммируем левые и правые части уравнений (1.8), (1.9), (1.14), (1.15). В результате получим уравнение сохранения полной энергии смеси в виде:

$$\frac{\partial(\rho_1 E_1 + \rho_2 E_2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[\rho_1 v_1 E_1 + \rho_2 v_2 E_2 + (\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2)p] = 0. \quad (1.16)$$

Система уравнений (1.1), (1.2), (1.5) – (1.7), (1.14) – (1.16) представляет собой замкнутую систему уравнений для описания течений газовзвесей, инвариантную относительно преобразования Галилея.

2. Некоторые модификации метода крупных частиц для расчета течений газовзвеси

В соответствии с идеологией метода крупных частиц [1] систему законов сохранения газовзвеси (1.1), (1.2), (1.5)–(1.7), (1.14)–(1.16) на эйлеровом этапе можно представить следующим образом:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \tag{2.1}$$

$$\rho_1 \frac{\partial v_1}{\partial t} = -\alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x} - nf, \quad \rho_2 \frac{\partial v_2}{\partial t} = -\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x} + nf, \tag{2.2}$$

$$\rho_1 \frac{\partial e_1}{\partial t} = -p\left(\frac{\partial \alpha_1 v_1}{\partial x} + \frac{\partial \alpha_2 v_2}{\partial x}\right) + nf(v_1 - v_2) - nq, \tag{2.3}$$

$$\rho_2 \frac{\partial e_2}{\partial t} = nq, \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial(\rho_1 E_1 + \rho_2 E_2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[(\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2)p] = 0. \tag{2.5}$$

Учитывая несжимаемость конденсированной фазы ($\rho_2^\circ = const$), запишем уравнения (2.1), (2.3), (2.5) в более удобном для представления на эйлеровом этапе виде:

$$\alpha_1 \frac{\partial \rho_1^\circ}{\partial t} = 0, \quad \rho_2^\circ \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \qquad \rho_1^\circ \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = 0 \tag{2.6}$$

$$\rho_1 \frac{\partial e_1}{\partial t} = -p\left(\alpha_1 \frac{\partial v_1}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial v_2}{\partial x}\right) + nf(v_1 - v_2) - nq, \tag{2.7}$$

$$\rho_1 \frac{\partial E_1}{\partial t} + \rho_2 \frac{\partial E_2}{\partial t} + \alpha_1 \frac{\partial (v_1 p)}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial (v_2 p)}{\partial x} = 0. \tag{2.8}$$

Подставляя уравнение состояния газовой фазы (1.7) в уравнение (2.7) получим следующее базовое соотношение для определения давления на эйлеровом этапе:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{(k-1)}{\alpha_1} p\left(\alpha_1 \frac{\partial v_1}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial v_2}{\partial x}\right) + \frac{(k-1)}{\alpha_1}(nf(v_1 - v_2) - nq. \tag{2.9}$$

Используя явные разностные представления для равенства (2.9), легко получить выражения для определения предварительных значений давления на новом $m+1$ временном слое на границах $i-1/2$ и $i+1/2$ для ячеек $i-1, i$ и $i+1$:

$$\tilde{p}_{i+1/2}^{m+1} = \frac{p_{i+1}^m + p_i^m}{2}\Big(1 - \frac{(k-1)}{\alpha_{1,i+1/2}^m}\big(\alpha_{1,i+1/2}^m\big(v_{1,i+1}^m - v_{1,i}^m\big) + \\ + \alpha_{2,i+1/2}^m\big(v_{2,i+1}^m - v_{2,i}^m\big)\big)\frac{\Delta t}{\Delta x}\Big) - \frac{(k-1)}{\alpha_{1,i+1/2}^m}\big(n_{i+1/2}^m q_{i+1/2}^m\big)\Delta t + \\ + \frac{(k-1)}{\alpha_{1,i+1/2}^n}\big(n_{i+1/2}^m f_{i+1/2}^m\big(v_{1,i+1/2}^m - v_{2,i+1/2}^m\big)\Delta t\big). \tag{2.10}$$

Здесь Δt – шаг по времени, Δx – шаг по пространству. Полученные значения давления используются для определения промежуточных величин скоростей на эйлеровом этапе:

$$\tilde{v}_{1,i}^{m+1} = v_{1,i}^{m} - \frac{1}{\overset{\circ}{\rho}_{1,i}^{m}}\left(\tilde{p}_{i+\frac{1}{2}}^{m+1} - \tilde{p}_{i-\frac{1}{2}}^{m+1}\right)\frac{\Delta t}{\Delta x} - \frac{n_i^m}{\rho_{1,i}^m} f_i^m \Delta t, \qquad (2.11)$$

$$\tilde{v}_{2,i}^{m+1} = v_{2,i}^{m} - \frac{1}{\overset{\circ}{\rho}_{2,i}^{m}}\left(\tilde{p}_{i+\frac{1}{2}}^{m+1} - \tilde{p}_{i-\frac{1}{2}}^{m+1}\right)\frac{\Delta t}{\Delta x} + \frac{n_i^m}{\rho_{2,i}^m} f_i^m \Delta t. \qquad (2.12)$$

Для получения промежуточных значений скоростей газовой и конденсированной фаз можно использовать еще одну модификацию эйлерова этапа метода крупных частиц, связанную с частично неявной аппроксимацией силы межфазного взаимодействия. Если ввести обозначения:

$$\Delta p_{1,i}^{m+1} = \frac{1}{\overset{\circ}{\rho}_{1,i}^{m}}\left(\tilde{p}_{i+\frac{1}{2}}^{m+1} - \tilde{p}_{i-\frac{1}{2}}^{m+1}\right)\frac{\Delta t}{\Delta x};$$

$$\Delta p_{2,i}^{m+1} = \frac{1}{\overset{\circ}{\rho}_{2,i}^{m}}\left(\tilde{p}_{i+\frac{1}{2}}^{m+1} - \tilde{p}_{i-\frac{1}{2}}^{m+1}\right)\frac{\Delta t}{\Delta x};$$

$$\Delta f_{1,i}^{m} = -\frac{n_i^m}{\rho_{1,i}^m}\left(\frac{\pi d^2 \overset{\circ}{\rho_1} C_d |v_1 - v_2|}{8}\right)_i^m;$$

$$\Delta f_{2,i}^{m} = -\frac{n_i^m}{\rho_{2,i}^m}\left(\frac{\pi d^2 \overset{\circ}{\rho_1} C_d |v_1 - v_2|}{8}\right)_i^m,$$

то уравнения (2.11) и (2.12) можно будет записать следующим образом

$$\tilde{v}_{1,i}^{m+1} = v_{1,i}^{m} - \Delta p_{1,i}^{m+1} + \Delta f_{1,i}^{m}\left(\tilde{v}_{1,i}^{m+1} - v_{2,i}^{m}\right),$$

$$\tilde{v}_{2,i}^{m+1} = v_{2,i}^{m} - \Delta p_{2,i}^{m+1} - \Delta f_{2,i}^{m}\left(v_{1,i}^{m} - \tilde{v}_{2,i}^{m+1}\right).$$

Из полученных уравнений промежуточные значения скоростей легко определяются в явном виде:

$$\tilde{v}_{1,i}^{m+1} = \left(v_{1,i}^{m} - \Delta p_{1,i}^{m+1} - \Delta f_{1,i}^{m} v_{2,i}^{m}\right)/\left(1 - \Delta f_{1,i}^{m}\right), \qquad (2.13)$$

$$\tilde{v}_{2,i}^{m+1} = \frac{\left(v_{2,i}^{m} - \Delta p_{2,i}^{m+1} - \Delta f_{2,i}^{m} v_{1,i}^{m}\right)}{\left(1 - \Delta f_{2,i}^{m}\right)}. \qquad (2.14)$$

Более сложная модификация метода крупных частиц в приложении к течениям газовзвесей может быть реализована в случае неявной аппроксимации разности скоростей газа и конденсированной фазы в выражении для силы межфазного взаимодействия. Подставляя в равенства (2.11) и (2.12) выражение для силы межфазного взаимодействия, получим:

$$\tilde{v}_{1,i}^{m+1} = v_{1,i}^{m} - \Delta p_{1,i}^{m+1} + \Delta f_{1,i}^{m}\left(\tilde{v}_{1,i}^{m+1} - \tilde{v}_{2,i}^{m+1}\right), \quad (2.15)$$

$$\tilde{v}_{2,i}^{m+1} = v_{2,i}^{m} - \Delta p_{2,i}^{m+1} - \Delta f_{2,i}^{m}\left(\tilde{v}_{1,i}^{m+1} - \tilde{v}_{2,i}^{m+1}\right). \quad (2.16)$$

Вычитая левые и правые части равенства (2.16) из левых и правых частей равенства (2.15) соответственно, получим уравнение для определения промежуточных значений разности скоростей газовой и конденсированной фаз:

$$\tilde{v}_{1,i}^{m+1} - \tilde{v}_{2,i}^{m+1} = v_{1,i}^{m} - v_{2,i}^{m} - \left(\Delta p_{1,i}^{m+1} - \Delta p_{2,i}^{m+1}\right) + \\ + \left(\Delta f_{1,i}^{m} - \Delta f_{2,i}^{m}\right)\left(\tilde{v}_{1,i}^{m+1} - \tilde{v}_{2,i}^{m+1}\right).$$

Окончательное выражение для определения разности промежуточных значений скоростей имеет следующий вид:

$$\tilde{v}_{1,i}^{m+1} - \tilde{v}_{2,i}^{m+1} = \frac{\left(v_{1,i}^{m} - v_{2,i}^{m}\right) - \left(\Delta p_{1,i}^{m+1} - \Delta p_{2,i}^{m+1}\right)}{\left(1 - \left(\Delta f_{1,i}^{m} - \Delta f_{2,i}^{m}\right)\right)}. \quad (2.17)$$

Подставляя выражение (2.17) в равенства (2.15) и (2.16), получим значения скоростей фаз на эйлеровом этапе метода крупных частиц.

Промежуточные значения скорости конденсированной и газовой фаз на границах ячеек определяются как средние арифметические от их значений в двух соседних ячейках:

$$\tilde{v}_{1,i+1/2}^{m+1} = \left(\tilde{v}_{1,i}^{m+1} + \tilde{v}_{1,i+1}^{m+1}\right)/2, \ \tilde{v}_{2,i+1/2}^{m+1} = \left(\tilde{v}_{2,i}^{m+1} + \tilde{v}_{2,i+1}^{m+1}\right)/2. \quad (2.18)$$

Теперь можно определить промежуточные значения внутренней энергии конденсированной фазы:

$$\tilde{e}_{2,i}^{m+1} = e_{2,i}^{m} + \frac{1}{\rho_{2,i}^{m}} n_i^m q_i^m \Delta t, \quad (2.19)$$

и полной энергии смеси:

$$\rho_{1,i}^{m}\tilde{E}_{1,i}^{m+1} + \rho_{2,i}^{m}\tilde{E}_{2,i}^{m+1} = \rho_{1,i}^{m}E_{1,i}^{m} + \rho_{2,i}^{m}E_{2,i}^{m} - \\ - \left(\alpha_{1,i+1/2}^{n}\tilde{v}_{1,i+1/2}^{m+1}\,\tilde{p}_{i+1/2}^{m+1} - \alpha_{1,i-1/2}^{n}\tilde{v}_{1,i-1/2}^{m+1}\,\tilde{p}_{i-1/2}^{m+1}\right)\frac{\Delta t}{\Delta x} - \\ - \left(\alpha_{2,i+\frac{1}{2}}^{n}\,\tilde{v}_{2,i+\frac{1}{2}}^{m+1}\,\tilde{p}_{i+\frac{1}{2}}^{m+1} - \alpha_{2,i-\frac{1}{2}}^{n}\tilde{v}_{2,i-\frac{1}{2}}^{m+1}\,\tilde{p}_{i-\frac{1}{2}}^{m+1}\right)\frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (2.20)$$

На этапе Лагранжа и заключительном этапе метода крупных частиц для каждой фазы были использованы формулы, приведенные в монографии О.М. Белоцерковского и Ю.М. Давыдова [1].

С целью демонстрации полученного метода была решена задача о взаимодействии ударной волны с облаком конденсированных частиц. Результаты расчетов давления и энтропийной функции газа приведены на рис. 1 и рис. 2, соответственно, в моменты времени, когда положение ударной волны определялось координатами x = 0,4585 (кривая красного цвета), x = 1,106 (кривая синего цвета), x = 1,5295 (кривая зеленого цвета).

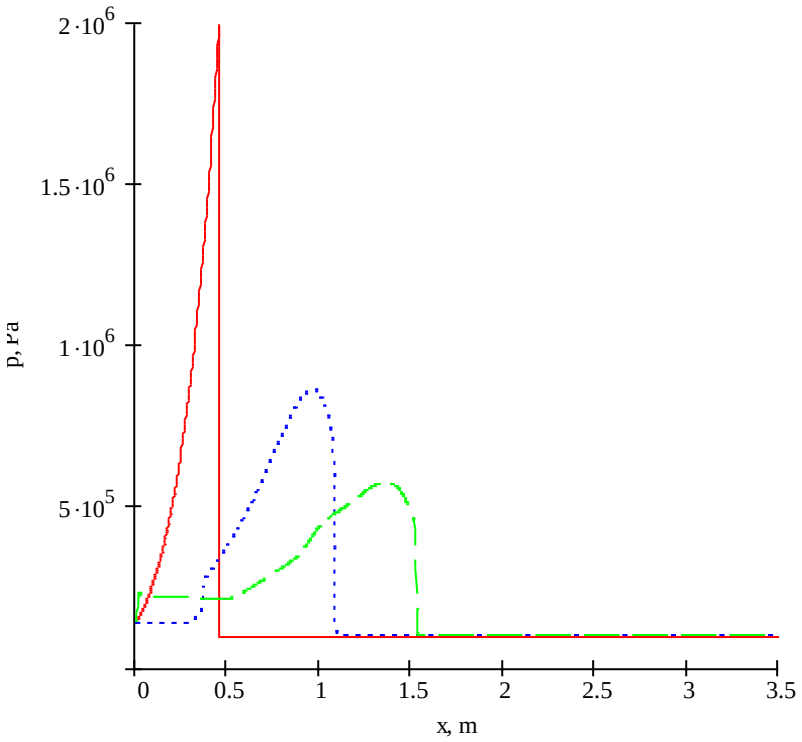


Рис. 1. Распределение давления в расчетной области в разные моменты времени

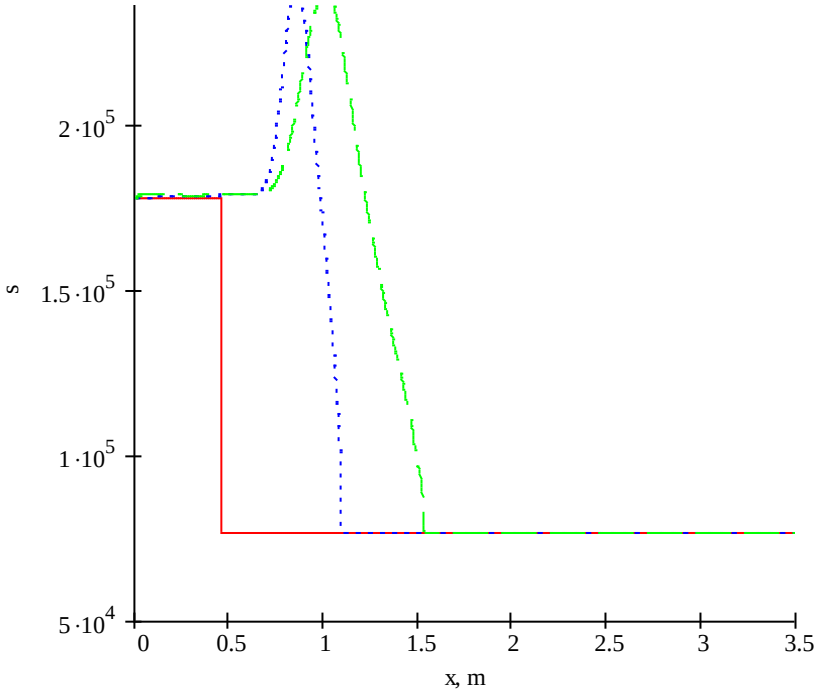


Рис. 2. Распределение энтропийной функции в расчетной области
в разные моменты времени

Заключение

1. Тестирование предложенной модификации метода крупных частиц проводилось на решении задачи о распространении ударных волн в облаке газовзвеси [3, 5]...

2. Было показано, что применение на этапе Эйлера предложенной авторами модификации более эффективно, чем применение метода крупных частиц [1] при решении задачи о распространении ударных волн в облаке газовзвеси [3, 5].

3. Применение на этапе Эйлера предложенной авторами модификации позволяет проводить расчеты задач [3, 5] при больших значениях числа Куранта.

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.Белоцерковский, О.М. Метод крупных частиц в газовой динамике / О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов. – М.: Наука, 1982. – 392 с.

2. Гришин, Ю.А. Новые схемы метода крупных частиц и использование их для оптимизации газовоздушных трактов двигателей / Ю.А. Гришин // Математическое моделирование. – 2002. – Т. 14. – № 8. – С. 51–55.

3. Ковалев, Ю.М. Математическая модель газовзвеси с химическими превращениями в приближении парных взаимодействий / Ю.М. Ковалев, Е.Е. Пигасов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2014. – Т. 7. – № 3. – С. 40–49.

4. Ковалев, Ю.М. Уравнения состояния и температуры ударного сжатия кристаллических ВВ / Ю.М .Ковалев // Физика горения и взрыва. – 1984. – Т. 20. – № 2. – С. 102–107.

5. 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.

К содержанию

УДК 544.45

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРОВ ВОДЫ НА ГОРЕНИЕ ОКИСИ УГЛЕРОДА ЗА УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

Ю.М. Ковалев, Е.Е. Пигасов

В данной работе была решена модельная задача о влиянии паров воды на величину адиабатического периода индукции реакции горения окиси углерода. Было показано, что пары воды могут значительно сократить адиабатический период индукции реакции горения окиси углерода, что значительно усложняет выбор композиционных материалов для объектов, движущихся со сверхзвуковыми скоростями.

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

Введение

При конструировании современных образцов авиационной и ракетной техники все чаще применяются новые образцы композиционных материалов. Развитие математического моделирования и вычислительной техники позволяет проводить отбор композиционных материалов с заданными свойствами. Увеличение скорости летательных аппаратов и ракетной техники приводит к значительному увеличению температуры поверхности композиционных материалов и выделению газофазных продуктов, которые при определенных условиях могут воспламеняться [1].

Целью настоящей работы было математическое моделирование влияния паров воды на воспламенение окиси углерода за ударными волнами [2] при больших числах Маха.

1. Постановка задачи

Рассмотрим адиабатический реактор. Смесь в нем будем считать однородной сплошной средой, не имеющей температурных градиентов, а так же тепло- и массообмена с окружающей средой. Плотность и теплофизические свойства среды в ходе процесса неизменны: $\rho = const$; теплоемкость C_p, коэффициент теплопроводности λ, и коэффициент диффузии D постоянны и равны своим средним значениям в рассматриваемом диапазоне температур. Тепло- и массообмен имеет чисто кондуктивный характер.

Для нахождения параметров смеси в ходе процесса горения нам необходимо решить систему, состоящую из уравнения *теплового балланса:*

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda\Delta T + Qz_0\varphi(\eta)e^{-\frac{E}{RT}} \qquad (1.1)$$

И для каждого рассматриваемого реагента уравнение *материального балланса:*

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D\Delta\eta + z_0\varphi(\eta)e^{-\frac{E}{RT}} \quad (1.2)$$

Здесь Q – тепловой эффект реакции; Δ – оператор Лапласа; E – энергия активации; R – универсальная газовая постоянная;

$$z_0 = k_0 C_0^{m-1} \prod_{j=1}^{n} (\frac{\nu_j}{\nu})^{\gamma_j}$$

где k_0 – предэкспонент, C_0 – начальная концентрация выбранного вещества, $m = \sum_{j=1}^{n} \gamma_j$ – порядок реакции, ν_j – стехиометрический коэффициент -го вещества, γ_j – порядок реакции по этому веществу,

$$\varphi(\eta) = \begin{cases} 1 & -\text{для реакций "0 – го" порядка;} \\ (1-\eta)^m & -\text{для простых реакций;} \\ (1-\eta)^m(\eta+\eta_0)^{m_1} & -\text{для автокаталитических реакций.} \end{cases}$$

Граничные условия заданы следующим образом:

$$x = 0, \quad \frac{dT}{dx} = \frac{d\eta}{dx} = 0; \quad x = r, \quad \frac{dT}{dx} = \frac{d\eta}{dx} = 0 \quad (1.3)$$

Начальные условия:

$$t = 0, \quad T(x) = T_H, \quad \eta(x) = 0, \quad 0 \le x \le r \quad (1.4)$$

Здесь r – расстояние воль оси x до границы системы (для плоского реактора это полуширина, для цилиндра и сферы – радиус), T_H – начальная температура смеси в реакторе.

Принимая во внимание отсутствие градиентов концентрации и температуры в начальный момент времени, с учетом граничных условий, они будут отсутствовать на всем протяжении процесса. Тогда в уравнениях (1.1), (1.2) пространственные производные равны нулю:

$$c\rho\frac{dT}{dt} = Qz_0\varphi(\eta)e^{-\frac{E}{RT}} \quad (1.5)$$

$$\frac{d\eta}{dt} = z_0\varphi(\eta)e^{-\frac{E}{RT}} \quad (1.6)$$

Аналогично работам [2-4] для определения адиабатического периода индукции воспламенения окиси углерода в модельных расчетах применена кинетика [5], рассматривающая 25 реагентов:

$$H_2, O_2, N_2, Ar, H_2O, CO, CO_2, CH_4, C_2H_6, H, O, OH, HO_2,$$
$$H_2O_2, CH, CH_2, CH_3, C_2H, C_2H_2, C_2H_3, C_2H_4, C_2H_5, HCO, CH_2O, CH_3O$$

Набор рассматриваемых реакций приведен в таблице и выглядит следующим образом:

Таблица

Набор химических реакций

№	Реакция	Скорость реакции					
		прямая			обратная		
		$\lg A$	n	E_a	$\lg A$	n	E_a
1	$H + O_2 \rightarrow O + OH$	14,27	0	16,79	13,17	0	0,68
2	$H_3 + O \rightarrow H + OH$	10,26	1	8,90	9,92	1	6,95
3	$H_2O + O \rightarrow OH + OH$	13,53	0	18,35	12,50	0	1,10
4	$H_2O + H \rightarrow H_2 + OH$	13,98	0	20,30	13,34	0	5,15
5	$H_2O_2 + OH \rightarrow H_2O + HO_2$	13,00	0	1,80	13,45	0	32,79
6	$H_2O + M \rightarrow H + OH + M$	16,34	0	105,00	23,15	-2	0
7	$H + O_2 + M \rightarrow HO_2 + M$	15,22	0	-1,00	15,36	0	45,90
8	$HO_2 + O \rightarrow OH + O_2$	13,70	0	1,00	13,81	0	56,61
9	$HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	14,40	0	1,90	13,08	0	40,10
10	$HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$	13,40	0	0,70	13,74	0	57,80
11	$HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$	13,70	0	1,00	14,80	0	73,86
12	$H_2O_2 + O_2 \rightarrow HO_2 + HO_2$	13,60	0	42,64	13,00	0	1,00
13	$H_2O_2 + M \rightarrow OH + OH + M$	17,08	0	45,50	14,96	0	-5,07
14	$H_2O_2 + H \rightarrow HO_2 + H_2$	12,23	0	3,75	11,86	0	18,70
15	$O + H + M \rightarrow OH + M$	16,00	0	0	19,90	-1	103,72
16	$O_2 + M \rightarrow O + O + M$	15,71	0	115,00	15,67	-0,28	0
17	$H_2 + M \rightarrow H + H + M$	14,34	0	96,00	15,48	0	0
18	$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$	7,11	1,3	-0,77	9,15	1,3	21,58
19	$CO + HO_2 \rightarrow CO_2 + OH$	14,18	0	23,65	15,23	0	85,50
20	$CO + O + M \rightarrow CO_2 + M$	15,77	0	4,10	21,74	-1	131,78
21	$CO_2 + O \rightarrow CO + O_2$	12,44	0	43,83	11,50	0	37,60
22	$HCO + OH \rightarrow CO + H_2O$	14,00	0	0	15,45	0	105,15
23	$HCO + M \rightarrow H + CO + M$	14,16	0	19,00	11,70	1	1,55
24	$HCO + H \rightarrow CO + H_2$	14,30	0	0	15,12	0	90,00
25	$HCO + O \rightarrow CO + OH$	14,00	0	0	14,46	0	87,90
26	$HCO + HO_2 \rightarrow CH_2O + O_2$	14,00	0	3,00	15,56	0	46,04
27	$HCO + O_2 \rightarrow CO + HO_2$	12,60	0	7,00	12,95	0	39,29
28	$CH_2O + M \rightarrow HCO + H + M$	16,52	0	81,00	11,15	1	-11,77
29	$CH_2O + OH \rightarrow HCO + H_2O$	12,88	0	0,17	12,41	0	29,99
30	$CH_2O + H \rightarrow HCO + H_2$	14,52	0	10,50	13,42	0	25,17
31	$CH_2O + O \rightarrow HCO + OH$	13,70	0	4,60	12,24	0	17,17
32	$CH_2O + HO_2 \rightarrow HCO + H_2O_2$	12,00	0	8,00	11,04	0	6,59
33	$CH_4 + M \rightarrow CH_3 + H + M$	17,15	0	88,40	11,45	1	-19,52
34	$CH_4 + H \rightarrow CH_3 + H_2$	14,10	0	11,90	12,08	0	11,43
35	$CH_4 + OH \rightarrow CH_3 + H_2O$	3,54	3,08	2,00	2,76	3,08	16,68
36	$CH_4 + O \rightarrow CH_3 + OH$	13,20	0	9,20	11,43	0	6,64
37	$CH_4 + HO_2 \rightarrow CH_3 + H_2O_2$	13,30	0	18,00	12,02	0	1,45
38	$CH_3 + HO_2 \rightarrow CH_3O + OH$	13,51	0	0	10,00	0	0

Окончание табл.

39	$CH_3 + OH \rightarrow CH_2O + H_2$	12,60	0	0	14,08	0	71,73
40	$CH_3 + O \rightarrow CH_2O + H$	14,11	0	2,00	15,23	0	71,63
41	$CH_3 + O_2 \rightarrow CH_3O + O$	13,68	0	29,00	14,48	0	0,73
42	$CH_2O + CH_3 \rightarrow CH_4 + HCO$	10,00	0,5	6	10,32	0,5	21,14
43	$CH_3 + HCO \rightarrow CH_4 + CO$	11,48	0,5	0	13,71	0,5	90,47
44	$CH_3 + HO_2 \rightarrow CH_4 + O_2$	12,00	0	0,40	13,88	0	58,59
45	$CH_3 + M \rightarrow CH_2O + H + M$	13,70	0	21,00	9,00	1	-2,56
46	$CH_3O + O_2 \rightarrow CH_2O + HO_2$	12,00	0	6,00	11,11	0	32,17
47	$C_2H_6 \rightarrow CH_3 + CH_3$	19,35	-1	88,31	12,95	0	0
48	$C_2H_6 + CH_3 \rightarrow C_2H_5 + CH_4$	-0,26	4	8,28	10,48	0	12,50
49	$C_2H_6 + H \rightarrow C_2H_5 + H_2$	2,73	3,5	5,20	2,99	3,5	27,32
50	$C_2H_6 + OH \rightarrow C_2H_5 + H_2O$	13,05	0	2,45	13,30	0	24,57
51	$C_2H_6 + O \rightarrow C_2H_5 + OH$	13,40	0	6,36	12,66	0	11,23
52	$C_2H_5 + M \rightarrow C_2H_4 + H + M$	15,30	0	30,00	10,62	0	-11,03
53	$C_2H_5 + O_2 \rightarrow C_2H_4 + HO_2$	12,00	0	5,00	11,12	0	13,70
54	$C_2H_4 + C_2H_4 \rightarrow C_2H_5 + C_2H_3$	14,70	0	64,70	14,17	0	-2,61
55	$C_2H_4 + M \rightarrow C_2H_2 + H_2 + M$	16,97	0	77,20	12,66	1	36,52
56	$C_2H_4 + M \rightarrow C_2H_3 + H + M$	18,80	0	108,72	17,30	0	0
57	$C_2H_4 + O \rightarrow CH_3 + HCO$	12,52	0	1,13	11,20	0	31,18
58	$C_2H_4 + O \rightarrow CH_2O + CH_2$	13,40	0	5,00	12,48	0	15,68
59	$C_2H_4 + H \rightarrow C_2H_3 + H_2$	7,18	2	6,00	6,24	2	5,11
60	$C_2H_4 + OH \rightarrow C_2H_3 + H_2O$	12,68	0	1,23	12,08	0	14,00
61	$C_2H_4 + OH \rightarrow CH_3 + CH_2O$	12,30	0	0,96	11,78	0	16,48
62	$C_2H_3 + M \rightarrow C_2H_2 + H + M$	14,90	0	31,50	11,09	1	-10,36
63	$C_2H_3 + O_2 \rightarrow C_2H_2 + HO_2$	12,00	0	10,00	12,00	0	17,87
64	$C_2H_3 + M \rightarrow C_2H + H + M$	14,00	0	114,00	9,04	1	0,77
65	$C_2H_2 + O_2 \rightarrow HCO + HCO$	12,60	0	28,00	11,00	0	63,65
66	$C_2H_2 + H \rightarrow C_2H + H_2$	14,30	0	19,00	13,62	0	13,21
67	$C_2H_3 + OH \rightarrow C_2H + H_2O$	12,78	0	7,00	12,73	0	16,36
68	$C_2H_2 + OH \rightarrow CH_3 + CO$	12,08	0	0,50	12,41	0	58,00
69	$C_2H_2 + O \rightarrow C_2H + OH$	15,51	-0,6	17,00	14,47	-0,6	0,91
70	$C_2H_2 + O \rightarrow CH_2 + CO$	13,83	0	4,00	13,10	0	54,67
71	$C_2H + O_2 \rightarrow HCO + CO$	13,00	0	7,00	12,93	0	138,40
72	$C_2H + O \rightarrow CO + CH$	13,70	0	0	13,50	0	59,43
73	$CH_2 + O_2 \rightarrow HCO + OH$	14,00	0	3,70	13,61	0	76,58
74	$CH_2 + O \rightarrow CH + OH$	11,28	0,68	25,00	10,77	0,68	25,93
75	$CH_2 + H \rightarrow CH + H_2$	11,43	0,67	25,70	11,28	0,67	28,72
76	$CH_2 + OH \rightarrow CH + H_2O$	11,43	0,67	25,70	11,91	0,67	43,88
77	$CH + O_2 \rightarrow CO + OH$	11,13	0,67	25,70	11,71	0,67	185,60
78	$CH + O_2 \rightarrow HCO + O$	13,00	0	0	13,13	0	71,95

Расчеты проводились со следующим начальным составом смеси: O_2 – 0,1392; N_2 – 0,5188; Ar – 0,0621; CO – 0,2784; CO_2 – 0,0002.

2. Полученные результаты и их анализ

На рис. 1–3 представлены графики зависимости температуры от времени при различных начальных концентрациях воды в составе смеси, динамика изменения концентрации атомарного водорода, динамика изменения концентрации атомарного водорода и температуры смеси соответственно. Как видно из графиков (рис. 1.) даже при небольших количествах воды в смеси реакция протекает значительно быстрее. Начало роста температуры совпадает с повышением концентрации атомарного водорода в смеси, который практически не производится в отсутствие воды в начальном составе. Увеличение температуры смеси приводит к сокращению адиабатического периода индукции и возможности воспламенения окиси углерода не в спутной зоне, а непосредственно на поверхности композиционного материала. Это приведет к нагреву поверхности композиционного материала и дополнительному выделению из состава композиционного материала газообразных горючих материалов, горение которых будет увеличивать температуру поверхности и сокращать адиабатический период индукции.

Следовательно, даже в упрощенной математической постановке об определении адиабатического периода индукции можно получить информацию о качестве композиционного материала без проведения сложных и дорогостоящих экспериментов непосредственно на композиционном материале. Рассмотренная в работе ситуация является типичной при прохождении летательными аппаратами, перемещающимися с большими сверхзвуковыми скоростями, водяных облаков и грозовых образований.

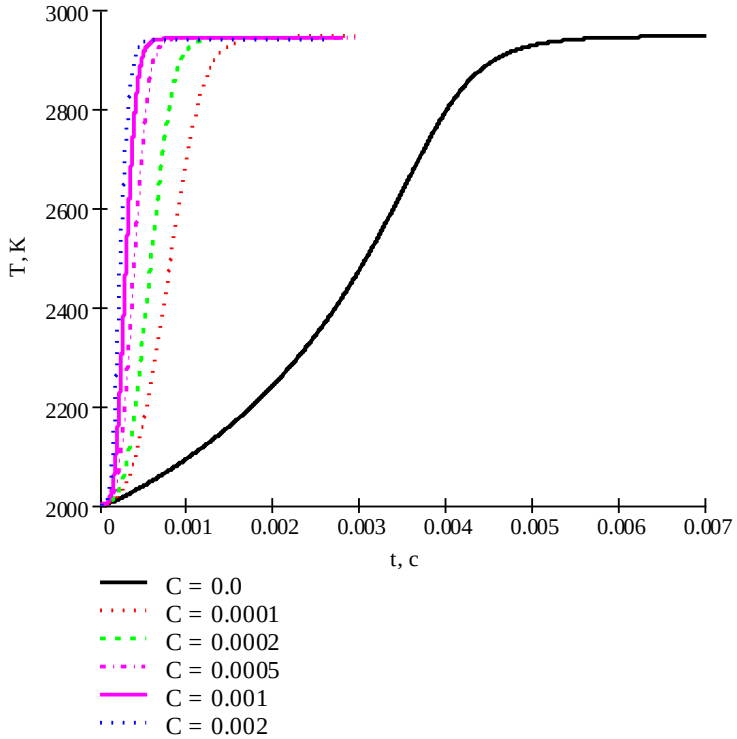


Рис. 1. Зависимость температуры от времени при разных начальных концентрациях (C, объемная доля) воды в составе смеси

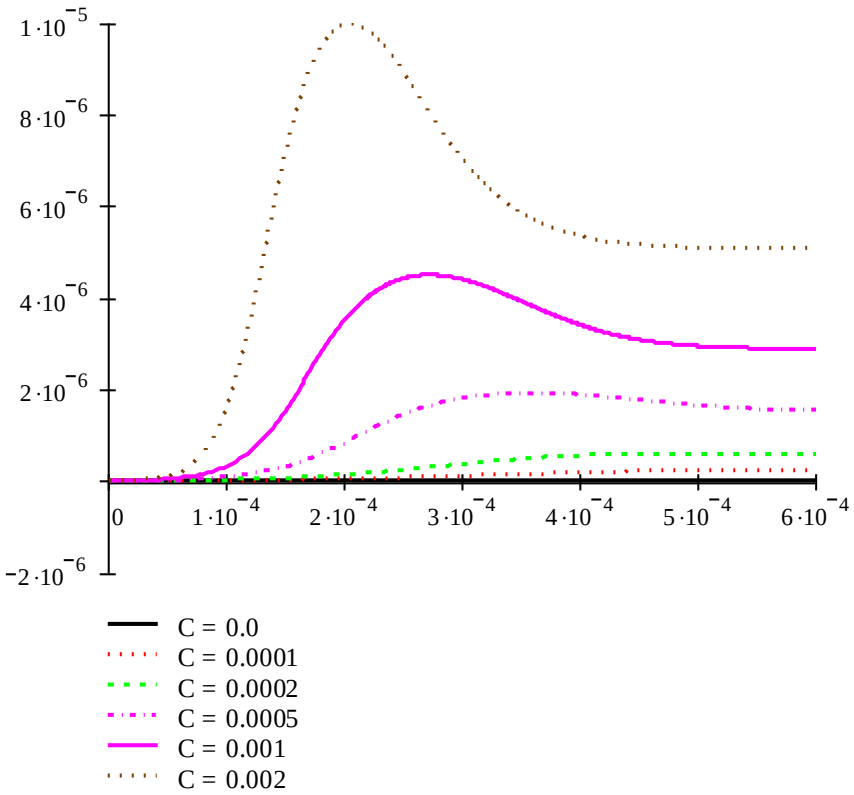


Рис. 2. Динамика концентрации водорода H, моль/см^3

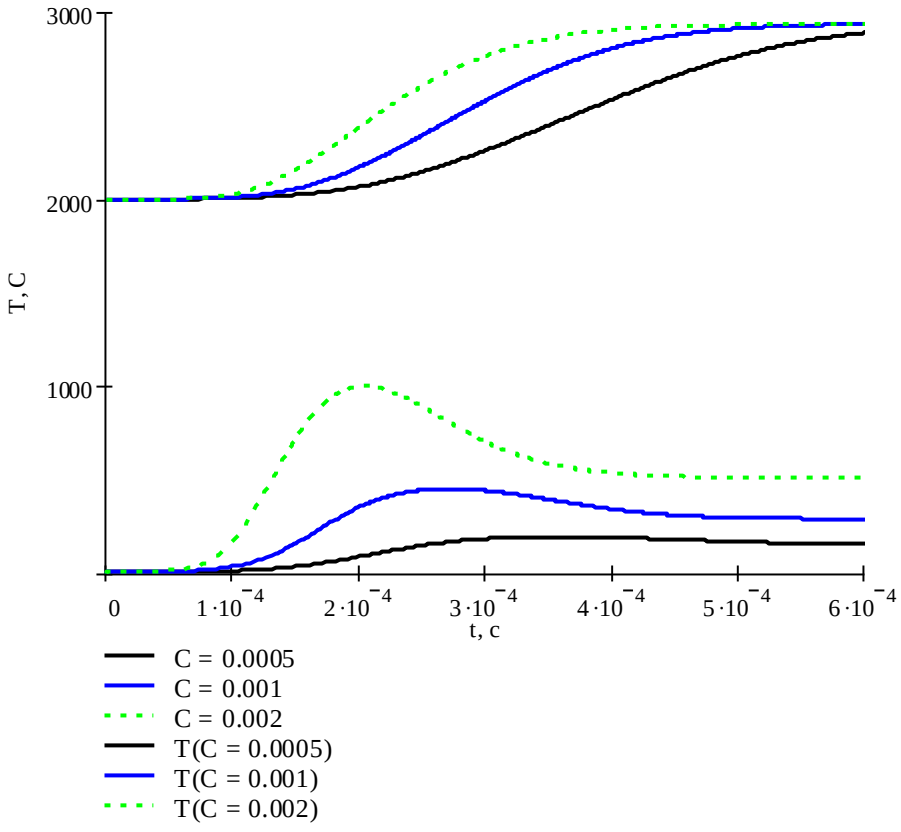


Рис. 3. Динамика концентрации атомарного водорода H, $\cdot 10^8$ моль/см^3 и температура смеси

Авторы выражают свою благодарность профессору В.Ф. Куропатенко и доценту В.К. Рябинину за полезные обсуждения и интерес к работе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 13 – 01 – 00072.

Библиографический список

1. Булыгин, М.Г. Влияние структурных неоднородностей углерод-углеродных композиционных материалов тепловой защиты гиперзвуковых летательных аппаратов на разбросы обгарных форм / М.Г. Булыгин, Г.Ф. Костин, Н.Н. Тихонов, О.Н. Дементьев, Ю.М. Ковалев, Ш.Ш. Ягафаров // Конструкции из композиционных материалов. – 2004. – № 3. – С. 3–15.

2. Рябинин, В.К. Математическое моделирование адиабатического периода индукции для метан-кислородных смесей в широком диапазоне начальных давлений и температур / В.К. Рябинин, Ю.М. Ковалев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6. – № 1. – С. 56–71.

3. Пигасов, Е.Е. Математическое моделирование адиабатического теплового взрыва для реакций окисления водорода и метана / Е.Е. Пигасов, В.К. Рябинин, Ю.М. Ковалев // Наука ЮУрГУ: материалы 65-ой Научной конференции. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2013. – С. 43–46.

4. Пигасов, Е.Е. Математическое моделирование адиабатического теплового взрыва для реакции окисления водорода / Е.Е. Пигасов, В.К. Рябинин, Ю.М. Ковалев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6. – № 3. – С. 130–135.

5. Вестбрук, Ч. Применение химической кинетики для определения критических параметров газовой детонации / Ч. Вестбрук, П. Уртьев // Физика горения и взрыва. – 1983. – № 6.

К содержанию

УДК 532.525

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИНВАРИАНТНОСТИ НЕКОТОРЫХ МОДЕЛЕЙ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СРЕД

Н.Л. Клиначева

Проведен сравнительный анализ инвариантности относительно преобразования Галилея математической модели «замороженной» газовзвеси и модели двухскоростной гетерогенной среды. Показано, что в случае «замороженной» газовзвеси неинвариантность уравнений этой модели проявляется в росте энтропии, что ведет к нарушению второго закона термодинамики. В случае двухскоростной среды неинвариантность проявляется достаточно слабо и практически не влияет на результаты расчетов.

Ключевые слова: математическая модель, инвариантность, многокомпонентная смесь.

Широкое использование взрывных процессов в современной технике тесно связано с решением вопросов обеспечения защиты инженерных сооружений и технологического оборудования от действия ударных волн (УВ). В связи с этим возникает необходимость изучения локализации механических эффектов взрыва и ослабления УВ посредством математического моделирования данных физических процессов.

При анализе математических моделей важно, чтобы условия проведения расчетов и экспериментов совпадали, а математическая модель была инвариантна относительно преобразований Галилея.

В работах [1, 2] проведен анализ математической модели «замороженной» газовзвеси [3], которая активно используется при анализе затухания УВ в гетерогенных средах. В работе [4] предложена модификация изложенной в [3] математической модели «замороженной» газовзвеси, которая является инвариантной к преобразованиям Галилея.

Рассмотрим плоское одномерное движение УВ со спадающим профилем давления через слой взвеси твердых частиц, расположенной перед жесткой стенкой.

Математическое описание процесса распространения УВ в газовзвесях осуществляется в рамках обычных в механике многофазных сред предположений [5]. Система дифференциальных уравнений [6], без учета химических реакций, описывающая плоское одномерное нестационарное движение двухскоростной смеси идеального калорически совершенного газа и монодисперсных несжимаемых частиц, имеет вид:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial x} = 0, \qquad \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial x} = 0, \qquad \frac{\partial \alpha_2}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_2}{\partial x} = 0, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_1 v_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 v_1^2}{\partial x} = -\alpha_1 \frac{\partial p}{\partial x} - f \ , \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2^2}{\partial x} = -\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x} + f, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho_2 e_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 e_2 v_2}{\partial x} = q, \quad (4)$$

$$\frac{\partial (\rho_1 E_1 + \rho_2 E_2)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[\rho_1 v_1 E_1 + \rho_2 v_2 E_2 + (\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2)p] = 0. \quad (5)$$

$$p = p_1\left(\rho_1^{\circ}, T_1\right) = p_2\left(\rho_2^{\circ}, T_2\right), \quad e_1 = e_1\left(\rho_1^{\circ}, T_1\right), \quad e_2 = e_2\left(\rho_2^{\circ}, T_2\right),$$

$$\rho_1 = \rho_1^{\circ}\alpha_1, \qquad \rho_2 = \rho_2^{\circ}\alpha_2 \ , \ \ \alpha_1 + \alpha_2 = 1, \quad E_i = e_i + \frac{v_i^2}{2}\left(i \ = \ 1, \ 2\right).$$

Здесь индексы 1, 2 относятся соответственно к газу и частицам; ρ_i°, α_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. Данная модель является инвариантной к преобразованиям Галилея [7].

В работе [8] представлена модель плоского одномерного движения монодисперсной аэровзвеси, для которой уравнение движение записано в следующем виде:

$$\frac{\partial \rho_2 v_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 v_2^2}{\partial x} = -\frac{3}{2}\alpha_2 \frac{\partial p}{\partial x} + f. \quad (6)$$

Исследование этой модели на инвариантность показало, что при переходе в новую систему координат в уравнении энергии появляется дополнительное слагаемое.

Численное исследование рассматриваемых моделей проводилось методом крупных частиц [9].

Начальные данные задачи формулируются следующим образом: 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°K.

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 $t\geq 0$ на правой границе $x=x_2$ задано условие непротекания для газа и условие свободного протекания для частиц, на левой границе при $x=0$ условие свободного протекания для газа и для частиц.

Воздействие УВ на преграду можно охарактеризовать максимальным давлением отражения на преграде и импульсом избыточного давления на стенке преграды:

$$I = \int_0^t (p-p_0)d\tau.$$

В таблице приведены результаты расчетов исследуемых моделей для двух значений объемной доли частиц. Видно, что результаты практически совпадают. Таким образом, неинвариантность к преобразованиям Галилея второй модели практически не влияет на параметры течения, в отличие от модели «замороженной» газовзвеси [4].

Таблица 1

Результаты расчетов исследуемых моделей
для двух значений объемной доли частиц

α_2	Dмкм	$P_{\max}\cdot 10^5$Па		$I_{\max}$ Па·с	
		Модель 1	Модель 2	Модель 1	Модель 2
0,001	100	8,023	8,024	1360,28	1360,42
	300	17,361	17,362	2631,45	2631,55
	600	22,569	22,569	3290,36	3290,30
0,01	100	1,088	1,088	29,493	29,526
	300	2,814	2,815	606,369	606,569
	600	4,952	4,953	949,005	949,155

Библиографический список

1. 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.

2. 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.

3. Кругликов, Б.С. Ослабление воздушных ударных волн экранирующими решётками / Б.С.Кругликов, А.Г. Кутушев // ФГВ. – 1988. – № 1. – С. 115–117.

4. Клиначева, Н.Л. Модифицированная математическая модель «замороженной» газовзвеси / Н.Л. Клиначева, Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Инженерно-физический журнал. – 2014. – Т. 87, № 6. – С. 1398–1403.

5. 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. Серия «Механика жидкости и газа». – 1981. – Т. 16. – С. 209–287.

6. Нигматулин, Р.И. Основы мехники гетерогенных сред / Р.И. Нигматулин. – М.: Наука, 1978.

7. Ковалев, Ю.М. Математическая модель газовзвеси с химическими превращениями в приближении парных взаимодействий / Ю.М. Ковалев, Е.Е. Пигасов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2014. – Т. 7, № 3. – С. 40–49.

8. Вайнштейн, П.Б. Нестационарные задачи горения аэровзвесей унитарного топлива / П.Б. Вайнштейн, Р.И. Нигматулин, В.В. Попов, Х.А. Рахматуллин // Известия АН СССР. Серия «Механика, жидкости и газа». – 1981. – Вып. 3. – С. 39–43.

9. Белоцерковский, О.М. Метод крупных частиц в газовой динамике / О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов. – М.: Наука, 1982.

К содержанию

УДК 681.51.011+ 517.938+ 517.977.1

К ВОПРОСУ ИССЛЕДОВАНИЯ АСИМПТОТИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

А.А. Брагина

Исследована асимптотическая устойчивость движения манипуляционного робота в точку программной траектории.

Ключевые слова: нелинейная динамическая модель, синтез управлений, функции Ляпунова.

В работах [1, 2, 3] рассмотрены вопросы синтеза управлений движением манипуляционного робота (МР) в точку программной траектории методом функций Ляпунова. Математическая модель динамической системы получена для многозвенного МР с распределенными массами звеньев и электроприводами.

Обобщенные координаты манипулятора η_λ, η_μ (λ, μ =1,…,n) определяются углами поворота его звеньев, n – число степеней подвижности (подсистем) МР. Обобщенными координатами электроприводов являются заряды $q_{a\lambda}$, $q_{b\lambda}$, λ =1,…n , протекающие через поперечные сечения обмоток якоря и возбуждения соответствующих электродвигателей. Нелинейная динамическая модель МР с построена в форме уравнений Лагранжа–Максвелла:

$$\begin{cases} \left(L_{a\lambda\mu} - L_b^{\upsilon\gamma} M_{\gamma\lambda} M_{\upsilon\mu}\right)\dot{I}_{a\mu} + L_b^{\nu\gamma}\left(n_\gamma - 2M_{\gamma\mu} I_{a\mu}\right)\dfrac{\partial M_{\nu\lambda}}{\partial \eta_\beta}\dot{\eta}_\beta = N_\lambda, \\ c_{\lambda\mu}\ddot{\eta}_\mu + C_{\lambda,\mu\nu}\dot{\eta}_\mu\dot{\eta}_\nu + L_b^{\nu\gamma} M_{\gamma\mu} I_{a\mu}\dfrac{\partial M_{\nu\beta}}{\partial \eta_\lambda} I_{a\beta} = M_\lambda, \end{cases} \quad (1)$$

λ, μ, ν = 1,…,n.

Здесь $c_{\lambda\mu}$ – тензор инерции манипулятора, $I_{a\lambda}$ = $\dot{q}_{a\lambda}$, $I_{b\lambda}$ = $\dot{q}_{b\lambda}$, $\dot{\eta}_\lambda$ – обобщенные скорости системы, $L_{a\lambda\mu}$, $M_{\lambda\mu}$ – тензоры индуктивности и взаимной индуктивности, соответственно, обмоток якоря и возбуждения электродвигателей приводов, $I_{a\beta}$ – циклическая скорость, $C_{\lambda,\mu\nu}$ – символ Кристоффеля первого рода метрического тензора $c_{\lambda\mu}$, 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. Обобщенные силы даются равенствами

$$N_\lambda = -R_{\lambda\mu} I_{a\mu} + U_\lambda, \quad M_\lambda = -B_{\lambda\mu}\dot{\eta}_\mu - \frac{\partial W_p}{\partial \eta_\lambda}(\eta) + L_b^{\nu\gamma} n_\gamma \frac{\partial M_{\nu\beta}}{\partial \eta_\lambda} I_{a\beta},$$

λ, μ, ν =1,…,n, $R_{\lambda\mu}$, $B_{\lambda\mu}$ – 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. Нелинейные дифференциальные уравнения (1) описывают поведение фазового вектора $x = \left(x_1, x_2, ..., x_n\right)^T$, $x_\lambda = \left(\eta_\lambda, \dot{\eta}_\lambda, I_{a\lambda}, \dot{I}_{a\lambda}\right)^T$ системы с течением времени $t \in [t_0, \tau]$. Возмущения $\Delta\eta_\lambda$, $\Delta\dot{\eta}_\lambda$, $\Delta I_{a\lambda}$ введены как разность между текущими и программными $x_\lambda^\circ = \left(\eta_\lambda^\circ, \dot{\eta}_\lambda^\circ, I_{a\lambda}^\circ, \dot{I}_{a\lambda}^\circ\right)$ значениями координат фазового вектора:

$$\Delta\eta_\lambda = \eta_\lambda - \eta_\lambda^\circ, \ \Delta\dot{\eta}_\lambda = \dot{\eta}_\lambda, \ \Delta I_{a\lambda} = I_{a\lambda} - I_{a\lambda}^\circ, \ \Delta\dot{I}_{a\lambda} = \dot{I}_{a\lambda}.$$

Выбор управления в виде:

$$U_\lambda = R_{\lambda\mu} I_{a\mu} - \alpha(J_\lambda + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu \Delta I_{a\mu}) \quad (2)$$

позволяет построить положительно-определенную функцию Ляпунова V с постоянно-отрицательной производной в силу системы (1):

$$\dot{V} = -B_{\lambda\mu}\dot{\eta}_\lambda\dot{\eta}_\mu - \rho\alpha(J_\lambda + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu \Delta I_{a\mu})(J_\lambda + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu \Delta I_{a\mu}), \quad (3)$$

где α, ρ – положительные константы, что обеспечивает устойчивость положения равновесия системы.

Исследуем наличие у рассматриваемой системы асимптотической устойчивости. Пусть Ω – множество точек, не содержащее начало координат $\Delta x_1 = \Delta x_2 = ... = \Delta x_n = 0$, где $\dot{V}$=0. С учетом того, что при практической реализации алгоритма управления взаимная индуктивность обмоток якоря и возбуждения ничтожно мала, уравнения движения (1) и энергия возмущенного движения J_λ примут вид:

$$\begin{cases} L_{a\lambda\mu}\dot{I}_{a\mu} + L_b^{\nu\gamma} n_\gamma \frac{\partial M_{\nu\lambda}}{\partial \eta_\beta}\dot{\eta}_\beta = -R_{\lambda\mu} I_{a\mu} + U_\lambda \\ c_{\lambda\mu}\ddot{\eta}_\mu + C_{\lambda,\mu\nu}\dot{\eta}_\mu\dot{\eta}_\nu = B_{\lambda\mu}\dot{\eta}_\mu - \frac{\partial W(\eta)}{\partial \eta_\lambda} - L_b^{\nu\gamma} n_\gamma \frac{\partial M_{\nu\lambda}}{\partial \eta_\beta} I_{a\beta}, \end{cases} \quad (4)$$

$$J_\lambda = L_{a\lambda\mu}\Delta I_{a\mu} + L_b^{\nu\gamma} n_\gamma \frac{\partial M_{\nu\lambda}}{\partial \eta_\beta}\Delta\eta_\beta,$$

управление реализуется в виде:

$$U_\lambda = R_{\lambda\mu} I_{a\mu} - \alpha((L_{a\lambda\mu} + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu \Delta I_{a\mu}) + I_{b\nu}\frac{\partial M_{\nu\lambda}}{\partial \eta_\beta}\Delta\eta_\beta), \quad (5)$$

а множество Ω определится:

$$\Omega = \left\{ \Delta x_\lambda : \Delta\dot{\eta}_\lambda = 0, (L_{a\lambda\mu} + \frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu)\Delta I_{a\mu} + L_b^{\nu\gamma}\frac{\partial M_{\nu\lambda}}{\partial \eta_\beta}\Delta\eta_\beta) \right\}, \quad (6)$$

λ, μ, ν =1,…,n.

Убедимся, что на этом множестве нет целых траекторий системы (1). Действительно, если такая траектория лежит на множестве, то тождественно вдоль нее $\dot{\eta}_\lambda = 0, \eta_\lambda = \text{const}$. Второе уравнение системы на множестве Ω имеет вид:

$$c_{\lambda\mu}\ddot{\eta}_\mu - I_{b\nu}\frac{\partial M_{\nu\beta}}{\partial \eta_\lambda} I_{a\beta} = -\frac{\partial W_p(\eta)}{\partial \eta_\lambda}, \quad (7)$$

и справедливы равенства:

$$\Delta \mathrm{I}_{\mathrm{a}\beta} = -\mathrm{G}^{\lambda\nu}\mathrm{I}_{\mathrm{b}\nu}\frac{\partial \mathrm{M}_{\lambda\beta}}{\partial \eta_\mu}\Delta\eta_\mu = -\mathrm{H}_{\beta\mu}\Delta\eta_\mu, \qquad (8)$$

где $\mathrm{G}^{\lambda\nu}:\mathrm{G}^{\lambda\nu}\mathrm{G}_{\nu\mu}=\delta_\mu^\lambda$, $\mathrm{G}_{\lambda\mu}=\mathrm{L}_{\mathrm{a}\lambda\mu}+\frac{1}{\rho}\delta_\lambda^\mu$, $\mathrm{H}_{\mathrm{b}\mu}=\mathrm{G}^{\lambda\nu}\mathrm{I}_{\mathrm{b}\nu}\frac{\partial \mathrm{M}_{\lambda\beta}}{\partial \eta_\mu}$,

λ,μ,ν =1,…,n.

В промышленных манипуляционных системах в окрестности точки программной траектории $\Delta\eta_\lambda$ – достаточно мало, и $\frac{\partial \mathrm{W_p}(\eta)}{\partial \eta_\lambda}$ представимо в виде: $\frac{\partial \mathrm{W_p}(\eta)}{\partial \eta_\lambda}=\left(\frac{\partial \mathrm{W_p}(\eta)}{\partial \eta_\lambda}\right)_{\eta=\eta^\circ}+\left(\frac{\partial^2 \mathrm{W_p}(\eta)}{\partial \eta_\lambda \partial \eta_\mu}\right)_{\eta=\eta^\circ}\Delta\eta_\mu$. Тогда с учетом стационарности режима в точке программной траектории получим:

$$\mathrm{c}_{\lambda\mu}\ddot{\eta}_\mu = -\left(\mathrm{I}_{\mathrm{b}\nu}\frac{\partial \mathrm{M}_{\nu\beta}}{\partial \eta_\lambda}\mathrm{H}_{\beta\mu}+\left(\frac{\partial^2 \mathrm{W_p}(\eta)}{\partial \eta_\lambda \partial \eta_\mu}\right)_{\eta=\eta^\circ}\right)\Delta\eta_\mu. \qquad (9)$$

Очевидно, за счет выбора константы ρ, входящей в выражение $\mathrm{H}_{\beta\mu}$, всегда можно добиться того, что для данного программного значения η° сумма $\mathrm{I}_{\mathrm{b}\nu}\frac{\partial \mathrm{M}_{\nu\beta}}{\partial \eta_\lambda}\mathrm{H}_{\beta\mu}+\left(\frac{\partial^2 \mathrm{W_p}(\eta)}{\partial \eta_\lambda \partial \eta_\mu}\right)_{\eta=\eta^\circ}$ обеспечит отличие от нуля правой части (9). Но тогда на множестве Ω ускорения всех степеней подвижности МР не равны нулю при нулевой скорости. Полученное противоречие исключает предположение о наличии на множестве Ω целых траекторий системы, и в силу теоремы Н.Н. Красовского рассматриваемая электромеханическая система устойчива асимптотически.

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. Синтез алгоритма сигнальной адаптивной стабилизации манипуляционного робота с электроприводами / В.И. Ширяев, А.А. Брагина // Тр. Междунар. конф. с элементами научной школы для молодежи. – СПб.: «Политехника-сервис», 2010. – С. 219–227.

3. Ширяев, В.И. Об управлении манипуляционным роботом в условиях неопределенности / В.И. Ширяев, А.А. Брагина // Робототехника и техническая кибернетика. – 2014. – № 1(2). – С. 18–21.

К содержанию

УДК 517.972.5

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В ЗАДАЧАХ С СУЩЕСТВЕННОЙ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

С.А. Волков

Решение геометрически нелинейных задач представляется весьма актуальным, в то время как существующие методы недостаточно совершенны. В данной статье предлагается методика решения геометрически и физически нелинейных задач методом конечных элементов, описывается программа, реализующая ее.

Ключевые слова: метод конечных элементов, дисторсия, тензор, деформация Коши.

Предлагаемый метод основывается на методе конечных элементов и состоит в линеаризации основных уравнений при решении геометрически и физически нелинейных задач. Напомним суть метода конечных элементов.

При конечно-элементной аппроксимации тела в нем выделяют представительные точки; их начальное положение характеризуется радиус-векторами $\boldsymbol{x}_k$. Координаты этих точек образуют одномерный массив чисел $[X_0]$. Текущее положение точек определяется матрицей $[X] = [X_0] + [u]$. Матрица-столбец смещений узлов $[u]$ при известных начальных положениях $[X_0]$ однозначно и линейно определяет дисторсии $[D]$ всех КЭ:

$$[D] = [L(X_0)][u]. \quad (1)$$

Условия равновесия целесообразно записывать с помощью принципа возможных перемещений (ПВП). Для этого вводится виртуальная (третья) конфигурация среды $[X] + [\delta]$, бесконечно мало отличающаяся от актуальной конфигурации $[X]$. Работа внешних сил на этом малом смещении равна работе поля напряжений $[\sigma]$. При произвольности $[\delta]$ это условие приводит к связи между напряжениями $[\sigma]$ и внешними силами, приведенными к узлам ($[Q]$):

$$[B][\sigma] = [Q]. \quad (2)$$

В отличие от предыдущего уравнения (1) матрица $[B]$ зависит от $[X]$ и, таким образом, изменяется в процессе деформирования тела.

Тензор преобразования, связанный с упругой деформацией, определяется следующей формулой:

$$\boldsymbol{F}_e = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{e} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{C}^{-1} \cdot\cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3)$$

где $\boldsymbol{C}$ – четырехвалентный симметричный тензор констант упругости материала, знак "$\cdot\cdot$" обозначает двойное скалярное произведение. Поскольку при разгрузке упругая деформация по определению исчезает ($\boldsymbol{F}_e = \boldsymbol{I}$), считают, что она характеризует обратимое деформирование не разрушающихся связей.

Пластическая деформация (тензор преобразования $\boldsymbol{F}_p = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{p}$, где $\boldsymbol{p}$ – симметричный тензор пластической деформации), наоборот, вызвана разрушением старых связей и одновременным образованием новых.

Сказанное поясняет, почему принято считать, что упругопластическое деформирование есть упругое деформирование тела, которое ранее уже было пластически деформировано, а не наоборот. Поэтому записывают обычно $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_e \cdot \boldsymbol{F}_p$ [1], считая, что оба сомножителя включают как собственно деформацию, так и поворот, причем, например, в работе [2] соответствующие повороты называют упругим и пластическим. Нам представляется, однако, более логичным отказаться от разделения жесткого поворота на упругий и пластический, полагая, что упругими и пластическими могут быть лишь деформации. Предлагается следующее разложение тензора $\boldsymbol{F}$:

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_\omega \cdot \boldsymbol{F}_e \cdot \boldsymbol{F}_\vartheta \cdot \boldsymbol{F}_p, \qquad (4)$$

($\boldsymbol{F}_\omega$ – тензор поворота), причем тензоры $\boldsymbol{F}_e$, $\boldsymbol{F}_\vartheta$ (тепловой деформации), $\boldsymbol{F}_p$ – симметричны, как и было описано выше. Подобное выражение можно найти в работе [3].

Позиция тензора $\boldsymbol{F}_\vartheta$ в разложении может быть объяснена следующим образом: все упругие характеристики тела для различных температур измеряются на теле, уже имеющем данную температуру. Кроме того, тепловая деформация связана с изменением в связи с нагревом равновесного расстояния между частицами реальной среды. Заметим, что в случае изотопного тела тензор является шаровым:

$$\boldsymbol{F}_\vartheta = (1 + \alpha \cdot \Delta T)\boldsymbol{I}; \qquad (5)$$

положение этого тензора в произведении (4) несущественно. Можно записать:

$$\boldsymbol{F} = (1 + \alpha\, \Delta T)\, \boldsymbol{F}_\omega \cdot \boldsymbol{F}_e \cdot \boldsymbol{F}_p. \qquad (6)$$

Геометрически нелинейные задачи могут существенно отличаться друг от друга: малые деформации и большие смещения, малые смещения и большие повороты, малые повороты и большие деформации и т.д. Соответственно, может существовать значительное количество методов линеаризации. Выбор того или иного метода не только зависит от типа нелинейности, но и требует соответствующих практических навыков. Ниже рассмотрен один из возможных вариантов линеаризации.

Зададим тензоры градиента деформации $\boldsymbol{F}$ и дисторсии $\boldsymbol{D}$. Введем также тензор малых деформаций (деформаций Коши):

$$\boldsymbol{\varepsilon}_c = (\nabla_x \boldsymbol{U} + \boldsymbol{U} \nabla_x)/2 = (\boldsymbol{D} + \boldsymbol{D}^T)/2. \qquad (7)$$

Чтобы исключить тензор $\boldsymbol{F}_\omega$ в выражении (3) вычислим симметричный тензор $\boldsymbol{F}^T \cdot \boldsymbol{F}$. С одной стороны, он равен $\boldsymbol{I} + 2\boldsymbol{\varepsilon}_c + \boldsymbol{D}^T \cdot \boldsymbol{D}$ (см (7)), с другой:

$$\boldsymbol{F}^T \cdot \boldsymbol{F} = (1 + \alpha \Delta T)^2 (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{p}) \cdot (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{e}) \cdot (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{e}) \cdot (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{p}), \qquad (8)$$

где $\boldsymbol{e}$ и $\boldsymbol{p}$ – тензоры упругой и пластической деформации соответственно, α – коэффициент теплового расширения материала, ΔT – приращение температуры.

Отсюда находим:

$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{\varepsilon}_c - \boldsymbol{p}' - \boldsymbol{\psi}, \tag{9}$$

$$\boldsymbol{p}' = (1+\alpha T)\boldsymbol{p},$$

$$\boldsymbol{\psi} = -\boldsymbol{D}^T\cdot\boldsymbol{D}/2+\boldsymbol{p}'\boldsymbol{e}+\boldsymbol{e}\boldsymbol{p}'+(\boldsymbol{p}'^2+\boldsymbol{e}^2)/2+(\boldsymbol{p}'\boldsymbol{e}^2+\boldsymbol{e}^2\boldsymbol{p}')/2+\boldsymbol{p}'\boldsymbol{e}\boldsymbol{p}'+(\boldsymbol{p}'\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}\boldsymbol{p}')/2.$$

В тензор $\boldsymbol{\psi}$ входят вторые, третьи и четвертые степени деформаций; это позволяет считать, что он мало меняется за шаг. Введем следующее обозначение: $\boldsymbol{\xi} = -\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{\psi}$. Тогда получим:

$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{\varepsilon}_c + \boldsymbol{\xi}. \tag{10}$$

Запишем разрешающую систему уравнений в матричном виде:

$$\begin{cases} [e] = [\varepsilon_c] + [\xi] \\ [\varepsilon_c] = [\Gamma][u] \\ [\sigma] = [C][e] \\ [B][\sigma] = [Q]. \end{cases} \tag{11}$$

Здесь матрица $[\Gamma]$ связи между перемещениями и деформациями Коши, матрица $[C]$ и матрица $[B]$ могут быть найдены из уравнений (7), (3) и (2), соответственно. При этом матрица $[\Gamma]$ зависит только от начальных координат узлов, т.е. она не изменяется в процессе расчета, матрицы же $[C]$ и $[B]$ есть функции текущей конфигурации и поэтому требуют пересчета на каждом шаге. Путем последовательных подстановок получим следующее разрешающее уравнение:

$$[B][C][\Gamma][u] = [Q] - [B][C][\xi],$$

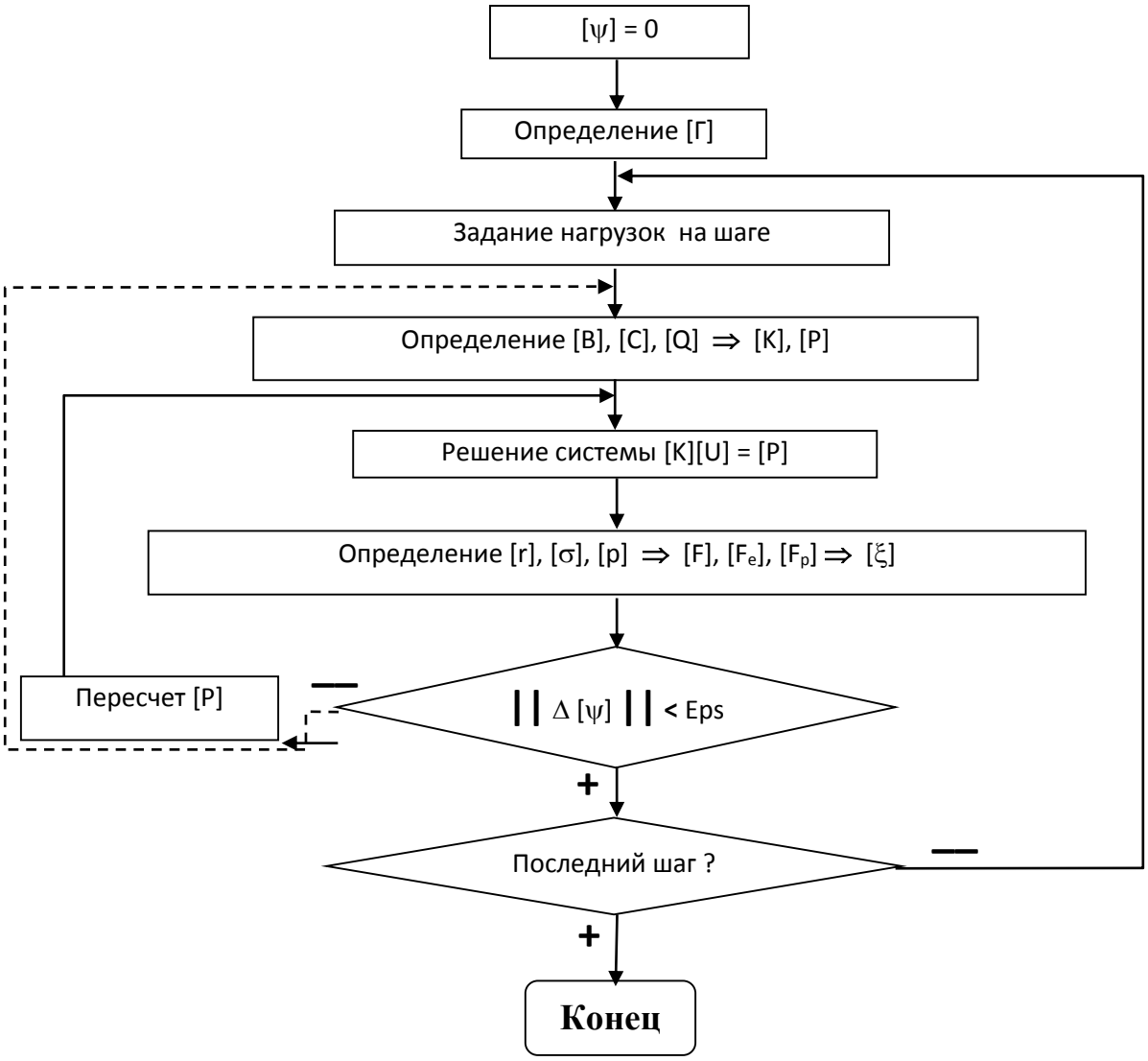
или

$$[K][u] = [P], \tag{12}$$

где $[K] = [B][C][\Gamma]$, $[P] = [Q] - [B][C][\xi]$.

Ниже на рисунке представлен алгоритм расчета в виде блок-схемы.

Вышеописанный алгоритм был реализован с помощью пакета MATLAB 5.1. MATLAB-программы практически не теряют в гибкости вычислений по сравнению с программами на языках высокого уровня, при этом предоставляя несравненно больше стандартных вычислительных средств для реализации практически любых математических операций. К недостаткам можно весьма скромные возможности по созданию интерфейса пользователя, практически полное отсутствие возможности нестандартного управления внешними устройствами, а также то, что программа может выполнятся лишь в режиме интерпретации (следует, однако, отметить, что интерпретатор MATLAB работает значительно быстрее, чем интерпретатор WYSIWYG-систем, всего в 1.2–1.5 раза медленнее чем соответствующий .exe-файл).



Алгоритм расчета

Описанный в предыдущем пункте алгоритм содержит большое количество операций с матрицами, специально для работы с которыми пакет MATLAB и был создан. В связи со всем вышесказанным для реализации алгоритма метода конечных элементов с использованием линеаризации уравнений был выбран именно пакет MATLAB.

Программа FAN (**F**inite element **A**nalysis of **N**onlinear problems) предназначена для решения плоских геометрически нелинейных задач (как упругих, так и неупругих). Предусмотрен лишь один тип конечных элементов – плоский треугольный с тремя узлами, каждый узел имеет две степени свободы – перемещение вдоль осей *Ox* и *Oy*. В качестве входных данных программе необходимы 3 матрицы – с описанием узлов, элементов и свойств элементов. В программе возможно задание нулевых перемещений любого из узлов в направлении *x* и(или) *y*, а также узловых сил (эти данные помещаются в матрицу узлов). Матрица с описанием элементов для каждого

элемента содержит, помимо номеров узлов, номер строки в матрице свойств элемента. Эта строка включает в себя толщину и параметры материала, которые могут меняться в зависимости от используемой модели среды. Необходимо задать также количество шагов нагружения N и вектор параметра нагрузки $\boldsymbol{P}$ длиной N; на k-м шаге все силы, приложенные в узлах, умножаются на k-й компонент этого вектора. Для вязких материалов, помимо вектора $\boldsymbol{P}$ необходимо задать также вектор значений времени $\boldsymbol{t}$.

Выходными данными программы являются 2 матрицы – с напряжениями в элементах и узловыми перемещениями для каждого шага по времени. После окончания расчета возможно построение различных графиков с использованием стандартных средств пакета MATLAB.

Библиографический список

1. Lee, E.H. Finite strain elastic plastic theory with application to plane-wave analysis / E.H. Lee, D.T. Liu // J. Appl. Phys. 1967. № 38. Pp. 19–27.

2. Lu Jia On direct determination of the rotation tensor from the deformation gradient / Lu Jia, Papadopoulos Panayiotis // Math. and Mech. Solids. 1997. V. 2, № 1. Pp. 17–26.

3. Stumpf, H. Constitutive model and incremental shakedown analysis in finite elastoplasticity / H. Stumpf // Inelastic behavior of structures under variable loads. – Kluwer academic publishers, 1995. – Pp. 293–307.

К содержанию

УДК 517.956:539.374 + 539.374

О ДЕФОРМИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ ПЛАСТИЧЕСКОГО СЛОЯ ПРИ ЕГО СЖАТИИ СО СКОЛЬЖЕНИЕМ ПО ПОВЕРХНОСТИ МАТРИЦЫ

А.Н. Дияб, В.Л. Дильман

Изучается напряженно-деформированное состояние пластического слоя при его сжатии со скольжением в случае плоской деформации на основе гипотезы плоских сечений. Получены явные аналитические выражения для вычисления скоростей смещений в пластическом слое.

Ключевые слова: пластический слой, плоская деформация, осадка, напряженное состояние, гипотеза плоских сечений, линии тока.

Введение. Теоретическое изучение сжатия пластического слоя плоскими параллельными матрицами впервые проводилось в работе [1] и затем многими авторами. Так как напряжения на контактной поверхности между слоем и матрицей неизвестны, обычно рассматривают обратную граничную задачу, в которой требуется для определения сжимающего усилия найти

нормальные напряжения на контактной поверхности. Дополнительные условия формулируются в виде ограничений на классы функций, в которых ищется решение. Обоснование таких условий должно опираться на данные натурных экспериментов либо известные свойства деформируемого слоя (в тонких слоях допускают линейную зависимость касательных напряжений по толщине слоя [2, 3]). Применяемые ограничения преследуют две цели: упрощение математической модели и постановку обратной граничной задачи. Список таких условий приведен в работах [4, 5]. К силовым условиям относится [4 – 6] гипотеза разделения переменных для касательных напряжений:

$$\tau_{xy} = X(x)Y(y).$$

Допущением деформационного типа является гипотеза поперечных плоских сечений [2, 4, 5, 7–10]:

$$v_y = W(y), \qquad (1)$$

здесь v_y – скорость смещения точки слоя в поперечном направлении. В работах [4, 5, 8] деформированные координатные линии аппроксимировались фрагментами синусоид. Это позволило дать описание напряженного состояния слоя в явной аналитической форме. В работах [11–13] методы работ [2, 4, 5, 7–9] перенесены на неоднородный слой. Одно из обобщений гипотезы (1) использовалось в [14]. Гипотеза (1) в осесимметричных задачах применялась в работах [15–20]. Упомянутые гипотезы распространяются на часть слоя кроме окрестностей свободных поверхностей. Около такой поверхности приходится решать задачу Коши для системы уравнений в частных производных гиперболического типа с разрывными граничными условиями [21, 22].

Целью данной работы является изучение деформированного состояния пластического слоя (скорости перемещений, линии тока) на основе исследования математической модели напряженно-деформированного состояния пластического слоя, содержащей гипотезу (1).

Вычисление напряжений в слое. Напряженно-деформированное состояние пластического слоя при плоской деформации в безразмерных переменных задается системой уравнений [2]:

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0; \qquad (2)$$

$$\frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} = 0; \qquad (3)$$

$$\left(\sigma_x - \sigma_y\right)^2 + 4\tau_{xy}^2 = 4; \qquad (4)$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial x}+\frac{\partial v_y}{\partial y}=0; \tag{5}$$

$$\frac{\sigma_x-\sigma_y}{2\tau_{xy}}=\frac{\dfrac{\partial v_x}{\partial x}-\dfrac{\partial v_y}{\partial y}}{\dfrac{\partial v_x}{\partial y}+\dfrac{\partial v_y}{\partial x}}, \tag{6}$$

здесь σ_x, σ_y и τ_{xy} – напряжения, v_x, v_y – скорости перемещений. Функции из уравнений (2) – (6) определены на сечении слоя толщиной 2κ, $\kappa\in(0;1]$, имеющего две оси симметрии – оси координат. На осях координат касательные напряжения равны нулю: $\tau(x,0)=\tau(0,y)=0$. Обозначив:

$$Y(y)=\frac{W''(y)}{2W'(y)}, \tag{7}$$

из (1) и (6) получим: $\tau_{xy}=0{,}5\left(\sigma_x-\sigma_y\right)Y(y)x$. Отсюда следует после подстановки этого выражения вместо τ_{xy} в (4):

$$\sigma_y-\sigma_x=\pm\frac{2}{\sqrt{1+Y^2(y)x^2}}=\pm2\left(1-\frac{1}{2}Y^2(y)x^2+\frac{3}{8}Y^4(y)x^4-\ldots\right), \tag{8}$$

(знак плюс для растягивающей нагрузки, минус – сжимающей), а также:

$$\tau_{xy}=\frac{Y(y)x}{\sqrt{1+Y^2(y)x^2}}=Y(y)x-\frac{Y^3(y)x^3}{2}+\frac{3Y^5(y)x^5}{8}-\ldots \tag{9}$$

Представим уравнение (4) приближенно в виде [3–6]:

$$\sigma_x-\sigma_y=2\sqrt{1-\tau_{xy}^2}\approx2-\tau_{xy}^2. \tag{10}$$

Используя (10), исключим из (2) и (3) нормальные напряжения. Получим [4, 5] нелинейное уравнение относительно неизвестной функции τ_{xy}:

$$-\frac{\partial^2\left(\tau_{xy}^2\right)}{\partial x\partial y}+\frac{\partial^2\tau_{xy}}{\partial x^2}-\frac{\partial^2\tau_{xy}}{\partial y^2}=0. \tag{11}$$

Запишем его решение в виде ряда:

$$\tau_{xy}=xY_1(y)+x^3Y_2(y)+x^5Y_3(y)+\ldots.$$

При подстановке этого ряда в (11) получится относительно неизвестных функций $Y_1, Y_2, Y_3,\ldots$ бесконечная система обыкновенных дифференциальных уравнений: $-4Y_1'Y_1 + Y_2 - Y_1'' = 0$; $-8\left(Y_1Y_2\right)' + 20Y_3 - Y_2'' = 0$ и т.д. Из первого уравнения и формулы (9) следует, что если представить приближенно касательные напряжения в виде:

$$\tau_{xy} \approx Y(y)x - \frac{Y^3(y)x^3}{2}, \qquad (12)$$

то функция $Y(y)$ удовлетворит уравнению и начальному условию:

$$Y'' + 4YY' + 0{,}5Y^3 = 0,\ Y(0) = 0. \qquad (13)$$

Относительную погрешность в формуле (12) , сравнивая с точным решением (9), можно оценить величиной $0{,}375\,\tau_{xy}^4\left(1 - 0{,}25\tau_{xy}^2\right)^{-2{,}5}$. При $\tau_{xy} = 0{,}5$ относительная погрешность формулы (12) менее 0,05. Если в (9) взять только первое слагаемое, то [3–6] функция Y удовлетворяет уравнению:

$$Y'' + 4YY' = 0. \qquad (14)$$

Точным решением последнего уравнения при начальных условиях $Y(0) = 0,\ Y'(0) = A$, где $A > 0$, является функция:

$$Y(y) = \sqrt{A/2}\,\mathrm{th}(\sqrt{2A}y). \qquad (15)$$

При начальных условиях?

$$Y(0) = 0,\ Y'(0) = -A, \qquad (16)$$

где $A > 0$, точным решением уравнения (14) является функция:

$$Y(y) = -\sqrt{A/2}\,\mathrm{tg}(\sqrt{2A}y). \qquad (17)$$

Решение (15) относится к случаю растяжения, решение (17) – сжатия. Заметим, что параметр A, характеризующий скорость прогиба линий сетки, зависит от толщины слоя и меняется в процессе деформирования. Из формулы (17) следует:

$$\tau_{xy} = -\sqrt{A/2}\,x\,\mathrm{tg}(\sqrt{2A}y). \qquad (18)$$

Численные эксперименты [11] показывают, что решения уравнений (13) и (14) при одинаковых граничных условиях мало различаются. Поэтому зависимость (17) можно использовать для вычисления касательных напряжений по формуле (14): $\tau_{xy} \approx -\sqrt{A/2}\,x\,\mathrm{tg}(\sqrt{2A}y) + 0{,}5\left(A/2\right)^{3/2}x^3\,\mathrm{tg}^3(\sqrt{2A}y)$. Предполагая, что остаток ряда (9), начиная с пятой степени, мало влияет на

общую сумму, формулу (17) можно применять и для точного выражения (9) для касательных напряжений:

$$\tau_{xy} = \frac{\sqrt{A/2}\, x \operatorname{tg}(\sqrt{2A}y)}{\sqrt{1+(A/2)x^2 \operatorname{tg}^2(\sqrt{2A}y)}}. \qquad (19)$$

Параметры задачи. Внешними параметрами задачи являются:

1) скорость сжатия $\nu_к = |W(\kappa)|$;

2) коэффициент трения скольжения заготовки (пластического слоя) по матрице μ_{fr};

3) начальная толщина заготовки κ_0.

Внутренними параметрами задачи являются:

1) переменная толщина заготовки κ;

2) параметр A, характеризующий прогиб поперечных (для слоя) координатных линий;

3) ближайшая к поперечной оси симметрии слоя точка x^*, в которой касательные напряжения достигают наибольшего значения. В работах [4, 5] показано, что $x^* = 1 - 2\kappa/\sqrt{1+m}$.

При отсутствии проскальзывания между слоем и матрицей касательные напряжения в слое достигают около контактной поверхности на участке вблизи свободной поверхности своего наибольшего возможного значения, равного единице. Предположим, что имеет место скольжение заготовки относительно матрицы. Пусть $m = \max \tau_{xy}(x, \kappa),\ m \le 1$ – наибольшее значение касательных напряжений (оно достигается на контактной поверхности вблизи свободной поверхности). Так как $|\tau_{xy}(x,\kappa)| \le \mu_{fr} |\sigma_y|$, то $m = \min(\mu_{fr} |\sigma_y|, 1)$. $m = 1$ означает, что, скольжение заготовки относительно матрицы отсутствует. Рассмотрим случай, когда $m < 1$.

Нахождение параметра A. Подставив в уравнение (19) x^* вместо x, κ вместо y и m вместо τ_{xy}, найдем зависимость между m и A:

$$m = \frac{\sqrt{A/2}\, x^* \operatorname{tg}(\sqrt{2A}\kappa)}{\sqrt{1+(A/2)(x^*)^2 \operatorname{tg}^2(\sqrt{2A}\kappa)}}. \qquad (20)$$

Введем обозначение для функции, обратной функции $y = x\,tg\,x$:

$$x = y\,tg\,y \Leftrightarrow y = \Psi(x),\quad x \in (-\infty; +\infty),\quad y \in (-\pi/2; \pi/2).$$

Отсюда и из формулы (20):

$$A=\frac{1}{2\kappa^2}\Psi^2\left(\frac{2m\kappa}{x^*\sqrt{1-m^2}}\right). \quad (21)$$

Для вычисления значений функции Ψ полезна следующая лемма [4]:

Лемма 1. *Функцию* Ψ *можно представить в виде:*

$$\Psi(x)=\sqrt{x\psi(-x)}, \quad (22)$$

где функция ψ *аналитическая, причем:*

$$\psi(x)=1+\frac{1}{3}x+\frac{4}{45}x^2+\frac{16}{945}x^3+\frac{256}{127575}x^4+\frac{1984}{33\cdot 127575}x^5+\ldots \quad (23)$$

формулы (22), (23) для вычисления функции $y=\Psi(x)$ удобны для x, близких к нулю и малопригодны для x, близких к ∞, то есть когда $\pi/2-y\ll 1$. В этом случае можно воспользоваться следующей леммой.

Лемма 2. *Функцию* Ψ *можно представить в виде:*

$$\Psi(x)=\varphi(1/x), \quad (24)$$

где функция φ *аналитическая, причем:*

$$\varphi(t)=\frac{\pi}{2}\left(1-t+t^2-\left(1-\frac{\pi^2}{12}\right)t^3+\left(1-\frac{17\pi^2}{24}\right)t^4-\ldots\right). \quad (25)$$

Доказательство. Сделаем замену переменной $x=1/t$ в уравнении $x=y\,tg\,y$. Продифференцируем по t уравнение $t\,y\,tg\,y=1$. После преобразований, с повторным использованием последнего уравнения, получим:

$$\left(1+t+t^2y^2\right)y'+y=0,\quad y(0)=\pi/2.$$

Представим решение этой задачи в виде степенного ряда:

$$\varphi(t)=\pi/2+\varphi_1t^1+\varphi_2t^2+\varphi_3t^3+\ldots$$

После подстановки этого выражения в предыдущее уравнение получим бесконечную последовательность рекуррентных соотношений:

$$\pi/2+a_1=0;\quad a_2+a_1=0;\quad a_3+a_2+\left(\pi^2/12\right)a_1=0;$$

$$a_4+a_3+\left(\pi^2/8\right)a_2+\left(\pi/4\right)a_1^2=0;$$

$$a_5+a_4+\left(3\pi^2/20\right)a_3+\left(3\pi/5\right)a_1a_2+a_1^3/5=0;\ldots$$

Отсюда следует (25).

Можно получить более простую приближенную формулу для функции $\varphi(x)$, когда величину $\pi/2-y$ можно считать настолько малой, что $tg(\pi/2-y)\approx\pi/2-y$.

Лемма 3. *Если* $tg(\pi/2-y)\approx\pi/2-y$, *то* $\varphi(t)=1/(1+t)$, $|t|<1$.

Доказательство. $$x=y\,tg\,y=\frac{y}{ctg\,y}=\frac{y}{tg(\pi/2-y)}\approx\frac{y}{\pi/2-y},$$

откуда:

$$y=\frac{\pi x}{2(1+x)}=\frac{\pi}{2(1+1/x)}=\frac{\pi}{2}\left(1-\frac{1}{x}+\frac{1}{x^2}-\frac{1}{x^3}+\ldots\right).$$

Из формул (21) и (22) следует выражение для вычисления параметра A через функцию Ψ, определенную в виде ряда формулой (23):

$$A=\frac{m}{\kappa x^*\sqrt{1-m^2}}\psi\left(-\frac{2m\kappa}{x^*\sqrt{1-m^2}}\right). \qquad (26)$$

Из формул (21) и (24) следует выражение для вычисления параметра A через функцию φ, определенную в виде ряда формулой (25):

$$A=\frac{1}{2\kappa^2}\Psi^2\left(\frac{2m\kappa}{x^*\sqrt{1-m^2}}\right)=\frac{1}{2\kappa^2}\varphi^2\left(\frac{x^*\sqrt{1-m^2}}{2m\kappa}\right). \qquad (27)$$

Вычисление скоростей смещений и линий тока. Из (8) следует уравнение для функции W:

$$\frac{W''(y)}{2W'(y)}=-\sqrt{A/2}\,\mathrm{tg}(\sqrt{2A}y).$$

Учитывая условие $v_y\big|_{y=0}=0$, получаем зависимость в каждой точке слоя величины скорости деформации в направлении внешнего усилия:

$$v_y=-\frac{v_\kappa\sin(\sqrt{2A}y)}{\sin(\sqrt{2A}\kappa)}.$$

Из гипотезы (1), условия несжимаемости (5) и следующего из симметрии условия $v_x\big|_{x=0}=0$ находится скорость деформации в направлении слоя:

$$v_x=\frac{v_\kappa\sqrt{2A}}{\sin(\sqrt{2A}\,\kappa)}x\cos(\sqrt{2A}y).$$

Линии тока являются интегральными кривыми дифференциального уравнения $\frac{dy}{dx}=\frac{v_y}{v_x}$, то есть уравнения $\frac{dy}{dx}=-\frac{\sin\left(\sqrt{2A}y\right)}{\sqrt{2A}\,x\cos\left(\sqrt{2A}y\right)}$. Интегрируя его, находим уравнения линий тока, проходящих через точку $\left(x_0;\gamma_0\right)$: $x\sin\left(\sqrt{2A}y\right)=x_0\sin\left(\sqrt{2A}y_0\right)$, где A вычисляется по формулам (26) и (27).

Библиографический список

1. Прандтль, Л. Примеры применения теоремы Г. Генки к равновесию пластических тел / Л. Прандтль // Теория пластичности / Под ред. Ю.Н. Работнова. – М.: Издательство иностр. литературы, 1948. – С. 102–113.

2. Качанов, Л.М. О напряженном состоянии пластической прослойки / Л.М. Качанов // Изв. АН СССР. Отд. техн. наук. Механика и машиностроение. – 1962. – № 5. – С. 63–67.

3. Остсемин, А.А. О сжатии пластического слоя двумя шероховатыми плитами / А.А. Остсемин, В.Л. Дильман // Проблемы прочности. – 1990. – № 7. – С. 107–113.

4. Дильман, В.Л. Математическое моделирование критических состояний мягких прослоек в неоднородных соединениях / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – 276 с.

5. Дильман, В.Л. Математические модели напряженного состояния неоднородных тонкостенных цилиндрических оболочек / В.Л. Дильман. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2007. – 202 с.

6. Дильман, В.Л. Напряженное состояние и прочность сварных швов труб большого диаметра / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Хим. и нефтегаз. машиностроение. – 1998. – № 4. – С. 16–20.

7. Дильман, В.Л. Напряженное состояние и статическая прочность пластичной прослойки при плоской деформации / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Проблемы машиностроения и надежности машин. – 2005. – № 4. – С. 38–48.

8. 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.

9. Дильман, В.Л. Об одной математической модели напряженного состояния пластического слоя при плоской деформации / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 6. – № 6. – С. 19–23.

10. Дильман, В.Л. О напряженно-деформированном состоянии при растяжении пластического слоя с двумя осями симметрии / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2001. – № 6. – С. 115–124.

11. Дильман, В.Л. Анализ напряженно-деформированного состояния неоднородной пластической полосы / В.Л. Дильман, А.И. Носачева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, механика, физика». – 2012. – Вып. 7. – № 34 (293). – С. 11–16.

12. 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.

13. 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.

14. Дильман, В.Л. Математическое моделирование критических состояний неоднородного слоя при плоской деформации / В.Л. Дильман, А.И. Носачева // Труды математического центра им. Н.И. Лобачевского. – Казань, 2013. – Т. 46. – С. 176–178.

15. Дильман, В.Л. О напряженно–деформированном состоянии пластического кольца при растяжении / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2002. – № 2. – С. 109–120.

16. Дильман, В.Л. Математические модели осесимметричного напряженного состояния при гипотезе разделения переменных для касательных напряжений / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина // Изв. Челябинского научного центра. – 2006. – Вып. 2 (32). – С. 1–4.

17. Дильман, В.Л. Математические модели напряженного состояния пластического слоя с сечением в форме кольцевого сектора / В.Л. Дильман, Т.В. Ерошкина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2006. – Вып. 7. – № 7 (62). – С. 13–20.

18. Дильман, В.Л. Прочность механически неоднородных соединений стержней арматуры / В.Л. Дильман, А.А. Остсемин, Т.В. Ерошкина // Вестник машиностроения. – 2008. – № 9. – С. 13–17.

19. 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.

20. 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. 12–22.

21. 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.

22. 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.

К содержанию

УДК 519.865 + 338.27

ПРОГНОЗИРОВНИЕ ДИНАМИКИ СПРОСА ИННОВАЦИОННОГО ТОВАРА

Д.А. Дрозин

Предлагается новая экономико-математическая модель прогнозирования динамики спроса инновационного товара, основанная на выделении этапов реализации инновационного товара в соответствии с поступлением информации к потенциальным покупателям. Модель учитывает особенности коммерциализации результатов инновационной деятельности, что в результате позволяет уменьшить ошибки прогноза динамики объема реализации инновационного товара и, следовательно, уменьшить затраты, связанные с переоценкой или недооценкой спроса.

Ключевые слова: прогнозирование спроса, реализация инновационного товара, коммерциализация инноваций.

Экономический рост нашего государства связан с реализацией модели инновационного развития. Производство инновационного товара в настоящее время особенно актуально и в связи с известной политической обстановкой и серьезными задачами импортозамещения. К сожалению, этап коммерциализации таких товаров является слабым звеном в инновационном процессе. Следует отметить, что ввиду существенных особенностей инновационного товара, обладающего принципиально новыми свойствами для потребителя, имеет место особая динамика спроса. Несмотря на наличие серьезных теоретических разработок по реализации инноваций требуется развитие методов и моделей прогнозирования и планирования объемов его производства и реализации.

В работах [1–7] была разработана экономико-математическая модель, учитывающая особенности реализации инновационного товара, позволяющая, прогнозировать динамику спроса инновационного товара.

Под инновационным товаром понимаем результат инновационной деятельности, обладающий уникальными характеристиками, распространение информации о которых имеет свою особую динамику на рынке товаров и услуг. Под инновационной деятельностью мы понимаем вид деятельности, связанный с трансформацией идей (обычно результатов научных исследований и разработок, либо иных научно-технических достижений) в новый или усовершенствованный продукт, внедренный на рынке, в новый или усовершенствованный технологический процесс, использованный в практической деятельности, либо новый подход к социальным услугам.

Процесс продаж инновационного товара обладает рядом существенных особенностей. В первый момент поступления инновационного товара на рынок сведениями о нем обладает малая группа потенциальных покупателей.

Важное значение принимает время принятия решения о покупке инновационного товара. В основе исследуемой динамики спроса находится процесс распространения сведений об инновационном товаре и соответствующие реакции потенциальных покупателей.

Выделены четыре этапа в рамках рассматриваемого подхода. На первом этапе, потенциальный покупатель получает сведения об инновационном товаре либо через СМИ, либо через межличностное общение. На втором этапе, потенциальный покупатель оценивает возможность его покупки в зависимости от платежеспособности. На третьем этапе потенциальный покупатель принимает решение о покупке товара, которое зависит от его психологического типа и описывается как некоторое запаздывание от момента определения возможности покупки инновационного товара до момента его покупки [5]. На четвертом этапе потенциальный покупатель приобретает инновационный товар.

На основе этапов принятия решения о покупке потенциальными покупателями формируются этапы жизненного цикла инновационного товара, определяющие в конечном итоге динамику объема его реализации [4–6]. Количество покупок инновационного товара к заданному моменту времени T определяется выражением

$$M(T) = \iint\limits_{D(T)} \varphi(t) \cdot \chi(P) \cdot f(\tau) dt d\tau , \qquad (1)$$

где $M(T)$ – количество покупок инновационного товара к заданному моменту времени T; $D(T)$ – область продаж, заключенная между осями t – время и τ – запаздывание и прямой $\tau = T - t$; $\varphi(t)$ – число потенциальных покупателей, получающих сведения о новом товаре в единицу времени; $\chi(P)$ – доля потенциальных покупателей, обладающих сведениями о новом товаре и готовым купить его по текущей цене или ниже; $f(\tau)$ – доля потенциальных покупателей, которые купят товар через время τ после того, как получат сведения о нем.

На рисунке по горизонтальной оси откладываются, периоды времени (например, недели), начиная с первого момента выпуска инновационного товара на рынок. В каждый период некоторое количество потенциальных покупателей получает сведения об инновационном товаре. Из этого количества выделяется доля потенциальных покупателей, которые готовы приобрести товар по текущей цене. Однако не все эти потенциальные покупатели в этот же период времени совершат покупку. По вертикальной оси откладывается время (запаздывание) на принятие решения о покупке товара.

Так, в первый период времени, когда потенциальные покупатели получили сведения об инновационном товаре, не все они в тот же период времени совершат покупку. Приобретут товар только $M(1,0)$ количество потенциальных покупателей, во второй период времени совершат покупку инновационного товара из тех потенциальных покупателей, которые получили

сведения о нем в первый период, только *M(1,1)* количество потенциальных покупателей и т.д. вплоть до заданного периода времени. Надо заметить, что данный процесс происходит в каждый период времени. Адекватность разработанной модели (1) подтверждена на данных жизненного цикла спроса инновационных товара сотового телефона Nokia E71.

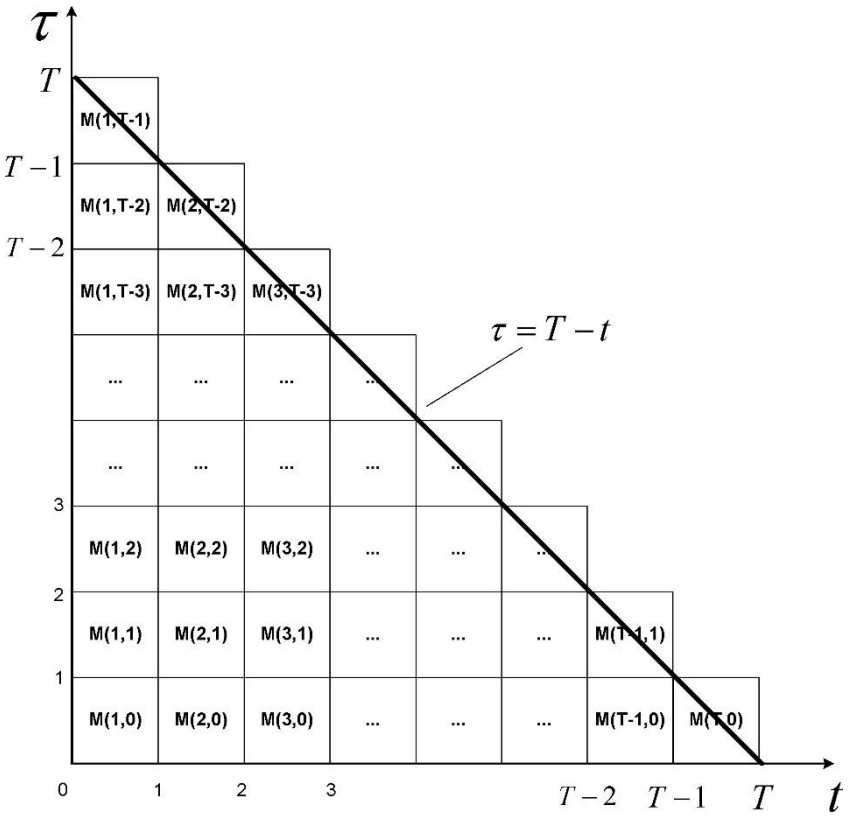


Схема продаж (в квадратах отмечается количество продаж *M(t, τ))*

Разработанная экономико-математическая модель прогнозирования динамики реализации инновационного товара с учетом этапов принятия решения о покупке потенциальным покупателем, позволяет уменьшить ошибки прогноза динамики объема реализации инновационного товара, что в свою очередь уменьшает затраты на переоценку или недооценку спроса. В результате увеличивается эффективность самого предприятия. Эта модель может быть использована с одной стороны, при целенаправленном формировании спроса на рынке инноваций, с другой – при управлении объемом производства инновационного товара.

Библиографический список

1. Дрозин, Д.А. Управление процессом продаж: модель рынка одного вида товара с учетом конкуренции / Д.А. Дрозин, В.И. Ширяев // Проблемы теории и практики управления. – 2009. – № 1. – С. 106–114.

2. Дрозин, Д.А. Система управления розничными продажами одного вида товара, учитывающая конкурентоспособность магазинов / Д.А. Дрозин, В.И. Ширяев // Программные продукты и системы. – 2009. – № 1. – С. 56–58.

3. Баев, И.А. Моделирование процессов освоения инновации на конкурентном рынке / И.А. Баев, Д.А. Дрозин // Вестник ЮУрГУ. Серия «Экономика и менеджмент». – 2012. – Вып. 23. – № 30(289). – С. 47–49.

4. Баев, И.А. Комплексная модель распространения информации об инновационном товаре / И.А. Баев, Д.А. Дрозин // Экономика и математические методы. – 2014. – Т. 50. – № 1. – С. 91–100.

5. Баев, И.А. Математическая модель динамики продаж инновационного товара / И.А. Баев, Д.А. Дрозин // Инновации. – 2014. – № 2. – С. 11–14.

6. Баев, И.А. Динамика покупательского спроса инновационного товара / И.А. Баев, Д.А. Дрозин // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Экономика и менеджмент». – 2014. – Т. 8. – № 2. – С. 80–85.

7. Баев, И.А. Управление запасами в процессе реализации инновационного товара / И.А. Баев, Д.А. Дрозин // Вестник УрФУ. Серия: Экономика и управление. – 2014. – № 4. – С. 119–125.

К содержанию

УДК 517.956.4:532.59 + 532.59

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ЖИДКОЙ ПЛЕНКИ

Л.А. Прокудина

Представлены математическая модель течения неизотермической жидкой пленки при умеренных числах Рейнольдса, а также нелинейное параболическое уравнение для амплитуды огибающей волнового пакета. Рассчитаны области неустойчивого течения вертикальной жидкой пленки, её волновые характеристики. Численно исследовано влияние термокапиллярных сил на состояние свободной поверхности жидкой пленки.

Ключевые слова: жидкая пленка; волновые характеристики; нелинейное параболическое уравнение.

Введение. Исследование тонких слоев вязких жидкостей (жидких пленок), сочетающих малую толщину и большую поверхность контакта, связано с реализацией их течений в тепломассообменных аппаратах, например, теплоэнергетической, химической, пищевой, фармацевтической промышленности [1, 2]. Выпускаемая продукция чувствительна к высоким температурам, способна пригорать, полимеризоваться при длительном контакте с поверхностью нагрева (отдельные виды пластмасс, красителей, соки, растительные экстракты, молочная продукция, гормоны, антибиотики, и др.).

Применение пленочных аппаратов позволяет решать эти проблемы. Вследствие кратковременного контакта с поверхностью нагрева предотвращается термическое разложение, обеспечиваются необходимые свойства и экологическая чистота выпускаемой продукции. На режимы течения жидких пленок влияют различные физико-химические факторы. Применение добавок поверхностно-активных веществ (ПАВ) качественно меняет характер течения жидких пленок. Градиенты температуры и концентрации вызывают неоднородность поверхностного натяжения и появление градиентов поверхностного натяжения, в результате чего на межфазовой поверхности возникают силы (термокапиллярные, концетрационнокапиллярные), природа которых определяется реальным физическим процессом.

Математическая модель неизотермической жидкой пленки. Рассмотрим течение тонкого слоя вязкой несжимаемой жидкости (жидкой пленки) толщиной δ под действием силы тяжести по твердой наклонной плоскости в прямоугольной системе координат *OXYZ*. Математическая модель течения трехмерной неизотермической жидкой пленки толщиной δ представляет собой систему уравнений Навье–Стокса и уравнения неразрывности с граничными условиями, учитывающими влияние процессов тепломассопереноса, и имеет вид [3, 4]:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_+}{\partial t_+} + u_+\dfrac{\partial u_+}{\partial x_+} + v_+\dfrac{\partial u_+}{\partial y_+} + w_+\dfrac{\partial u_+}{\partial z_+} = -\dfrac{\partial P_+}{\partial x_+} + F_x + \dfrac{1}{\mathrm{Re}}\left(\dfrac{\partial^2 u_+}{\partial x_+^2} + \dfrac{\partial^2 u_+}{\partial y_+^2} + \dfrac{\partial^2 u_+}{\partial z_+^2}\right), \\ \dfrac{\partial v_+}{\partial t_+} + u_+\dfrac{\partial v_+}{\partial x_+} + v_+\dfrac{\partial v_+}{\partial y_+} + w_+\dfrac{\partial v_+}{\partial z_+} = -\dfrac{\partial P_+}{\partial y_+} + F_y + \dfrac{1}{\mathrm{Re}}\left(\dfrac{\partial^2 v_+}{\partial x_+^2} + \dfrac{\partial^2 v_+}{\partial y_+^2} + \dfrac{\partial^2 v_+}{\partial z_+^2}\right), \\ \dfrac{\partial w_+}{\partial t_+} + u_+\dfrac{\partial w_+}{\partial x_+} + v_+\dfrac{\partial w_+}{\partial y_+} + w_+\dfrac{\partial w_+}{\partial z_+} = -\dfrac{\partial P_+}{\partial z_+} + F_z + \dfrac{1}{\mathrm{Re}}\left(\dfrac{\partial^2 w_+}{\partial x_+^2} + \dfrac{\partial^2 w_+}{\partial y_+^2} + \dfrac{\partial^2 w_+}{\partial z_+^2}\right), \\ \dfrac{\partial u_+}{\partial x_+} + \dfrac{\partial v_+}{\partial y_+} + \dfrac{\partial w_+}{\partial z_+} = 0, \end{cases} \quad (1)$$

$$y = 0: \quad u_+ = w_+ = 0, \qquad v_+ = V_0; \quad (2)$$

$$y = \delta: \quad \frac{1}{\mathrm{Re}}\left[2\frac{\partial u_+}{\partial x_+}\frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} - 2\frac{\partial v_+}{\partial y_+}\frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} - \left(\frac{\partial v_+}{\partial x_+} + \frac{\partial u_+}{\partial y_+}\right) + \frac{\partial \delta_+}{\partial z_+}\left(\frac{\partial u_+}{\partial z_+} + \frac{\partial w_+}{\partial x_+}\right)\right] + M\frac{\partial \delta_+}{\partial x_+} + N\left(\frac{\partial^2 u_+}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2 w_+}{\partial x_+ \partial z_+}\right) + \tau_x = 0; \quad (3)$$

$$\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[2\frac{\partial w_+}{\partial z_+}\frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} - 2\frac{\partial v_+}{\partial y_+}\frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} - \left(\frac{\partial w_+}{\partial y_+} + \frac{\partial v_+}{\partial z_+}\right) + \frac{\partial \delta_+}{\partial x_+}\left(\frac{\partial u_+}{\partial z_+} + \frac{\partial w_+}{\partial x_+}\right)\right] + M\frac{\partial \delta_+}{\partial z_+} + N\left(\frac{\partial^2 w_+}{\partial z_+^2} + \frac{\partial^2 u_+}{\partial x_+ \partial z_+}\right) + \tau_z = 0; \quad (4)$$

$$P_+ = \frac{2}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial v_+}{\partial y_+} - \frac{\partial \delta_+}{\partial x_+}\left(\frac{\partial u_+}{\partial y_+} + \frac{\partial v_+}{\partial x_+}\right) - \frac{\partial \delta_+}{\partial z_+}\left(\frac{\partial w_+}{\partial y_+} + \frac{\partial v_+}{\partial z_+}\right)\right] - \sigma_+\left(\frac{\partial^2 \delta_+}{\partial x_+^2} + \frac{\partial^2 \delta_+}{\partial z_+^2}\right) + \\ + P_0 - \mathrm{sign}\,\Delta T \frac{\frac{\rho_1}{\rho_2} - 1}{\left(\mathrm{Re}\cdot \mathrm{Pr}\cdot \mathrm{Ku}\right)^2}\frac{1}{\delta^2}; \quad (5)$$

$$\frac{\partial \delta}{\partial t_+} = v_+ - u_+\frac{\partial \delta}{\partial x_+} - w_+\frac{\partial \delta}{\partial z_+} + \frac{1}{\mathrm{Re}\cdot \mathrm{Pr}\cdot \mathrm{Ku}}\frac{1}{\delta} \quad (6)$$

Безразмерные величины в (1–6): $u_+ = \frac{u}{u_0}$, $v_+ = \frac{v}{u_0}$, $w_+ = \frac{w}{u_0}$ – проекции скорости на соответствующие оси координат; $t_+ = \frac{tu_0}{\delta_0}$ – время; $x_+ = \frac{x}{\delta_0}$, $y_+ = \frac{y}{\delta_0}$, $z_+ = \frac{z}{\delta_0}$ – переменные; $\delta_+ = \frac{\delta}{\delta_0}$ – толщина жидкой пленки; $\mathrm{Re} = \frac{u_0\delta_0\rho}{\mu}$ – число Рейнольдса; $F_x = \frac{g_x\delta_0}{u_0^2}$, $F_y = -\frac{g_y\delta_0}{u_0^2}$, $F_z = \frac{g_z\delta_0}{u_0^2}$ – проекции числа Фруда на соответствующие оси координат; $P_+ = \frac{P}{\rho u_0^2}$ – давление; $N = \frac{k+e}{\rho\delta_0^2 u_0}$ – параметр поверхностной вязкости; $\bar{\tau}_x = \frac{\tau_x}{\rho u_0^2}$, $\bar{\tau}_z = \frac{\tau_z}{\rho u_0^2}$ – проекции касательного напряжения; $M = M_T + M_K$ – параметр Марангони: $M_T = \frac{\partial\sigma}{\partial T^0}\left(\frac{\partial T^0}{\partial y}\right)_{y=\delta}\frac{1}{\rho u_0^2}$, $M_K = \frac{\partial\sigma}{\partial K}\frac{\partial K}{\partial\delta}\frac{1}{\rho u_0^2}$; $\mathrm{Pr} = \frac{\rho c_p \upsilon}{\lambda}$ – число Прандтля; $\mathrm{Ku} = \frac{r'}{c_p\Delta T}$ – число фазового перехода; $\sigma_+ = \frac{\sigma}{\rho u_0^2\delta_0}$ – 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 $\mathrm{sign}\,\Delta T = -1$.

Нелинейное параболическое уравнение. Поставленная задача (1)–(6) решена методами возмущений и получено уравнение для состояния свободной поверхности жидкой пленки[4]. На поверхности жидкой пленки развиваются возмущения, принадлежащие непрерывной полосе волновых чисел (волновой пакет):

$$\psi = \int_{k_{0x}-\Delta k_x}^{k_{0x}+\Delta k_x}\int_{k_{0z}-\Delta k_z}^{k_{0z}+\Delta k_z} F\left(k_\Sigma\right)\exp\left\{i\left(k_x x + k_z z - \omega t\right)\right\}dk_x dk_z = A\exp\left\{i\left(k_{0x}x + k_{0z}z - \omega\left(k_0\right)t\right)\right\},$$

где k_0 – центр волнового пакета; $\omega = \omega_r + i\omega_i$; $F\left(k_\Sigma\right)$ – Фурье-компонента разложения; k_Σ – волновой вектор возмущений, а k_x и k_z – его проекции на оси *OX* и *OZ* соответственно.

Амплитуда огибающей волнового пакета задается в виде:

$$A = \int_{-\Delta k_x}^{\Delta k_x}\int_{-\Delta k_z}^{\Delta k_z} F\left(k_{0\Sigma} + \delta k_\Sigma\right)\exp\left\{ i\left(\delta k_x x + \delta k_z z - \left(\frac{\partial \omega_r}{\partial k_x}\right)_{k_0} \delta k_x t - \left(\frac{\partial \omega_r}{\partial k_z}\right)_{k_0} \delta k_z t - \right.\right.$$

$$\left.\left. -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \omega_r}{\partial k_x^2}\right)_{k_0} \left(\delta k_x\right)^2 t - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 \omega_r}{\partial k_z^2}\right)_{k_0} \left(\delta k_z\right)^2 t - \left(\frac{\partial^2 \omega_r}{\partial k_x \partial k_z}\right)_{k_0} \delta k_x \delta k_z t - \varepsilon^2 \bar{\omega}_i t \right)\right\} d\delta k_x d\delta k_z + o\left(\varepsilon^3\right),$$

при следующих допущениях: Δk_Σ – ширина полосы волновых чисел $\Delta k_\Sigma = o\left(\varepsilon\right)$; инкремент $\omega_i = \varepsilon^2 \bar{\omega}_i = o\left(\varepsilon^2\right)$; ε – малый параметр.

Уравнение для амплитуды A огибающей волнового пакета – нелинейное параболическое уравнение вида:

$$\frac{\partial A}{\partial t_2} + \frac{i}{\varepsilon}\frac{\partial \omega_i}{\partial k_x}\frac{\partial A}{\partial x_1} + \frac{i}{\varepsilon}\frac{\partial \omega_i}{\partial k_z}\frac{\partial A}{\partial z_1} - \frac{i}{2}\left(\frac{\partial^2 \omega_r}{\partial k_x^2} + i\frac{\partial^2 \omega_i}{\partial k_x^2}\right)\frac{\partial^2 A}{\partial x_1^2} -$$

$$-\frac{i}{2}\left(\frac{\partial^2 \omega_r}{\partial k_z^2} + i\frac{\partial^2 \omega_i}{\partial k_z^2}\right)\frac{\partial^2 A}{\partial z_1^2} - i\left(\frac{\partial^2 \omega_r}{\partial k_x \partial k_z} + i\frac{\partial^2 \omega_i}{\partial k_x \partial k_z}\right)\frac{\partial^2 A}{\partial x_1 \partial z_1} = \bar{\omega}_i A - \tag{7}$$

$$-\left(\beta_1 + i\beta_2\right)\left|A\right|^2 A.$$

Нелинейное параболическое уравнение (7) относится к одной из базовых моделей нелинейных сред (типа модели Гинзбурга–Ландау). Коэффициенты β_1 и β_2 при нелинейном члене уравнения (7) характеризуют нелинейное затухание возмущений (β_1) и зависимость фазы от амплитуды (β_2). Первые и вторые производные в (7) рассчитываются с помощью дисперсионного уравнения:

$$\omega\left(a_7 k_x + a_9 k_z + i\right) + a_1 k_x^4 + a_2 k_x^2 k_z^2 + a_3 k_z^4 - a_4 i k_x^3 - a_5 i k_z^3 - -a_6 k_x^2 - a_8 k_x k_z -$$

$$-a_{10} k_z^2 + a_{11} i k_x + a_{12} i k_z - \frac{1}{\mathrm{Re}\cdot \mathrm{Pr}\cdot \mathrm{Ku}} = 0, \tag{8}$$

где $\omega = \omega_r + i\omega_i$, ω_r – частота, ω_i – инкремент. Коэффициенты дисперсионного уравнения (8) включают физико-химические факторы модели (1)–(6) и имеют вид: $a_1 = -\frac{\mathrm{Re}\,\sigma}{3}$, $a_2 = 2a_1$, $a_3 = a_1$, $a_4 = -\frac{\mathrm{Re}^2 F_x N}{2}$, $a_5 = -\frac{\mathrm{Re}^2 F_z N}{2}$, $a_6 = a_6^* + a_6^1$,

$$a_6^* = -\frac{\mathrm{Re}\,F_y}{3} - \frac{\mathrm{Re}\,M}{2} + \frac{3}{40}\mathrm{Re}^3 F_x\left(\tau_x + F_x\right),\ a_6^1 = \frac{2}{3}\mathrm{Re}\cdot\mathrm{sign}\,\Delta T\,\frac{C}{\left(\mathrm{Re}\cdot\mathrm{Pr}\cdot\mathrm{Ku}\right)^2},$$

$$a_7 = \frac{5}{24}\mathrm{Re}^2 F_x,\ a_8 = \frac{3}{20}\mathrm{Re}^3 F_x F_z + \frac{3}{40}\mathrm{Re}^3\left(F_z\tau_x + F_x\tau_z\right),\ a_9 = \frac{5}{24}\mathrm{Re}^2 F_z,$$

$$a_{10} = a_{10}^* + a_{10}^1,\ a_{10}^* = -\frac{\mathrm{Re}\,F_y}{3} - \frac{\mathrm{Re}\,M}{2} + \frac{3}{40}\mathrm{Re}^3 F_z\left(\tau_z + F_z\right),$$

$$a_{10}^1 = \frac{2}{3}\mathrm{Re}\cdot\mathrm{sign}\,\Delta T\,\frac{C}{\left(\mathrm{Re}\cdot\mathrm{Pr}\cdot\mathrm{Ku}\right)^2},\ a_{11} = -\mathrm{Re}\,F_x - \mathrm{Re}\,\tau_x,\ a_{12} = -\mathrm{Re}\,F_z - \mathrm{Re}\,\tau_z.$$

Вычислительные эксперименты. Численно исследовано развитие возмущений в неизотермических жидких пленках для чисел Рейнольдса $\mathrm{Re} \le 20$. Рассчитаны волновые характеристики вертикальной жидкой пленки (рис. 1), определены её области неустойчивости (рис. 2).

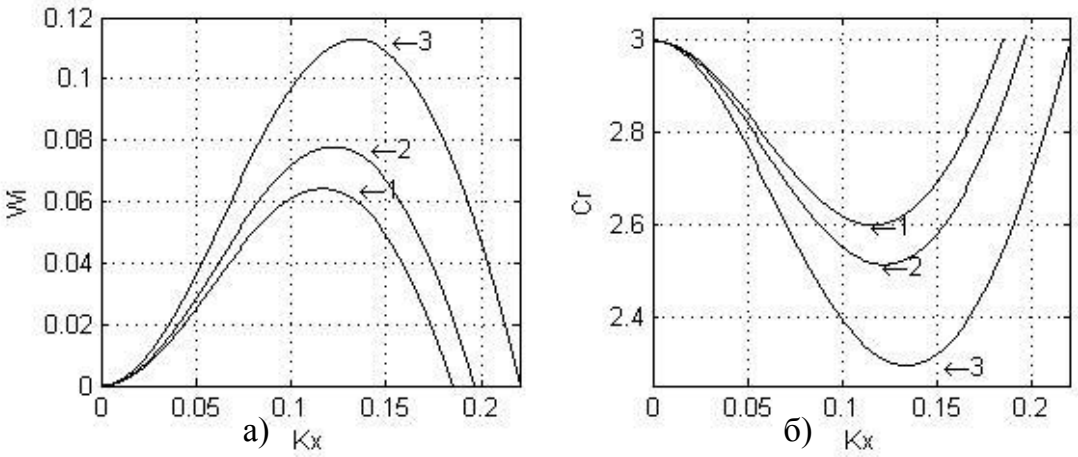


Рис. 1. Зависимость инкремента (а) и фазовой скорости (б) от волнового числа для Re=5: 1 – M=0; 2 – M=0.3; 3 – M=1;

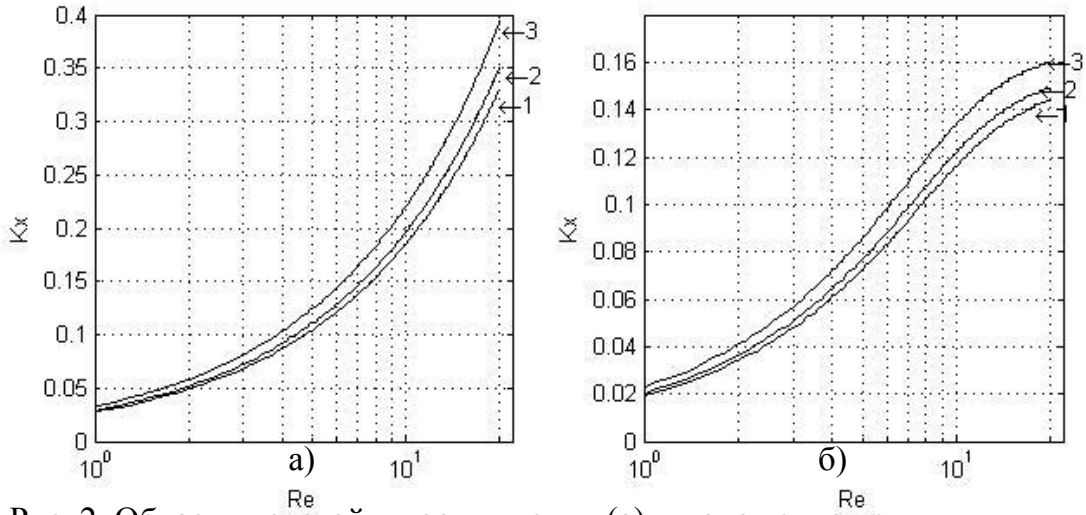


Рис. 2. Области неустойчивости пленки (а) и положение кривых максимального инкремента (б): 1 – M=0; 2 – M=0.3; 3 – M=1

Состояние свободной поверхности неизотермической жидкой пленки под влиянием градиентов температуры, которые возникают при течении жидкой пленки по нагретой поверхности, представлено на рис. 3. В этом случае течение пленки сопровождается увеличением скорости роста возмущений и расширением области неустойчивости. При больших градиентах температуры термокапиллярные силы способны разрушить жидкую пленку, что может привести к местному перегреву охлаждаемой пленкой стенки и создать аварийную ситуацию при работе тепломассообменного аппарата. Процесс развития возмущений во времени, моделирующий разрушение пленки при значительных градиентах температуры (параметр $M > 0$), представлен на рис. 3.

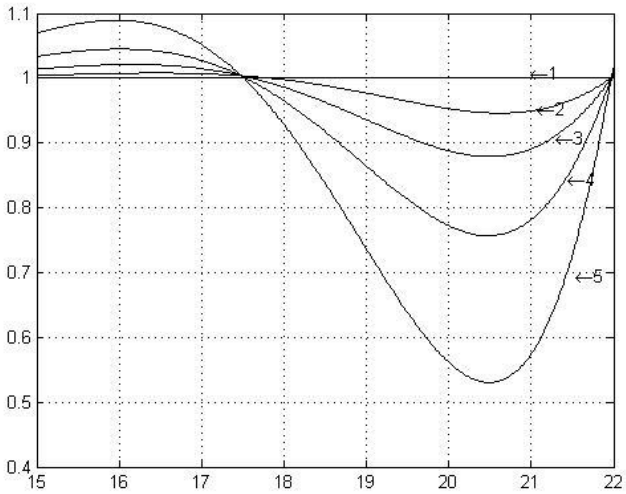


Рис. 3. Состояния поверхности вертикальной жидкой пленки
для Re=5, M=1: 1 – t=0; 2 – t=0,0125;3 – t=0,025; 4 – t=0,0375; 5 – t=0,05

Численное моделирование нелинейного развития во времени возмущений на свободной поверхности жидкой пленки с учетом различных физико-химических факторов способствует изучению влияния этих факторов на развитие возмущений, а также разработке методик контроля и управления различными режимами течения жидких пленок.

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. Prokudina, L.A. Nonlinear evolution of perturbations in a thin fluid layer during wave formation / L.A. Prokudina // J. Exp. And Theor. Physics. 2014. V. 118. N 3. Pp. 480–488. DOI: 10.1134/S1063776114020046.

К содержанию

УДК 517.53/.55 + 517.5

ОБ ЭФФЕКТИВНОМ КРИТЕРИИ УСТОЙЧИВОСТИ ЧАСТНЫХ ИНДЕКСОВ ТРЕУГОЛЬНОЙ МАТРИЦЫ-ФУНКЦИИ ВТОРОГО ПОРЯДКА

В.М. Адуков, А.С. Фадеева

В докладе изучается устойчивость задачи факторизации Винера – Хопфа для треугольной матрицы-функции второго порядка при малых возмущениях, сохраняющих треугольную структуру матрицы. Получен эффективно проверяемый критерий устойчивости частных индексов. Результаты могут быть использованы для разработки устойчивых алгоритмов приближенного решения задачи факторизации.

Ключевые слова: краевые задачи для аналитических функций, задача факторизации Винера – Хопфа, матричная краевая задача Римана, частные индексы.

В теории краевой задачи Римана для вектора классическим результатом является теорема Гохберга – Крейна – Боярского [1] об устойчивости частных индексов: правые частные индексы $\rho_1 \le \ldots \le \rho_n$ матрицы-функции $A(t)$ порядка n устойчивы тогда и только тогда, когда $\rho_n - \rho_1 \le 1$.

Поскольку до настоящего времени в общем случае нет способов вычисления частных индексов, эта теорема не может быть использована для эффективной проверки устойчивости. Кроме того, для приложений важно иметь критерий устойчивости не только для произвольных малых возмущений матрицы-функции, но и для тех из них, которые сохраняют структуру данной матрицы-функции. В докладе получен такой эффективный критерий для класса треугольных матриц-функций второго порядка.

Пусть $A(t)$ – треугольная обратимая матрица-функция вида:

$$A(t) = \begin{pmatrix} a_{11}(t) & 0 \\ a_{21}(t) & a_{22}(t) \end{pmatrix},$$

с элементами из алгебры Винера W. Построим факторизацию Винера – Хопфа ее диагональных элементов:

$$a_{11}(t) = a_{11}^{-}(t)t^{\nu_1}a_{11}^{+}(t),\ a_{22}(t) = a_{22}^{-}(t)t^{\nu_2}a_{22}^{+}(t);$$

функцию $\dfrac{t^{-\nu_1}a_{21}(t)}{a_{22}^{-}(t)a_{11}^{+}(t)}$ разложим в ряд Фурье на $|t|=1$:

$$\frac{t^{-\nu_1} a_{21}(t)}{a_{22}^{-}(t) a_{11}^{+}(t)} = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} b_j t^j .$$

Теорема. *Если достаточно малое возмущение* $A(t)$ *сохраняет ее треугольную структуру, то при* $\nu = \nu_2 - \nu_1 \le 1$ *матрица-функция* $A(t)$ *имеет устойчивые индексы* $\rho_1 = \nu_1,\ \rho_2 = \nu_2$.

При $\nu \ge 2$ *индексы* $A(t)$ *устойчивы тогда и только тогда, когда теплицева матрица*

$$T = \begin{pmatrix} b_l & b_{l-1} & \cdots & b_1 \\ b_{l+1} & b_l & \cdots & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{\nu-1} & b_{\nu-2} & \cdots & b_{\nu-l} \end{pmatrix},$$

имеет полный ранг l. *Здесь* $l = \left[\frac{\nu}{2}\right] - 1$ *и* $\left[\frac{\nu}{2}\right]$ *– целая часть числа* $\frac{\nu}{2}$. *При выполнении этого условия* $\rho_1 = \nu_1 + l,\ \rho_2 = \nu_2 - l$.

Доказательство теоремы основано на явных формулах для частных индексов, полученных в [2]. Отметим, что критерий устойчивости остается в силе для любых достаточно малых возмущений $A(t)$.

Библиографический список

1. Мусхелишвили, Н.И. Сингулярные интегральные уравнения. Граничные задачи теории функций и некоторые их приложения к математической физике / Н.И. Мусхелишвили. – М.: Наука, 1968. – 511 с.

2. Адуков, В.М. О классах матриц-функций, допускающих явное решение задачи факторизации Винера – Хопфа / В.М. Адуков // Известия Челябинского научного центра. – 2008. – Вып. 3(41). – С. 12–17.

К содержанию

УДК 517.968.21 + 544:517.968

РЕШЕНИЕ ОДНОЙ ЗАДАЧИ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ СИСТЕМ

Н.А. Евдокимова

В статье изучается возможность применения обратных методов решения некорректной задачи восстановления ориентационной функции распределения частиц. При решении данной задачи использована программа решения двумерного интегрального уравнения Фредгольма первого рода для линейного случая, реализованная на многопроцессорных системах.

Ключевые слова: ориентационная функция распределения частиц, двумерное интегральное уравнение Фредгольма первого рода, функционал Тихонова, регуляризирующий алгоритм, параметр регуляризации, распараллеливание.

Многие задачи физической химии сводятся к решению двумерных или трехмерных уравнений Фредгольма 1-го рода. Одной из них является задача восстановления ориентационной функции распределения частиц. Это обусловлено тем, что определение ориентационного распределение частиц в таких частично упорядоченных системах как растянутые полимеры, жидкие кристаллы, пленки Ленгмюра-Блоджетт, синтетические и биологические мембраны является важной проблемой физической химии.

Ориентационная функция распределения частиц (ОФР) $\rho(\alpha,\beta,\gamma)$, показывающая долю частиц, ориентированных в угловых интервалах $\alpha+d\alpha$, $\beta+d\beta$, $\gamma+d\gamma$ (α,β,γ – углы Эйлера, связывающие систему координат отдельной частицы с системой координат образца), является наиболее точной характеристикой упорядоченности молекул. Одним из эффективных методов определять ОФР частично ориентированных молекул является метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).

Для однозначного определения ориентационной функции распределения парамагнитных частиц в образце необходимо одновременно анализировать несколько спектров ЭПР, зарегистрированных при различных положениях изучаемого образца относительно магнитного поля. Интенсивность резонансного сигнала в каждой точке спектра $\boldsymbol{H}$ определяется следующим образом:

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

где $\rho(\beta,\gamma)$ – ориентационная функция распределения – неизвестная функция, которую требуется найти, $I(H,\varphi)$ – интенсивность резонансного сигнала – известная функция, которую получают посредством эксперимента, $F(H,g,A,h)$ – форма индивидуальной резонансной линии (задается из теоретических соображений), $g_{эфф}$ и $a_{эфф}$ – эффективные значения g-фактора и константы СТВ соответственно, h – значение ширины индивидуальной резонансной линии (расстояние между точками максимального наклона).

В данном случае при решении интегрального уравнения (1) возникает необходимость [1] минимизировать регуляризирующий функционал Тихонова:

$$M^{\alpha}[\rho]=\int_{H_1}^{H_2}\int_{\varphi_1}^{\varphi_2} dH\,d\phi\left\{\int_{o}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}\hat{F}(H,\phi,\beta,\gamma)\,\rho(\beta,\gamma)\cdot\sin\beta\,d\beta\,d\gamma-I(H,\varphi)\right\}^2+$$

$$+\alpha\Omega[\rho],$$

конечно-разностная аппроксимация которого дает возможность применения многопроцессорных систем. Задачу можно распараллелить, т.е. переписать программу таким образом, чтобы независимые части программы выполнялись на разных процессорах [2].

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

Разрабатывается программа – минимизатор, предназначенная для поиска значений варьируемых параметров, при которых отклонение рассчитанных спектров от экспериментальных минимально в случае, когда интенсивность резонансного сигнала в каждой точке спектра ***H*** определяется следующим образом:

$$I(H,\theta,\varphi)=\int_{0}^{2\pi}\int_{0}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}F(H,g,A,h)\cdot\rho(\alpha,\beta,\gamma)\cdot\sin\beta\,d\alpha\,d\beta\,d\gamma\,.$$

Библиографический список

1. Тихонов, А.Н. О регуляризации некорректно поставленных задач / А.Н. Тихонов // Докл. АН СССР. – 1963. – Т. 153. – № 1. – С. 55–59.

2. Евдокимова, Н.А. Восстановление ориентационной функции распределения частиц / Н.А. Евдокимова, Д.В. Лукьяненко, А.Г. Ягола // Вестник ЮУрГУ. – 2012. – № 4(299). – С. 169–173.

К содержанию

УДК 517.927.21

ОБРАЩЕНИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ОПЕРАТОРА С РАСПРЕДЕЛЕННЫМИ ДАННЫМИ

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

Исследованы возможность построения функции Грина 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; функция Грина; 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. Задачи, возникающие при этом, могут быть условно разделены на две группы – задачи восстановления сигнала и задачи анализа динамической погрешности.

Первая из упомянутых задач – определение входного сигнала, искаженного средствами измерений, представляет собой обратную задачу теории измерений, которая может быть сформулирована как задача решения операторного уравнения $Af(t) = x(t)$ относительно функции $f(t)$ при неточно заданных операторе A и правой части $x(t)$. В важном для приложений случае, когда функции $f(t)$ и $x(t)$ связаны дифференциальным соотношением $L[x(t)] = f(t)$ (здесь $L[.]$ – дифференциальный оператор, порожденный краевыми условиями) обращение задачи приводит к интегральному уравнению первого рода (Вольтерра или Фредгольма – в зависимости от постановки задачи).

Постановка задачи. Входной сигнал $f(t)$ первичного преобразователя (датчика) недоступен прямому наблюдению и регистрации и восстанавливается по наблюдениям за выходными показателями $x(t)$ измерительных приборов. Наблюдаемый сигнал $x(t)$ является решением краевой задачи *с распределенными данными*:

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

где функции $g_i(t), i = 1,2,\ldots,n,$ будем предполагать линейно независимыми, а коэффициенты уравнения – непрерывными на отрезке $[a;b]$. Пусть

$\varphi_i(t), i = 1,2,..., n$ – фундаментальная система решений однородного уравнения $L(x) = 0$. Если выполнено условие $\det(U_j(\varphi_i)) \neq 0$, задача (1) однозначно разрешима и задача восстановления $f(t)$ по экспериментальным данным $x(t)$ может быть поставлена как задача решения интегрального уравнения:

$$\int_a^b G(t,\tau) f(\tau) d\tau = \tilde{x}(t), \qquad (2)$$

где $G(t,\tau)$ – функция Грина краевой задачи (1), $\tilde{x}(t)$ – «исправленный» наблюдаемый сигнал, даваемый соотношением:

$$\tilde{x}(t) = x(t) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot \varphi_i(t) + \int_a^b G(t,\tau) \cdot L(\sum \alpha_i \varphi_i(\tau)) d\tau .$$

Очевидно, в силу линейности задачи (1), её однозначная разрешимость эквивалентна однозначной разрешимости соответствую-щей однородной задачи:

$$L(x) = 0, U_j(x) = 0 .$$

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:

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

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 [1].

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

Функция Грина. Как уже отмечалось выше, однозначная разрешимость задачи (1) обеспечивает существование единственной функции Грина, реализующей обращение дифференциального оператора по формуле (2). Построение этой функции несложно в ситуации, когда фундаментальная система решений однородного уравнения $L[x]=0$ известна.

Если же фундаментальная система решений неизвестна (а так бывает почти всегда, когда коэффициенты дифференциального выражения $L[x]$ непостоянны), то построение функции Грина рассматриваемой задачи может быть осуществлено с использованием вспомогательной задачи:

$$\begin{cases} x^{(n)} + p_{n-1}(t)x^{(n-1)} = f(t) \\ U_j(x) = 0, \quad j = 1,2,...,n \end{cases},$$

функция Грина $\tilde{G}(t,\tau)$, которой легко находится непосредственно [2]. При этом функция Грина основной задачи будет единственным решением интегрального уравнения Фредгольма II-го рода:

$$G(t,s) - \tilde{G}(t,s) = \int_a^b G(t,\tau)V(t,s)\,d\tau \qquad (3)$$

в котором функция $V(t,s)$ дается соотношением:

$$V(\tau,s) = \sum_{k=0}^{n-2} p_k(\tau)\frac{\partial^k \tilde{G}(\tau.s)}{\partial \tau^k}.$$

Уравнение (3) эффективно разрешимо численно [3–4].

Сведение задачи с распределенными данными к задаче Валле-Пуссена

Пусть:

$$U_j(x) = \int_a^b g_j(t)x(t)dt = \sum_{q=1}^{n} x(t_q)w_j^q + R_j(x), \quad j = 1,2,...,n, \qquad (4)$$

некоторая квадратура на заданном множестве узлов $a \le t_1 < t_2 < ... < t_n \le b$ с фиксированными функциями g_j, $W = \|w_q^i\|$ – матрица весов точных квадратур (4), $\Phi = \|\varphi_i(t_q)\|_{i,q=1,n}$ – матрица значений фундаментальной системы решений однородного уравнения в точках t_q, $U(x) = \left(U_j(x)\right)$ – вектор граничных условий, $\mathrm{X}(x) = \left(x(t_q)\right)$ – вектор значений функции $x = x(t)$ в узлах квадратуры (4).

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:

$$L(y) = 0, U_j(y) = X_j - U_j(\tilde{x}) = Y_j,\ j = 1,2,...,n. \qquad (5)$$

Пусть $Y = (Y_j)_{j=1}^n$ – вектор столбец. Имеет место следующая теорема [1].

Теорема 2. *Если* $y = y(t)$ *решение краевой задачи с распределенными данными (5), матрицы* $\Gamma(g,\varphi)$ *и* $\Phi(\varphi)$ *– невырожденные, то это решение является решением простой задачи Валле-Пуссена:*

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

Эта теорема сводит изучение задачи с распределенными данными к хорошо изученной теории многоточечных краевых задач Валле-Пуссена (например, [5]).

Заключение. Таким образом, обращение дифференциального оператора с распределенными данными реализуется в три этапа – сперва аналитически находится функция Грина $\tilde{G}(t,\tau)$ вспомогательной задачи, затем численно решается уравнение (3) и строится функция Грина $G(t,\tau)$ основной задачи, после чего реализуется обращение в соответствии с формулой (2). Численные эксперименты ([4]) продемонстрировали эффективность предлагаемой методики обращения.

Библиографический список

1. Заляпин, В.И. Краевые задачи с распределенными данными / В.И. Заляпин, Ю.С. Попенко, Е.В. Харитонова // Сборник трудов 66 конференции преподавателей и сотрудников ЮУрГУ. – 2014. – С. 35–38.

2. Заляпин, В.И. Inverse problem of the measurement theory / В.И. Заляпин, С.В. Ермаков, Е.В. Харитонова // Proc. Inverse problems, Design and Optimization Symposium. – 2007. – Miami,FL. – Pp. 91–96.

3. Асфандиярова, Ю.С. Метод интегральных уравнений построения функции Грина / Ю.С. Асфандиярова, В.И. Заляпин, Е.В. Харитонова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2012. – № 27(286). – С. 16–23.

4. Асфандиярова, Ю.С. Численный анализ обратной задачи теории измерений / Ю.С. Асфандиярова // Труды 53 научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук». – 2010. – Ч. VII, Т. 3. – С. 6–7.

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

К содержанию

УДК 517.956.32 + 517.95

ЗАДАЧА ГУРСА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ МАНЖЕРОНА ВЫСОКОГО ПОРЯДКА

В.В. Карачик

Рассматривается задача Гурса для уравнения Манжерона высокого порядка с постоянными коэффициентами. Доказана теорема о разрешимости поставленной задачи и о представлении решения.

Ключевые слова: задача Гурса, уравнение Манжерона.

Многие задачи математической физики, связанные с явлениями вибрации, приводятся к уравнениям Манжерона [1]. Рассмотрим линейное уравнение Манжерона с постоянными коэффициентами

$$M(D_n)u(x) \equiv \left(D_n^m + a_1 D_n^{m-1} + \cdots + a_m\right)u(x) = f(x), \quad x \in R_+^n, \tag{1}$$

в котором $D_n = \partial^n / \partial x_1 \cdots \partial x_n$, $a_i \in C$, а функция $f(x)$ определена в R_+^n.

Исследуем для уравнения (1) задачу Гурса с условиями:

$$D_n^k u_{|x_i=0} = \varphi_{k,i}(x_{(i)}), \quad i = \overline{1,n}, \quad k = \overline{0,m-1}, \tag{2}$$

где обозначено $x_{(i)} = (x_1,\ldots,x_{i-1},x_{i+1},\ldots,x_n)$. Решение $u(x)$ будем искать из класса $u \in C^{m\varepsilon}(R_+^n)$, $D_n^k u \in C(\overline{R}_+^n)$, $k = \overline{0,m-1}$, а гладкость функций $f(x)$ и $\varphi_{k,i}(x_{(i)})$ будет конкретизирована ниже. Здесь $\varepsilon = (1,\ldots,1)$.

Частный случай задачи (1)-(2) при $\varphi_{k,i} = C_k$ исследовался в [2], а при $C_0 = 1$, $C_k = 0$ в [1]. Задачи Коши и Гурса для уравнения третьего порядка с оператором Манжерона D_3 исследовались в [3], а при $n = 1$ в [4]. Задача (1)–(2) вкладывается в класс задач B из [5, с. 128] и сводится к решению простейшей задачи:

$$D_n u(x) = F(x), x \in R_+^n; \quad u_{|x_i=0} = \psi_i(x_{(i)}), \; i = \overline{1,n}. \tag{3}$$

Пусть D – некоторая открытая область из R_+^n, удовлетворяющая условию звездности $\forall x \in \mathrm{D}$, $\forall t \in (0,1]$, $tx \in \mathrm{D}$. Введем функцию:

$$S_\lambda(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \lambda^k x_1^{k,!} \cdots x_n^{k,!},$$

а также класс функций:

$$C_0(\mathrm{D}) = \left\{u \in C(\mathrm{D}) : \int_0^x |u(\tau)|\,d\tau < \infty, x \in \mathrm{D}\right\},$$

где обозначено $\int_0^x u(\tau)\,d\tau = \int_0^{x_1} \cdots \int_0^{x_n} u(\tau_1,\ldots,\tau_n)\,d\tau_n \cdots d\tau_1$.

Лемма 1. Всякое решение уравнения:

$$(D_n - \lambda)u(x) = f(x), \quad x \in \mathrm{D}. \tag{4}$$

из класса $u \in C^{\varepsilon}(\mathrm{D}) \cap C_0(\mathrm{D})$, при $f \in C_0(\mathrm{D})$ и $\lambda \in C$, может быть записано в виде:

$$u(x) = v_\lambda(x) + \int_0^x S_\lambda(x-\tau) f(\tau) d\tau, \tag{5}$$

где $v_\lambda \in C_0(\mathrm{D})$ – решение однородного уравнения (4), а интеграл понимается как несобственный.

Следствие 1. Всякое классическое решение однородного уравнения (4) из класса $C_0(\mathrm{D})$ может быть записано в виде:

$$v_\lambda(x) = v_0(x) + \lambda \int_0^x S_\lambda(x-\tau) v_0(\tau) d\tau, \tag{6}$$

где $v_0 \in C_0(\mathrm{D})$.

Приступим к построению решения задачи (1)–(2). Определим множества $\Gamma = \overline{R}_+^n \setminus R_+^n$, $\Gamma_i = \Gamma \cap \{x \in R^n : x_i = 0\}$. Очевидно, что $\Gamma = \cup_{i=1}^n \Gamma_i$. Введем на Γ функции φ_k, задав их по формуле $\varphi_k(x) = \varphi_{k,i}(x_{(i)})$, когда $x \in \Gamma_i$ и $x = x_{(i)}$. Аналогично определим функцию $\psi(x)$. Пусть $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ – корни полинома $M(\lambda)$ и

$$P_k(\lambda_1, \ldots, \lambda_s) = \sum_{|\alpha|=k} \lambda_1^{\alpha_1} \cdots \lambda_s^{\alpha_s}, \quad Q_k(\lambda_1, \ldots, \lambda_s) = \sum_{\|\alpha|=k, \alpha_i=0,1} \lambda_1^{\alpha_1} \cdots \lambda_s^{\alpha_s},$$

причем, $Q_k(\lambda_1, \ldots, \lambda_s)$ при $s = 0$ будем считать единицей.

Лемма 2. Решение задачи (1)-(2) существует и записывается в виде:

$$u(x) = v_{\lambda_1}(x) + \int_0^x S_{\lambda_1}(x-\tau) v_{\lambda_2}(\tau) d\tau + \int_0^x S_{\lambda_1}(x-\tau) \cdots \int_0^s S_{\lambda_m}(s-t) f(t) dt..d\tau, \tag{7}$$

где:

$$v_{\lambda_i}(x) = v_0^{(i)}(0) + \lambda_i \int_0^x S_{\lambda_i}(x-\tau) v_0^{(i)}(\tau) d\tau, \tag{8}$$

если $f \in C_0(R_+^n)$, а $v_0^{(i)}(x)$ является решением задачи (3) при $F(x) = 0$,

$$\psi(x) = \sum_{k=0}^{i-1} (-1)^k Q_k(\lambda_1, \ldots, \lambda_{i-1}) \varphi_{i-k-1}(x) \tag{9}$$

и $v_0^{(i)} \in C^{(m-i+1)\varepsilon}(R_+^n) \cap C(\overline{R}_+^n)$.

Исследуем разрешимость задачи (3) при $k \geq 1$ в классе функций $u \in C^{k\varepsilon}(R_+^n) \cap C(\overline{R}_+^n)$. Решение задачи (3) при F и ψ – аналитических в R_+^n получено в [5, с. 128].

Лемма 3. Если $F \in C^{(k-1)\varepsilon}(R_+^n) \cap C_0(R_+^n)$ и $\psi_{i|x_{i_1}=\cdots=x_{i_j}=0} \in C^{k\varepsilon}(R_+^{n-j+1})$ для различных $i, i_1, \ldots, i_j$, принимающих значения от 1 до n, $\psi_i \in C(\overline{R}_+^{n-1})$, $\psi_{i|x_j=0} = \psi_{j|x_i=0}$, то решение задачи (3) из класса $C^{k\varepsilon}(R_+^n) \cap C(\overline{R}_+^n)$ существует, единственно и записывается в виде:

$$u(x) = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{j-1} \sum_{1 \le i_1 < \cdots < i_j \le n} \psi_{i_j|x_{i_1}=\cdots=x_{i_{j-1}}=0} + \int_0^x F(\tau)\, d\tau. \qquad (10)$$

Подытожим проведенные исследования. Обозначим $U_1(x) = S_{\lambda_1}(x)$:

$$U_k(x) = \int_0^x S_{\lambda_1}(x-\tau) \cdots \int_0^s S_{\lambda_{k-1}}(s-t) S_{\lambda_k}(t)\, dt \cdots d\tau, \; k = \overline{2,m}.$$

Теорема 1. Решение задачи (1)–(2) существует, если $f \in C_0(R_+^n)$, для различных $i, i_1, \ldots, i_j$, принимающих значения от 1 до n, выполнены условия $\varphi_{k,i|x_{i_1}=\cdots=x_{i_j}=0} \in C^{m-k+1}(R_+^{n-j+1})$ и кроме того $\varphi_{k,i} \in C(\overline{R}_+^{n-1})$ и $\varphi_{k,i|x_j=0} = \varphi_{k,j|x_i=0}$ для $k = \overline{0,m-1}$. Решение задачи единственно и может быть записано в виде:

$$u(x) = v_{\lambda_1}(x) + \int_0^x U_1(x-\tau) v_{\lambda_2}(\tau)\, d\tau + \cdots + \int_0^x U_m(x-\tau) f(\tau)\, d\tau, \qquad (11)$$

где функции $v_{\lambda_i}(x)$ должны находиться из (8), а $v_0^{(i)}(x)$ из (10) при $u(x) = v_0^{(i)}(x)$, $F(x) = 0$ и $\psi(x)$, взятой из (9).

Доказательство. С помощью леммы 2 сведем решение задачи (1)–(2) к решению задачи (3). Справедлива формула (7). Функции $v_0^{(i)}(x)$ должны находиться из (10) при $F(x) = 0$ и $\psi(x)$ взятой из (9). Используя равенство:

$$\int_0^x S_{\lambda_1}(x-\tau) \cdots \int_0^s S_{\lambda_k}(s-t) \psi(t)\, dt \cdots d\tau = \int_0^x U_k(x-\tau) \psi(\tau)\, d\tau,$$

справедливое для $\psi \in C_0(R_+^n)$, приведем (7) к виду (11). Необходимая гладкость решения $u(x)$, в силу лемм 2 и 3, обеспечивается требуемой гладкостью функций f и $\varphi_{k,i}$. Единственность $u(x)$ следует из того, что всякое решение уравнения (1), имеющее требуемую в условии гладкость, имеет вид (7), а решение задачи (3), в силу леммы 3, единственно.

В качестве примера применения теоремы 1 рассмотрим случай задачи (1)–(2), когда $\varphi_{k,i} = C_k$ [2]. Пусть $f \in C_0(R_+^n)$. Условия теоремы 1, налагаемые на функции $\varphi_{k,i}$, очевидно, выполнены. Найдем функцию $v_\lambda(x)$, если $v_{\lambda|\Gamma} = C$. Так как при $j = \overline{1,s}$ верно равенство:

$$\sum_{1\le i_1<\cdots<i_j\le s} 1=\binom{s}{j},$$

то из (10) при $\psi(x)=C,\ F(x)=0,\ u(x)=v_0(x)$, будем иметь:

$$v_0(x)=C\sum_{j=1}^{n}(-1)^{j-1}\binom{n}{j}=C,$$

а значит, согласно (6), будет $v_\lambda(x)=S_\lambda(x)$. Введем числа:

$$A_{k+1}=\sum_{i=0}^{k}(-1)^i Q_i(\lambda_1,\ldots,\lambda_k)C_{k-i},$$

для $k=\overline{1,m-1}$ и $A_1=C_0$. Применим теорему 1. Из нее следует, что решение задачи (1)–(2) при $f\in C_0(R_+^n),\ \varphi_{k,i}=C_k$ существует и записывается в виде:

$$u(x)=U(x)+\int_0^x U_m(x-\tau)f(\tau)d\tau,$$

где функция $U(x)=\sum_{k=1}^{m}A_k U_k(x)$ является решением задачи (1)–(2) при $f(x)=0$. Полученная формула легко выводится из (11), если заметить, что:

$$U_{k+1}(x)=\int_0^x U_k(x-\tau)S_{\lambda_{k+1}}(\tau)d\tau.$$

Функция $U(x)$ может быть записана и в ином виде. Пусть полином $M(\lambda)$ имеет l различных корней, а $k_1,\ldots,k_l$ – их кратности. Рассмотрим $u(t)$ – решение задачи (1)–(2) при $n=1,\ f(t)=0$, записанное в виде:

$$u(t)=\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=0}^{k_i-1}B_i^{(j)}t^{j,!}\exp(\lambda_i t).$$

Очевидно, что при $n=1$ задача (1)–(2) превращается в задачу Коши для обыкновенного дифференциального уравнения (1) [4]. Если обозначить:

$$S_\lambda^{(k)}(x)=\frac{1}{k!}\frac{\partial^k}{\partial\lambda^k}S_\lambda(x),$$

то будем иметь:

$$U(x)=\sum_{i=1}^{l}\sum_{j=0}^{k_i-1}B_i^{(j)}S_{\lambda_i}^{(j)}(x).$$

Это утверждение легко получить, используя единственность решения задачи (1)–(2) при $f(x)\equiv 0$, равенств:

$$(D_n-\lambda)S_\lambda^{(0)}(x)=0,\ (D_n-\mu)S_\lambda^{(j)}(x)=S_\lambda^{(j-1)}(x)+(\lambda-\mu)S_\lambda^{(j)}(x),\quad j\ge 1$$

и свойства $S^{(0)}_{\lambda|\Gamma}=1$, $S^{(j)}_{\lambda|\Gamma}=0$ при $j>1$.

В заключение хочется отметить, что для вычислений более удобна форма представления функции $U(x)$, найденная в [5, с. 128] и [7, п. 2.1]. Основное ее преимущество в том, что для ее задания не требуется нахождение корней полинома $M(\lambda)$. Похожая формула была получена также в работах [4] и [8] для нахождения решения задачи Коши для линейных обыкновенных уравнений с постоянными коэффициентами и нахождения полиномиальных решений задачи Дирихле для бигармонического уравнения. В работах [9, 10, 11] с помощью нормированных систем функций строились решения задач Дирихле и Неймана для полигармонического уравнения в шаре.

Библиографический список

1. Oguztoreli, M.N. Goursat problem for a high order Mangeron equation / M.N. Oguztoreli, S.A. Easwaran // Rend. Acad. Naz. Lincei, 1971. V. L. Pp. 322–325.

2. Бондаренко, Б.А. Базисные системы полиномиальных и квазиполиномиальных решений уравнений в частных производных / Б.А. Бондаренко. – Ташкент: Фан, 1987. – 147 с.

3. Карачик, В.В. Задачи Коши и Гурса для уравнения 3-го порядка / В.В. Карачик // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2015. – Т. 7. № 2. – С. 31–43.

4. Карачик, В.В. Метод построения решений линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами / В.В. Карачик // ЖВМиМФ. – 2012. – Т. 52, № 2. – С. 237–252.

5. Карачик, В.В. Метод нормированных систем функций / В.В. Карачик. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2014. – 452 с.

6. Karachik, V.V. Normalized system of functions with respect to the Laplace operator and its applications /V.V. Karachik // Journal of Mathematical Analysis and Applications. 2003. V. 287. No. 2. Pp. 577–592.

7. Карачик, В.В. Разработка теории нормированных систем функций и их применения к решению начально-краевых задач для уравнений в частных производных: дис. … д-ра физ.-мат. Наук В.В. Карачик. – Ташкент, 2001. – 213 с.

8. Карачик, В.В. Полиномиальные решения дифференциальных уравнений в частных производных с постоянными коэффициентами I / В.В. Карачик // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 10 (227). – С. 4–17.

9. Карачик, В.В. Полиномиальные решения задачи Дирихле для бигармонического уравнения в шаре / В.В. Карачик, Н.А. Антропова // Дифференциальные уравнения. – 2013. – Т. 49, № 2. – С. 250–254.

10. Карачик, В.В. Построение полиномиальных решений задачи Дирихле для полигармонического уравнения в шаре / В.В. Карачик // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2014. – Т. 54, № 7. – С. 1149–1170.

11. Карачик В.В. Условия разрешимости задачи Неймана для однородного полигармонического уравнения / В.В. Карачик // Дифференциальные уравнения. – 2014. – Т. 50, № 11. – С. 1455–1461.

К содержанию

УДК 517.988.52

АППРОКСИМАЦИЯ НЕПОДВИЖНОЙ ТОЧКИ МОНОТОННОГО ОПЕРАТОРА

М.Л. Катков

М.А. Красносельский заметил, что монотонные функции, удовлетворяющие определённым условиям на возрастание, обладают некоторыми замечательными свойствами. Этот факт послужил толчком к созданию теории монотонных вогнутых операторов. В.И. Опойцев ввёл понятие гетеротонности, что явилось существенным шагом в развитии теории. Автором предлагается способ построения метрик, связанных с порядком. Сжимающие отображения в таких метриках аналогичны по свойствам вогнутым.

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

Пусть X банахово K пространство, R – множество действительных чисел, R^+ – множество неотрицательных действительных чисел, M – подмножество X.

Определение 1. На множестве $R \times M$ рассмотрим оператор $U: R \times M \to M$. Относительно оператора U будем предполагать, что он удовлетворяет следующим условиям.

1. Оператор U непрерывен.
2. Монотонен по переменным x и t.
3. Для любого $x \in M$ $U(t,x) = x$ тогда и только тогда, когда $t = 0$.
4. Для любых t_1 и t_2 и для любого $x \in M$ выполняется равенство:

$$U(t_1 + t_2; x) = U(t_1, U(t_2; x)).$$

Оператор U будем называть оператором сдвига.

Определение 2. Пусть $x_0 \in M$. Рассмотрим множество всех $y \in M$, для которых при некотором $t \geq 0$ выполняется система неравенств:

$$x_0 \leq U(t; y); y \leq U(t; x_0).$$

Назовём это множество компонентой и будем обозначать $K(x_0; U)$. Для сравнения см. [1], [2], [3].

Определение 3. На множестве $K(x_0; U) \times K(x_0; U)$ определим метрику:

$$\rho(x; y) = \min \{t \geq 0: x \leq U(t; y);\ y \leq U(t; x)\}.$$

Введём класс операторов, аналогичных по свойствам u_0 – вогнутым и операторам u_0 – медленного изменения. См. [3].

Определение 4. Пусть $M \subset X$, $u_0 \in M$, U – оператор сдвига. Будем называть монотонный оператор T оператором u_0 – медленного роста, если он удовлетворяет следующим условиям:

1. Для любого $x \in M\ Tx \in K(x_0; U)$.

2. Для любых $x \in K(x_0; U)$ и $t > 0$ существует $q = q(x; t)$ такое, что $0 < q(x; t) < 1$, при котором выполняется неравенство:

$$TU(t; x) \leq U(qt; x).$$

Отметим, что при $U(t; x) = e^t x$ оператор u_0 – медленного роста является u_0 – вогнутым, а при $U(t; x) = x + tu_0$ является оператором u_0 – медленного изменения. Для операторов из введённого класса справедливы следующие утверждения.

Теорема 1. Оператор u_0 – медленного роста не может иметь более одной неподвижной точки на множестве M.

Теорема 2. Пусть оператор U является оператором сдвига, T – оператор u_0 – медленного роста на множестве M относительно оператора U, x_* – неподвижная точка оператора T.

Тогда для любого $x_0 \in M$ последовательные приближения $T^n x_0$ сходятся по метрике ρ к x_*.

Библиографический список

1. Красносельский, М.А. Геометрические методы нелинейного анализа / М.А. Красносельский, П.П. Забрейко. – М.: Наука, 1975. – 512 с.

2. Опойцев, В.И. Обобщение теории монотонных и вогнутых операторов / В.И. Опойцев // Труды Московского математического общества. – 1978. – Т. 36. – С. 237–380.

3. Катков, М.Л. Расширение понятия вогнутого оператора / М.Л. Катков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 1. – С. 28–29.

К содержанию

УДК 517.929.2

ПРИЗНАКИ УСТОЙЧИВОСТИ ЛИНЕЙНЫХ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ

Д.А. Комиссарова

Получены достаточные условия асимптотической устойчивости линейного разностного уравнения. Ранее были известны более ограничительные признаки устойчивости.

Ключевые слова: устойчивость, разностное уравнение, область устойчивости.

Рассмотрим линейное разностное уравнение порядка k:

$$x_n = x_{n-1} - \sum_{i=1}^{k} a_i x_{n-i}\,, \tag{1}$$

где $a_i \in R \ \ (1 \le i \le k)$, $x_n : N \mapsto R$.

Под асимптотической устойчивостью уравнения (1) будем понимать асимптотическую устойчивость его нулевого решения.

Доказана следующая теорема [1,2].

Теорема 1. Если $a_i \ge 0 \ \ (1 \le i \le k)$ и

$$0 < \sum_{i=1}^{k} \frac{a_i}{2\sin\dfrac{\pi}{2(2i-1)}} < 1, \tag{2}$$

то уравнение (1) асимптотически устойчиво.

Теорема 1 не означает, что условие (2) является необходимым для устойчивости уравнения (1). Теорема 1 определяет симплекс, являющийся подмножеством области устойчивости уравнения (1). Вообще говоря, границы области устойчивости уравнения (1) не выпуклы.

Доказана невозможность увеличения хотя бы одного из знаменателей в неравенстве (2) с сохранением устойчивости уравнения (1).

Поскольку:

$$2\sin\frac{\pi}{2(2i-1)} > \frac{\pi}{2i}, \quad i \in N,$$

из теоремы 1 получаем следующий, более простой признак асимптотической устойчивости уравнения (1).

Теорема 2. Если $a_i \ge 0 \ \ (1 \le i \le k)$ и

$$0 < \sum_{i=1}^{k} i a_i \le \frac{\pi}{2}, \tag{3}$$

то уравнение (1) асимптотически устойчиво.

Теорема 2 является аналогом результата, полученного Вагиной и Кипнисом [3] относительно дифференциальных уравнений.

Следующая теорема является следствием теорем 1 и 2.

Теорема 3. Если $a_i \geq 0$ для всех $i \in N$ и

$$0 < \sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_i}{2\sin\dfrac{\pi}{2(2i-1)}} < 1$$

или

$$0 < \sum_{i=1}^{\infty} i a_i \leq \frac{\pi}{2},$$

то разностное уравнение Вольтера:

$$x_n = x_{n-1} - \sum_{i=1}^{\infty} a_i x_{n-i}$$

асимптотически устойчиво.

Константа $\pi/2$ в правой части неравенства (3) неулучшаема. Однако если допустить, чтобы правая часть в неравенстве (3) зависела от порядка уравнения, то получим следующий признак асимптотической устойчивости уравнения (1).

Теорема 4. Если $a_i \geq 0$ $(1 \leq i \leq k)$ и

$$0 < \sum_{i=1}^{k} i a_i < 2k \sin\frac{\pi}{2(2k-1)}, \qquad (4)$$

то уравнение (1) асимптотически устойчиво.

Правая часть неравенства (4) также неулучшаема.

Библиографический список

1. Kipnis, M.M. A note on explicit stability conditions for autonomous higher order difference equations / M.M. Kipnis, D.A. Komissarova // J. Difference Equ. Appl. 2007. V. 13, № 5. Pp. 457–461.

2. Комиссарова, Д.А. Простое условие асимптотической устойчивости для разностного уравнения x(n)=x(n-1)-ax(n-m)-bx(n-k) / Д.А. Комиссарова, М.М. Кипнис // Изв. Челябинского науч. центра. – 2007. – Вып. 1(35). – С. 1–4.

3. Вагина, М.Ю. Устойчивость нулевого решения дифференциального уравнения с запаздываниями / М.Ю. Вагина, М.М. Кипнис // Мат. заметки. – 2003. – Т. 74. – Вып. 5. – С. 786–789.

К содержанию

УДК 519.833

О РАВНОВЕСИИ БЕРЖА-ПАРЕТО

К.Н. Кудрявцев

Приводятся достаточные условия существования равновесия по Бержу, максимального по Парето по отношению ко всем остальным таким равновесиям. Предлагается алгоритм построения такого равновесия, основанный на использовании специального вида свертки Гермейера.

Ключевые слова: бескоалиционная игра, равновесие по Бержу, максимум по Парето.

Прямая противоположность равновесию по Нэшу – концепция равновесия в бескоалиционной игре *N* лиц, основанная на «альтруистическом подходе», была предложена Клодом Бержем в 1957 г. в монографии [1]. Однако эта книга вызвала резкую рецензию Мартина Шубика [2], где акцентировалось, что в [1] «никакого внимания не уделено приложению к экономике. ... книга мало интересна для экономистов». Такая рецензия, признанного научного авторитета «отпугнула» от [1] западных специалистов по теории игр и экономике. Строгая математическая формализация идей Бержа была предложена только в 1994 г. В.И. Жуковским и К.С. Вайсманом [3–5]. В последнее время эта концепция все шире распространяется и за рубежом (см., например, обзор [6]). Стоит отметить, что устоявшимися терминами в западной литературе стали *равновесие Бержа-Жуковского* (названное в [3] равновесием по Бержу) и равновесие *Бержа-Вайсмана* (равновесие по Бержу, для которого выполнено условие индивидуальной рациональности).

Итак, рассмотрим бескоалиционную игру *N* лиц:

$$\left\langle \mathrm{N}, \left\{ \mathrm{X}_i \right\}_{i\in\mathrm{N}}, \left\{ f_i\left(x\right) \right\}_{i\in\mathrm{N}} \right\rangle. \qquad (1)$$

Здесь $\mathrm{N} = \left\{1, 2, ..., N\right\}$ – множество порядковых номеров игроков, каждый из игроков, не согласовывая своих действий с остальными игроками, выбирает свою *стратегию* x_i из множества стратегий $\mathrm{X}_i \subseteq \mathrm{R}^{n_i}$, в результате такого выбора складывается *ситуация* $x = \left(x_1, x_2, ..., x_N\right) \in \mathrm{X} = \mathrm{X}_1 \times \mathrm{X}_2 \times ... \times \mathrm{X}_N$ игры (1), на множестве всех таких ситуаций определена скалярная функция выигрыша *i*-го игрока $f_i\left(x\right)$ $\left(i = 1, 2, ..., N\right)$, значение которой на реализовавшейся ситуации называется выигрышем *i*-го игрока. Далее будем применять обозначения $\left(x \| z_i\right) = \left(x_1, ..., x_{i-1}, z_i, x_{i-1}, ...x_N\right)$ и $f = \left(f_1, ..., f_N\right)$.

Определение 1. Пара $\left(x^B, f^B\right) = \left(\left(x_1^B, ..., x_N^B\right), \left(f_1\left(x^B\right), ..., f_N\left(x^B\right)\right)\right) \in \mathrm{X} \times \mathrm{R}^N$ называется [3] *равновесием по Бержу* в игре (1), если:

$$\max_{x\in \mathrm{X}} f_i\left(x \middle\| x_i^B\right) = f_i\left(x^B\right) \quad (i \in \mathbf{N}); \tag{2}$$

далее x^B называется *ситуацией равновесия по Бержу* в игре (1), а через X^B обозначим все множество таких ситуаций x^B в (1).

Одним из негативных свойств ситуации равновесия по Бержу является внутренняя неустойчивость множества всех таких ситуаций. А именно, в игре (1) может существовать две ситуации равновесия по Бержу $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ таких, что при каждом $i \in \mathbf{N}$ имеет место неравенство:

$$f_i\left(x^{(1)}\right) > f_i\left(x^{(2)}\right).$$

Отсюда следует, что игрокам в игре (1) нужно использовать не любую ситуацию равновесия по Бержу, а лишь ту, которая одновременно максимальна по Парето по отношению к остальным равновесным по Бержу ситуациям.

Определение 2. Ситуацию $x^* \in \mathrm{X}$ назовем *равновесной по Бержу–Парето* в игре (1), если:

– во-первых, x^* равновесна по Бержу в игре (1), то есть удовлетворяет требованиям (2);

– во-вторых, x^* максимальна по Парето в N-критериальной задаче:

$$\left\langle \mathrm{X}^B, \left\{ f_i(x) \right\}_{i\in\mathbf{N}} \right\rangle,$$

то есть, при любых ситуациях $x \in \mathrm{X}^B$ несовместна система неравенств:

$$f_i(x) \geq f_i\left(x^*\right) \quad (i \in \mathbf{N}),$$

причем хотя бы одно из этих неравенств строгое.

Для выявления достаточных условий существования равновесной по Бержу-Парето ситуации в игре (1) будем использовать метод, предложенный в [7] при построении Парето–равновесной ситуации, а именно рассмотрим N+1 скалярную функцию:

$$\varphi_i(x,z) = f_i\left(x \middle\| z_i\right) - f_i(z) \quad (i \in \mathbf{N}),$$

и

$$\varphi_{N+1}(x,z) = \sum_{i\in\mathbf{N}} \left[f_i(x) - f_i(z) \right],$$

определенные на декартовом произведении $\mathrm{X}\times\mathrm{Z}$; здесь и далее ситуации $x = (x_1,...,x_N) \in \mathrm{X}$, $z = (z_1,...,z_N) \in \mathrm{Z} = \mathrm{X}$, а $\left(x \middle\| z_i\right) = (x_1,...,x_{i-1},z_i,x_{i+1},...,x_N)$.

Сверткой Гермейера функций $\varphi_j(x,z)$ $(j = 1,...,N,N+1)$ называется [8] функция:

$$\varphi(x,z) = \max_{j=1,...,N+1} \varphi_j(x,z).$$

Лемма [8]. Если N+1 скалярные функции $\varphi_j(x,z)$ $(j=1,...,N,N+1)$ непрерывны на $\mathrm{X}\times\mathrm{Z}$, а множества $\mathrm{X,Z}\in \mathrm{comp}\,\mathrm{R}^n$, то их свертка Гермейера $\varphi(x,z)$ также непрерывна на $\mathrm{X}\times\mathrm{Z}$.

Далее, по функциям выигрыша $f_i(x)$ игры (1) построим гермейеровскую свертку:

$$\varphi(x,z)=\max\left\{\left[\,f_i(x\|z_i)-f_i(z)\quad(i\in\mathbf{N})\right],\left(\sum_{j\in\mathbf{N}}f_j(x)-\sum_{j\in\mathbf{N}}f_j(z)\right)\right\},\quad(3)$$

заданную на $\mathrm{X}\times(\mathrm{Z=X})$.

Игре (1) сопоставим вспомогательную антагонистическую игру:

$$\langle \mathrm{X},\mathrm{Z=X},\varphi(x,z)\rangle.\quad(4)$$

Седловая точка $(x^0,z^B)\in\mathrm{X}\times\mathrm{Z}$ в игре (4) определяется цепочкой неравенств:

$$\varphi(x,z^B)\le\varphi(x^0,z^B)\le\varphi(x^0,z)\qquad\forall x,z\in\mathrm{X}.$$

Теорема 1. Если в антагонистической игре (4) существует седловая точка (x^0,z^B), то минимаксная стратегия (x^0,z^B) является равновесной по Бержу–Парето ситуацией в бескоалиционной игре (1).

Доказательство теоремы 1 приведено в [9].

Отметим, что теорема 1 диктует следующий *алгоритм* построения равновесной по Бержу–Парето ситуации в бескоалиционной игре (1):

– *во-первых*, построить по формулам (3) функцию $\varphi(x,z)$;

– *во-вторых*, найти седловую точку (x^0,z^B) функции $\varphi(x,z)$.

Тогда найденная ситуация $z^B\in\mathrm{X}$ как раз и будет равновесной по Бержу-Парето.

Достаточные условия существования равновесия Бержа–Парето в смешанном расширении игры (1) формулируются следующей теоремой [9]

Теорема 2. Если в игре (1) множества $\mathrm{X}_i\in comp\mathrm{R}^{n_i}$ и $f_i(\cdot)\in C(\mathrm{X})$ $(i\in\mathbf{N})$, то в этой игре существует ситуация равновесия по Бержу–Парето в смешанных стратегиях.

В заключении отметим, что концепцию равновесия по Бержу можно распространить и на бескоалиционные игры при неопределенности. В этом случае можно использовать два подхода: «аналог седловой точки» [10] и «аналог максимина» из [11].

Библиографический список

1. Berge, C. Theorie generale des jeux .a n personnes games / C. Berge. – Paris: Gauthier Villars, 1957. – 114 p.

2. Shubik, M. Review of C. Berge «General theory of n-person games» / M. Shubik // Econometrica. 1961. V. 29. № 4. P. 821.

3. Жуковский, В.И. Линейно-квадратичные дифференциальные игры / В.И. Жуковский, А.А. Чикрий. – Киев.: Наукова Думка, 1994. – 320 с.

4. Vaisman, K.S. The Berge equilibrium for linear–quadratic differential game / K.S. Vaisman // Multiple criteria problems under uncertainty: Abstracts. The 3-d Intern. Workshop. Orekhovo-Zuevo, Russia. 1994. P. 96.

5. Vaisman, K.S. The Berge equilibrium under uncertainty / K.S. Vaisman, V.I.Zhukovskiy // Multiple criteria problems under uncertainty: Abstracts. The 3-d Intern. Workshop. Orekhovo-Zuevo, Russia. 1994. Pp. 97–98.

6. Colman, A.M. Mutual support in games: Some properties of Berge equilibria / A.M. Colman, T.W. Korner, O. Musy and T. Tazdait // Journal of Mathematical Psychology. 2011. V. 55. № 2. Pp. 166–175.

7. Жуковский, В.И. Парето-равновесная ситуация: достаточные условия и существование в смешанных стратегиях / В.И. Жуковский, К.Н. Кудрявцев // Математическая теория игр и ее приложения. – 2015. – Т. 7, № 1. – С. 74–91.

8. Гермейер, Ю.Б. Введение в теорию исследования операций / Ю.Б. Гермейер. – М: Наука, 1971. – 384 с.

9. Жуковский, В.И. Математические основы золотого правила. I. Статический вариант / В.И. Жуковский, К.Н. Кудрявцев // Математическая теория игр и ее приложения (в печати).

10. Жуковский, В.И. Уравновешивание конфликтов при неопределенности. I. Аналог седловой точки / В.И. Жуковский, К.Н. Кудрявцев // Математическая теория игр и ее приложения. – 2013. – Т. 5, № 1. – С. 27–44.

11. 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.

К содержанию

УДК 519.642.6:577.3 + 517.968:577.3

ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПРИКЛАДНОЙ БИОФИЗИКИ

А.Н. Пермина

В работе исследуется система двух нелинейных интегральных уравнений. Рассмотрены некоторые ограничения на параметры для линеаризованной системы, обеспечивающие однозначную разрешимость последней.

Ключевые слова: система интегральных уравнений Вольтерра первого рода, однозначная разрешимость системы интегральных уравнений.

Введение

Анализ результатов прижизненного измерения содержания ^{90}Sr в эмали передних зубов позволяет ретроспективно восстанавливать динамику поступления радионуклидов в организм человека в результате внутреннего облучения [1, 2].

Восстановление динамики поступления ^{90}Sr в организм человека на основе измерения зубным детектором $Y(T)$-поверхностной β-активности эмали передних постоянных зубов, использует известную связь между показаниями счетчика β-частиц и характеристиками процесса обмена ^{90}Sr [1]:

$$Y(T) = \beta \int_{t_0}^{t_u} \alpha(t-U+10,t)x(t)k(t-T)R(t-T,t_u-t)dt, \quad T_{\min} \le T \le T_{\max}, \quad (1)$$

здесь β – масштабный коэффициент (количество отсчетов, приходящееся на единицу активности в зубах); $\alpha(t-T,t)$ – отношение поступления ^{90}Sr детям к поступлению взрослым, функция получена в результате экспертного оценивания определенных биофизических процедур; $x(t)$ – скорость поступления ^{90}Sr в момент времени t; $k(t-T)$ – коэффициент перехода ^{90}Sr из желудочно-кишечного тракта в эмаль передних зубов, $R(t-T,t_u-t)$ – функция удержания, т.е. доля ^{90}Sr в эмали передних постоянных зубов по истечении некоторого времени после однократного поступления; t_u – момент измерения активности эмали зубов; t_0 – момент начала поступления ^{90}Sr в организм.

Определению подлежат функции $x(t)$ и $k(t)$, описывающие динамику поступления ^{90}Sr в организм человека.

Постановка задачи

Рассмотрим уравнение (1). После некоторых несложных преобразований ([2]), уравнение (1) может быть сведено к системе уравнений:

$$\begin{cases} \varphi(U) = \int_0^U \alpha(t-U+10,t)k(t-U+10)z(t)dt, \quad 0 \le U \le 10 \\ \phi(U) = \int_0^V \alpha(t,t-V+10)k(t)z(t-V+10)dt, \quad 0 \le V \le 10 \\ k(0) = 1 \end{cases}, \quad (2)$$

исследование которой и есть основная задача настоящей работы.

Линеаризация системы

Полученную систему (2) запишем в операторном виде:

$$Af = \Phi, \quad (3)$$

где $A=\begin{bmatrix} A_1(f) \\ A_2(f) \end{bmatrix}$ – нелинейный интегральный оператор, задаваемый первыми двумя равенствами из соотношения (2); $f=\begin{bmatrix} k(t) \\ z(t) \end{bmatrix}$ – векторная функция неизвестных; $\Phi=\begin{bmatrix} \varphi(U) \\ \phi(U) \end{bmatrix}$ – вектор правых частей системы.

Для исследования задачи (3) применим итерационный метод Ньютона-Канторовича [4], позволяющий линеаризовать рассматриваемую задачу в окрестности некоторого начального приближения $f_0=\begin{bmatrix} k_0 \\ z_0 \end{bmatrix}$.

Подробнее, полагая $f = f_0 + \Delta f$, перейдем от нелинейного уравнения (3) относительно f к линейному уравнению относительно поправки Δf:

$$A'(f_0)\Delta f = -A(f_0) + \Phi.$$

Здесь $A'(f_0)$ – линейный оператор (производная оператора по Фреше [5]).

Следовательно, уравнение (3) представляет собой систему двух линейных интегральных уравнений типа Вольтерра первого рода относительно компонент $(\Delta k, \Delta z)$ векторной поправки Δf:

$$\begin{cases} \int\limits_0^U \alpha(t-U+10,t)\Delta k(t-U+10)z_0(t)dt + \int\limits_0^U \alpha(t-U+10,t)k_0(t-U+10)\Delta z(t)dt = \\ = \varphi(U) - \int\limits_0^U \alpha(t-U+10,t)k_0(t-U+10)z_0(t)dt, \\ \int\limits_0^V \alpha(t,t-V+10)\Delta k(t)z_0(t-V+10)dt + \int\limits_0^V \alpha(t,t-V+10)k_0(t)\Delta z(t-V+10)dt = \\ = \phi(V) - \int\limits_0^V \alpha(t,t-V+10)k_0(t)z_0(t-V+10)dt, \\ \Delta k(0) = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Процедура решения представляет из себя итерационный процесс, начинающийся в некоторой начальной точке f_0 и реализуемый в соответствии с правилом $f_{N+1} = f_N + \Delta f$. На каждом шаге итерации мы получаем систему линейных интегральных уравнений типа Вольтерра первого рода – (4). Поправка Δf определяется на каждом шаге процедуры как решение линейной системы (4). Проблему решения данной системы рассмотрим подробнее.

Существование и единственность решения линейной системы интегральных уравнений

После некоторых несложных переобозначений сведем систему (4) к следующей системе линейных интегральных уравнений Вольтерра первого рода:

$$\begin{cases} \varphi_1(s) = \int\limits_a^s [K_{11}(s,t)x_1(t) + K_{12}(s,t)x_2(t)]dt \\ \varphi_2(s) = \int\limits_a^s [K_{21}(s,t)x_1(t) + K_{22}(s,t)x_2(t)]dt \\ x_1(0) = 0, \quad a \le t \le s \le b, \end{cases}, \tag{5}$$

для которой доказана следующая теорема.

Теорема. Пусть выполнены следующие условия:

1. Все рассматриваемые функции непрерывны на $[a,b]$*, причем функции* $\varphi_1(s), \varphi_2(s), K_{11}(s,t), K_{12}(s,t), K_{21}(s,t), K_{22}(s,t)$ *имеют некоторое число* p *непрерывных производных;*

2. $\varphi_1(a) = 0, \varphi_2(a) = 0;$

3. $\min\limits_{s\in[a,b]} \left\{ \|K_{11}(s,s)\|_{L_2}, \|K_{12}(s,s)\|_{L_2}, \|K_{21}(s,s)\|_{L_2}, \|K_{22}(s,s)\|_{L_2} \right\} = k \ne 0;$

4. $\|\varphi_1(s)\|_{L_2} \le k_1, \|\varphi_2(s)\|_{L_2} \le k_2;$

5. $c'_{11} \le \|K_{11}\|_{L_2} \le c_{11}, \|K_{12}\|_{L_2} \le c_{12}, c'_{22} \le \|K_{22}\|_{L_2} \le c_{22}, \|K_{21}\|_{L_2} \le c_{21},$ *причем:* $c_{12}, c_{21} < c'_{11}, c'_{22} \le c_{11}, c_{22};$

Тогда система (3) разрешима единственным образом.

Доказательство

Рассмотрим равномерное разбиение отрезка $[a,b]$: $h = \dfrac{b-a}{n}$, полагая $t_0 = a, t_i = t_{i-1} + h, i = 1,2,...,n-1; t_n = b$ – узлы дискретизации. Система (5) преобразуется в выражение:

$$\begin{cases} \varphi_1(s_j) = \int\limits_a^{s_j} \Big[K_{11}(s_j,t)x_1(t) + K_{12}(s_j,t)x_2(t) \Big] dt, \\ \varphi_2(s_j) = \int\limits_a^{s_j} \Big[K_{21}(s_j,t)x_1(t) + K_{22}(s_j,t)x_2(t) \Big] dt, \end{cases} \quad j = 1,...,n. \tag{6}$$

Применим к системе (6) квадратуру средних прямоугольников, или средней точки. Система (6) примет вид:

$$\begin{cases} \varphi_1(s_j) = h\sum\limits_{i=1}^{n} \Big[K_{11}(s_j,\xi_i)x_1(\xi_i) + K_{12}(s_j,\xi_i)x_2(\xi_i) \Big], \\ \varphi_2(s_j) = h\sum\limits_{i=1}^{n} \Big[K_{21}(s_j,\xi_i)x_1(\xi_i) + K_{22}(s_j,\xi_i)x_2(\xi_i) \Big], \end{cases} \quad j = 1,...,n.$$

Здесь $\xi_i = \dfrac{1}{2}(t_{i-1} + t_i) = t_{i-1} + \dfrac{h}{2} = t_i - \dfrac{h}{2}.$

Введем обозначения: $K_{11}(s_j,\xi_i) = K_{11}^{ji}$, $K_{12}(s_j,\xi_i) = K_{12}^{ji}$, $K_{21}(s_j,\xi_i) = K_{21}^{ji}$, $K_{22}(s_j,\xi_i) = K_{22}^{ji}$, $x_1(\xi_i) = x_1^i$, $x_2(\xi_i) = x_2^i$, $\varphi_1(s_j) = \varphi_1^j$, $\varphi_2(s_j) = \varphi_2^j$.

Получим систему:

$$\begin{cases} \varphi_1^j = h\sum\limits_{i=1}^{n}\left[K_{11}^{ji}x_1^i + K_{12}^{ji}x_2^i \right], \\ \varphi_2^j = h\sum\limits_{i=1}^{n}\left[K_{21}^{ji}x_1^i + K_{22}^{ji}x_2^i \right], \end{cases} \quad j = 1,\ldots,n. \qquad (7)$$

Решив эту систему, найдем x_1^i и x_2^i – значения неизвестных функций $x_1(t)$ и $x_2(t)$ в узлах дискретизации.

Матрица A системы имеет блочно-нижне-треугольный вид, система (7) имеет решение и оно единственно, если $\det A \neq 0$. Рассмотрим промежуточную лемму.

Лемма. *Пусть матрица K – блочно-нижне-треугольная, размера $2n \times 2n$, размер блоков – $n \times n$. Тогда:*

$$\det K = h\prod_{i=1}^{n}(K_{i,i}K_{i+n,i+n} - K_{i,i+n}K_{i+n,i}),$$

где $K_{i,j}$ – элементы матрицы K (без доказательства).

Применим утверждение леммы к матрице A системы (7):

$$\det A = h\prod_{i=1}^{n}(K_{11}^{ji}K_{22}^{ji} - K_{12}^{ji}K_{21}^{ji}).$$

Из условий теоремы (пункт 5) следует, что $K_{11}^{ji}K_{22}^{ji} \neq K_{12}^{ji}K_{21}^{ji}$, следовательно, $\det A \neq 0$ и система (7) имеет единственное решение. Теорема доказана.

Решение системы (7) задает значения неизвестных функций $x_1(t)$, $x_2(t)$ в узлах разбиения отрезка $[a,b]$.

Оценка погрешности при решении линеаризованной системы может быть произведена стандартными методами (например [3]).

Библиографический список

1. Degteva M., Kozheurov V., Tolstykh E. et all. The Techa river dozimetry system // Health Phys. 2000. V. 79, № 1. Pp. 24–35.

2. V.I. Zalyapin, V.A. Krivoschapov, M.O. Degteva. Numerical solution of an applied biophysics inverse problem // Inverse problem in Science&Engineering. 2004. V. 12. № 4. Pp. 379–392.

3. Верлань, А.Ф. Интегральные уравнения. Методы, алгоритмы, программы / А.Ф. Верлань, В.С. Сизиков. – Киев, 1986. – С. 19–137.

4. Канторович, Л.В. Функциональный анализ / Л.В. Канторович, Г.П. Акилов. – М.: Наука, 1977. – 744 с.

5. Вайнберг, М.М. Вариационный метод и метод монотонных операторов в теории нелинейных уравнений / М.М. Вайнберг. – М.: Наука, 1972. – 28 с.

К содержанию

УДК 515.128

О СВОЙСТВАХ h-ОДНОРОДНЫХ ПРОСТРАНСТВ

С.В. Медведев

В заметке обсуждаются и сравниваются свойства однородных и *h*-однородных метрических пространств.

Ключевые слова: однородное пространство, *h*-однородное пространство, пространство первой категории.

Все рассматриваемые пространства предполагаются метризуемыми и нульмерными (в смысле dim).

Пространство X называется *однородным*, если для любых двух точек x и y из этого пространства существует такой гомеоморфизм f: $X \to X$, что $f(x) = y$. Таким образом, в однородном пространстве нет особенностей и окрестности любых точек устроены одинаково. Пространство X называется *h-однородным* (термин предложен А.В. Островским), если любое непустое открыто-замкнутое подмножество из X гомеоморфно всему пространству X. Из определения следует, что в таком пространстве любые два непустых открыто-замкнутых подмножества будут гомеоморфны между собой. Несложно доказать, что каждое *h*-однородное пространство является однородным пространством. Обратное утверждение неверно, т.е. существуют однородные пространства, которые не являются *h*-однородными. Задача о нахождении условий, при выполнении которых однородное пространство становится *h*-однородным, не решена до сих пор.

Обозначим через ω счётное множество чисел {0, 1, 2, 3, …}. Говорят, что *X – пространство первой категории*, если пространство X можно представить в виде счётного объединения нигде не плотных подмножеств этого пространства.

Теорема 1. [1] *Для любого нульмерного метризуемого пространства X счётная степень X^{ω} является однородным пространством.*

Если пространство X обладает некоторыми дополнительными свойствами, то теорему 1 можно усилить до следующего утверждения.

Теорема 2. [2] *Пусть дано нульмерное метризуемое пространство X. Если счётная степень X^{ω} является пространством первой категории или*

содержит всюду плотное полное метризуемое подпространство, то X^{ω} – *h-однородное пространство.*

В настоящее время остаётся открытым такой вопрос: будет ли *h*-однородным пространством степень X^{ω} для произвольного нульмерного метризуемого пространства *X*.

В свою очередь теорему 2 можно обобщить на случай последовательности пространств $\{X_n : n \in \omega\}$, причём связь между отдельными пространствами из этой последовательности может быть очень слабой.

Теорема 3. *Пусть дана такая последовательность нульмерных метризуемых пространств* X_n, $n \in \omega$, *что для любого номера* n *найдется такой номер j, что j* > n *и пространство* X_n *гомеоморфно замкнутому подмножеству из* X_j. *Если произведение* $X = \prod\{X_n : n \in \omega\}$ *является пространством первой категории или содержит всюду плотное полное метризуемое подпространство, то X – h-однородное пространство.*

Установим некоторые связи между однородными и *h*-однородными пространствами. Следующая теорема усиливает результат из статьи [3].

Теорема 4. *Пусть дано нульмерное метризуемое пространство X, для которого* cf(w(X)) > ω. *Тогда следующие условия эквивалентны:*

1) *X – h-однородное пространство*;

2) *X – однородное, однородное по весу пространство.*

Теорема 5. *Пусть даны два нульмерных метризуемых пространства X и Y, причём X – h-однородное пространство, Y – однородное пространство и w(Y) ≤ w(X). Тогда произведение* $X \times Y$ *– h-однородное пространство.*

В следующей теореме описывается любопытный признак гомеоморфности двух *h*-однородных пространств.

Теорема 6. *Пусть даны два h-однородных пространства X и Y первой категории, каждое из которых гомеоморфно* F_σ*-множеству другого пространства. Тогда X и Y – гомеоморфные пространства*.

Приведённые выше результаты показывают, что класс *h*-однородных пространств представляет собой интересный объект для исследования.

Библиографический список

1. Dow A. Homogeneity in powers of zero-dimensional first-countable spaces / A. Dow, E. Pearl // Proc. Amer. Math. Soc. 1997. Vol. 125, №. 8. Pp. 2503–2510.

2. Medvedev, S.V. On properties of h-homogeneous spaces with the Baire property / S.V. Medvedev // Topology Applic. 2012. Vol. 159. Pp. 679–694.

3. Медведев С.В. Признаки h-однородности пространства / С.В. Медведев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Физика. Механика». – 2012. – Вып. 7. – № 34(293). – С. 31–32.

К содержанию

УДК 510(022) + 378.016:51
ББК Ч448.44

РЕАЛИЗАЦИЯ КОМПЕТЕНТНОСТНОГО ПОДХОДА ПРИ СОСТАВЛЕНИИ ТЕСТОВ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ У СТУДЕНТОВ ИНЖЕНЕРНЫХ НАПРАВЛЕНИЙ

Д.И. Абдрахимова

Компетентностный подход к составлению тестов по математике реализуется путем последовательной декомпозиции требований компетенций до уровня, на котором возможно их непосредственное диагностирование с помощью тестовых заданий.

Ключевые слова: компетентностный подход, компетенции, тестовые задания по математике.

Тестирование в современной теории и практике образования считается самой диагностичной, независимой, точной, легко воспроизводимой и алгоритмизируемой технологией измерения уровня учебных достижений, определяющей его соответствие требованиям федеральных государственных образовательных стандартов. Тесты позволяют получить объективные оценки уровня знаний, умений, навыков, представлений, выявить пробелы в подготовке студентов. По К. Ингенкампу, тестирование является методом педагогической диагностики, с помощью которого результаты планируемого и определяемого куррикулумом учебного процесса могут быть максимально объективно, надежно и валидно измерены, обработаны, интерпретированы и подготовлены к использованию в педагогической практике [3].

Введение новых федеральных государственных стандартов требует реализации компетентностного подхода как в обучении, так и в диагностике его результатов. В.А. Болотов [1] рассматривает «компетентностный подход как обобщенное условие способности человека эффективно действовать за пределами учебных сюжетов и учебных ситуаций». Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования (ФГОС ВО) основывается на компетентностном подходе, под которым понимается ориентация всех компонентов учебного процесса на формирование компетенций, необходимых для осуществления профессиональной деятельности. ФГОС ВО формулирует конкретные требования к результатам освоения основной образовательной программы в виде общих и профессиональных компетенций. Под компетенцией Э.Ф. Зеер [2] понимает совокупность знаний и умений, а также способы выполнения профессиональной деятельности.

Математические дисциплины оказывают влияние на формирование общих и профессиональных компетенций бакалавров, поскольку являются основой изучения дисциплин профильной подготовки. Компетентностный подход к составлению тестов учебных достижений студентов по математике требует точного описания планируемых результатов обучения.

Диагностичное описание компетенций по разделу «Интегральное исчисление» мы проводили путем их последовательной конкретизации (табл. 1).

Таблица 1

Соответствие целей освоения дисциплины и формируемых компетенций

Компетенция	Конкретизированные цели освоения дисциплины (знать, уметь, владеть), обеспечивающие формирование компетенции
ОК-10 способность применять основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	**Знает** о применении методов математического анализа в физике, в дифференциальных уравнениях, в статистике. **Умеет** пользоваться интегральным исчислением для моделирования простейших процессов. **Владеет** методами создания простейших математических моделей в физике
ПК-2 способность представлять современную научную картину мира на основе знаний основных положений, законов и методов естественных наук и математики	**Знает** понятия неопределенного и определенного интегралов, геометрический и физический смысл определенного интеграла. **Умеет** применять определенный интеграл при нахождении площадей, длин кривых, объемов тел. **Владеет** методами математического анализа для решения задач, связанных с определенным интегралом

Дальнейшая детализация компетенций проводилась в соответствии с содержанием отдельных модулей дисциплины. Покажем описание уровней сформированности компетенции ПК-2 для модуля «Интегрирование функций одной переменной» (табл. 2).

Таблица 2

Декомпозиция компетенций для создания тестовых заданий по модулю «Интегрирование функций одной переменной»

ПК-2 способность представлять современную научную картину мира на основе знаний основных положений, законов и методов естественных наук и математики		
Знает	**Умеет**	**Владеет**
1) определение первообразной; 2) определение неопределенного интеграла; 3) определение определенного интеграла; 4) формулу Ньютона-Лейбница; 5) признаки сходимости несобственного интеграла; 6) формулу длины дуги; 7) формулу площади криволинейной трапеции	1) находить неопределенный интеграл; 2) находить определенный интеграл; 3) вычислять несобственный интеграл; 4) вычислять площади фигур, ограниченных линиями; 5) вычислять длины дуг кривых; 6) вычислять объем тела, полученного вращением плоской фигуры	1) основными методами вычисления первообразной; 2) методами вычисления определенного интеграла; 3) методами исследования сходимости несобственного интеграла; 4) методами применения интеграла к решению практических задач

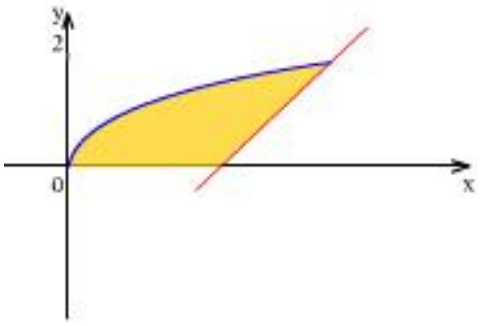
Требования к математической подготовке студентов были представлены нами в виде иерархической системы диагностируемых действий студентов. На их основе конструировались задания, направленные на непосредственную проверку выполнения этих действий (табл. 3).

Таблица 3

Примеры диагностических заданий, соответствующих уровням сформированности компетенций в теме «Интегрирование функций одной переменной»

Действие	Задание
Владеет 1) основными методами вычисления первообразной	Укажите, какую замену переменной нужно выполнить при вычислении интеграла $\int 3xe^{-x^2}\,dx$; 1. $y = e^{-x^2}$. 3. $y = -x^2$. 2. $x = -y^2$. 4. $x = e^{-y^2}$.
Умеет 1) находить неопределенный интеграл; Владеет 1) основными методами вычисления первообразной	Вычислите неопределенный интеграл $\int \frac{2^x dx}{\sqrt{1-4^x}}$; 1. $\frac{1}{\ln 2} arccos 2^x + C$. 3. $\frac{1}{\ln 2} arcsin\ 2^x + C$. 2. $arccos 2^x + C$. 4. $arcsin\ 2^x + C$.
Умеет 1) находить определенный интеграл	Вычислите определенный интеграл $\int_{\frac{\pi}{3}}^{\frac{4\pi}{3}} sinxdx$. 1. – 1. 2. 0. 3. 1. 4. $\frac{1}{2}$
Знает 3) определение определенного интеграла	Интеграл функции f(x) от – 1 до 2 обозначается… 1. $\int_{2}^{-1} f(x)dx$. 2. $\int_{-1}^{2} f(x)dx$. 3. $\int_{-1}^{2} f(x)$ 4. $\int_{2}^{-1} f(x)$
Знает 3) определение определенного интеграла; 4) формулу Ньютона-Лейбница Умеет 2) находить определенный интеграл; Владеет: 2) методами вычисления определенного интеграла	Вычислите определенный интеграл $\int_0^1 \frac{(x^2+1)dx}{(x^3+3x+1)^2}$ **1.** 0,4. 2. $\frac{4}{15}$. 3. $\frac{1}{3}$ln 5. 4. $\frac{124}{1125}$.
Знает 1) определение первообразной; 4) формулу Ньютона-Лейбница; 7) формулу площади криволинейной трапеции Умеет 2) находить определенный интеграл; 4) вычислять площади фигур, ограниченных линиями Владеет 1) основными методами вычисления первообразной	Вычислите площадь фигуры, ограниченной линиями $y = 4x - 4$ и $y = x^2 - 1$ 1. $6\frac{2}{3}$. 2. $1\frac{1}{3}$. 3. $4\frac{2}{3}$.

Окончание табл. 3

Действие	Задание
Знает 1) определение первообразной; 4) формулу Ньютона-Лейбница Умеет 2) находить определенный интеграл; 6) вычислять объем тела, полученного вращением плоской фигуры Владеет 1) основными методами вычисления первообразной 2) методами вычисления определенного интеграла; 4) методами применения интеграла к решению практических задач	Найдите объем тела, полученного при вращении вокруг оси абсцисс фигуры, ограниченной линиями: $y = \sqrt{x}$, $y=0$, $y=x-2$  1. $2\frac{1}{3}\pi$ 2. $5\frac{1}{3}$ 3. $5\frac{1}{3}\pi$ 4. $3\frac{1}{3}\pi$
Знает 3) определение определенного интеграла; 4) формулу Ньютона-Лейбница; Умеет 2) находить определенный интеграл; Владеет 2) методами вычисления определенного интеграла; 4) методами применения интеграла к решению практических задач	Найдите массу стержня длины l =100 см, если линейная плотность стержня изменяется по закону $\rho(x) = (20x + 0{,}15x^2)$, где x – расстояние от одного из концов стержня. 1. 1005 г. 3. 3,5 кг. 2. 15 кг. 4. 150 кг
Знает 3) определение определенного интеграла; 4) формулу Ньютона-Лейбница; Умеет 2) находить определенный интеграл; Владеет 2) методами вычисления определенного интеграла; 4) методами применения интеграла к решению практических задач	Вычислите работу, необходимую для того, чтобы, чтобы выкачать воду из полусферического резервуара радиуса R=4 м. Установите правильную последовательность. 1. Переходя к дифференциалу, получим $dF(x) = \pi\rho g(16 - x^2)dx$. 2. Полагаем слой цилиндрическим с высотой Δx. 3. Вес слоя $\Delta P = \rho g \Delta V$. 4. Тогда $dA(x) = x\pi\rho g(16 - x^2)dx$. 5. Разделим жидкость на элементарные слои и выделим один из них, расположенный на глубине x от поверхности. 6. Объем слоя $\Delta V = \pi r^2 \Delta x = = \pi(16 - x^2)\Delta x$. 7. $A = \int_0^R x\pi\rho g(16 - x^2)dx = 64\ \pi\rho g$. Ответ:_____.

Анализ выполнения студентами тестовых заданий позволяет судить о ходе их математической подготовки и отслеживать процесс формирования их общих и профессиональных компетенций.

Библиографический список

1. Болотов, В.А. Основные подходы к созданию общероссийской системы оценки качества образования в Российской Федерации / В.А. Болотов // Вопросы образования. – 2004. – № 3. – С. 19.

2. Зеер, Э. Компетентностный подход к модернизации профессионального образования / Э. Зеер // Высшее образование в России. – 2005. – № 4. – С. 23–30.

3. Ингенкамп, К. Педагогическая диагностика / К. Ингенкамп; Пер. с нем. − М.: Педагогика, 1991. − 240 с.

К содержанию

ББК Ч448.027.8
УДК 378.026.1 + 378.147.88

К ВОПРОСУ О ГОТОВНОСТИ СТУДЕНТОВ К НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Г.С. Кочеткова

Дан понятийный аппарат проблемы формирования исследовательской компетентности у студентов.

Ключевые слова: профессиональная компетентность, исследовательская компетентность.

Необходимое совершенствование профессиональной подготовки специалистов технического профиля определяется задачами обеспечения конкурентоспособности отечественной продукции, импортозамещением зарубежной продукции. На заседании Совета по науке и образованию в июне 2014 г. Президент России В.В. Путин отметил, что «лидерами глобального развития становятся те страны, которые способны создавать прорывные технологии и на их основе формировать собственную мощную производственную базу». Президент подчеркнул: «Качество инженерных кадров становится одним из ключевых факторов конкурентоспособности государства и, что принципиально важно, основой для его технологической, экономической независимости».

Важное место в содержании подготовки инженера занимает подготовка к исследовательской деятельности. Учеными предпринимаются попытки систематизации ее отдельных сторон, построения теорий в соответствии с усложнением функционала специалиста технического профиля, осознается потребность формирования у студентов комплексного понимания исследовательской деятельности с учетом межпредметных связей.

Наиболее обоснованной и продуктивной нам представляется позиция, согласно которой процесс подготовки включает методологический, теоретический, методический и практический компоненты. Данная точка зрения успешно реализована в диссертационных исследованиях по дидактике высшей школы Е.Е. Боровковой [1], Е.И. Винтер [2], Р.Ф. Ковтун [3], Т.И. Смаглий [5], Н.В. Тельтевской [6], А.Д. Чурсиной [7], Н.М. Яковлевой [8] и др.

В содержании профессиональной готовности принято выделять теоретическую и практическую составляющую, которые включают: систематизированные предметные знания, мыслительные умения (аналитические, прогностические, рефлексивные, проективные и др.), представления, ценностные ориентации – теоретическая готовность; а также предметные умения, технику профессиональной деятельности – практическая готовность.

Профессиональная компетентность трактуется как гибкая, динамически развивающаяся совокупность необходимых для осуществления определенного вида деятельности знаний, умений и качеств личности специалиста.

Под исследовательской компетентностью мы будем понимать вид профессиональной компетентности, обеспечивающий эффективное осуществление профессионально-исследовательской деятельности. Исследовательская компетентность может быть сформирована только в процессе осуществления студентами исследовательской деятельности, которая должна пронизывать весь процесс обучения в вузе.

Содержательное наполнение исследовательской деятельности специалиста определяется различными факторами: в частности, его профилем, сферой деятельности; опытом осуществления исследований, арсеналам средств и методов работы, т.е. качеством подготовки; условиями исследовательского задания и др.

Процесс подготовки к исследовательской деятельности будущих специалистов технического профиля должен быть направлен на формирование исследовательской компетентности, обеспечивающей возможность оперирования с указанными выше видами технических систем. Под формированием исследовательской компетентности будущих специалистов будем понимать процесс систематизированного накопления в ее содержании позитивных количественных и качественных изменений, позволяющих студентам эффективно осуществлять научно-техническое исследование.

Подготовка к научно-исследовательской деятельности студентов предполагает действия в двух основных взаимосвязанных направлениях: а) обучение студентов элементам исследовательского труда, формирование исследовательского опыта; б) собственно научные исследования, проводимые студентами под руководством преподавателей [4, с. 37]. При этом организация в указанных направлениях, по мнению современных исследователей, должна осуществляться с учетом следующих принципов подготовки: научности, системности, связи теории с практикой, непрерывности образовательного процесса, гуманизма, модульности и др.

Система подготовки будущих специалистов технического профиля к исследовательской деятельности должна включать в себя, как минимум, три основных компонента: теоретический, организационно-методический и практический. Основное назначение теоретической подготовки состоит в обеспечении усвоения студентами целостной системы знаний в области научно-технического исследования, знакомства с методами его осуществления, усвоение закономерностей, принципов и правил исследовательской деятельности.

Организационно-методическая подготовка предполагает овладение будущими специалистами организационными знаниями и умениями для осуществления индивидуального и коллективного научно-технического исследования, умениями применения исследовательских методик, а также изучение, анализ и применение эффективного опыта по совершенствованию технических объектов, знаний о правилах составления нормативной документации по результатам исследовательской деятельности.

Назначение практической подготовки заключается в формировании необходимых для самостоятельной исследовательской деятельности умений, в овладении техникой проведения исследований. В рамках практической подготовки студент приобретает фактический опыт решения исследовательских задач, оттачивает свое мастерство, формирует навыки работы с техникой, развивает представления о науке и ее реальных возможностях через осуществление собственной исследовательской деятельности.

Система подготовки к исследовательской деятельности характеризуется открытостью, динамичностью, управляемостью, гибкостью. Открытость системы выражается в учете влияния на ее содержание и функционирование внешней среды, а также обратного влияния самой системы на внешние изменения образовательного процесса в целом. Динамичность состоит в возможности позитивных преобразований системы, ее диалектического развития, которое обеспечивается адекватным выбором методов, технологий, осуществлением продуктивного взаимодействия субъектов. Управляемость проявляется в чувствительности системы к воздействиям со стороны преподавателя, к его влияниям по направлению развертывания процесса подготовки в необходимом направлении. Гибкость заключается в быстрой адаптации наполнения системы к изменениям образовательного процесса, что обеспечивается внутренним технологичным построением системы с учётом обратной связи и коррекционного аппарата.

Реализация системы подготовки будущих специалистов технического профиля к исследовательской деятельности требует учета следующих принципов: профессиональной направленности содержания исследовательской подготовки, непрерывности и преемственности исследовательской деятельности, ориентации на профессионально-личностные ценности, активности и самостоятельности субъектов исследовательской деятельности, обратной связи.

Педагогическими условиями эффективного функционирования системы подготовки будущих специалистов технического профиля к исследовательской деятельности являются: а) реализация в процессе исследовательской подготовки межпредметных связей; б) включение студентов в активную проектировочную деятельность; в) организация процесса подготовки на основе продуктивной партисипации. Реализация первого условия способствует повышению эффективности функционирования построенной нами системы подготовки за счет улучшения качества усвоения учебной информации, второго условия – благодаря обеспечению формирования у студентов практического опыта исследовательской деятельности, а третьего – вследствие улучшения психологического климата и комфорта процесса исследовательской подготовки студентов.

Таким образом, проблема подготовки будущих специалистов технического профиля к исследовательской деятельности будет решаться более эффективно при использовании специально созданной системы, реализованной на фоне комплекса педагогических условий.

Библиографический список

1. Боровкова, Б.Е. Формирование межкультурных коммуникативных умений будущего учителя: дис. ... канд. пед. наук / Е.Е. Боровкова. – Челябинск, 1996. – 199 с.

2. Винтер, Е.И. Педагогическое стимулирование как фактор профессионально-творческой подготовки будущего учителя: дис. ... канд. пед. наук / Е.И. Винтер. – Челябинск, 2004. – 178 с.

3. Ковтун, Р.Ф. Подготовка молодых специалистов высших учебных заведений к воспитательной работе со студентами: дис. ... канд. пед. наук / Р.Ф. Ковтун. – Челябинск, 2005. – 169 с.

4. Основы научных исследований: учеб. для тех. вузов / под ред. В.И. Крутова, В.В. Попова. – М.: Высш. школа, 1989. – 400 с.

5. Смаглий, Т.И. Формирование готовности будущих учителей к профессионально-педагогическому сотрудничеству в системе высшего образования: дис. ... канд. пед. наук / Т.И. Смаглий. – Челябинск, 2003. – 177 с.

6. Тельтевская, Н.В. Теоретико-методологические основы формирования системы профессионально-педагогических знаний будущих учителей: дис. ... д-ра пед. наук / Н.В. Тельтевская. – Волгоград, 2003. – 333 с.

7. Чурсина, А.Д. Формирование коммуникативно-познавательных умений у студентов средствами новых информационных технологий: дис. ... канд. пед. наук / А.Д. Чурсина. – Челябинск, 2002. – 207 с.

8. Яковлева, Н.М. Теория и практика подготовки будущего учителя к творческому решению воспитательных задач: дис. ... д-ра пед. наук / Н.М. Яковлева. – Челябинск, 1992. – 403 с.

9. Реорганизация Российской академии наук 2013. Хронология, мнения, протесты; наука в РАН [Электронный ресурс] // Заседание Совета при президенте по науке и образованию. – URL: http://www.saveras.ru/archives/9859/.

К содержанию

УДК 378.04 + 378.14.014.13

ОБ ОРГАНИЗАЦИИ РАЗНОУРОВНЕВОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ В ГРУППАХ

Е.С. Орлова

В данной работе обсуждаются вопросы работы в группах на разных уровнях с учетом подготовленности студентов к освоению некоторой темы. Вопросы организации познавательных умений обучающихся на различных уровнях является с одной стороны сложным процессом, требующим от преподавателя большего внимания и концентрации, чем при обычных занятиях, а с другой стороны – современный уровень подготовленности абитуриентов делает такой подход очень важным при подготовке выпускников высших учебных заведений.

Ключевые слова: разноуровневая работа, работа в малых группах.

Вопросы организации работы по развитию познавательных умений и активности учащихся волновали педагогов во все времена. Позвольте вначале предложить вашему вниманию выдержки из предисловий к книге «Математическая смекалка. Занимательные задачи, игры, фокусы, парадоксы», изданные в 1908 и 1911 годах автора Игнатьева Емельяна Игнатьевича: «Первоначальные математические познания должны входить с самых ранних лет в наше образование и воспитание. Само собой разумеется, при этом, что умственную самостоятельность и «смекалку» нельзя ни «вдолбить», ни «вложить» ни в чью голову. Результаты надежны лишь тогда, когда введение в область математических знаний совершается в ясной и приятной форме, на предметах и примерах обыденной и повседневной обстановки, подобранных с надлежащим остроумием и занимательностью».

Относительно математики в нашем обществе еще до сих пор существуют самые разные предрассудки. Одни говорят, что заниматься математикой могут только исключительные, одаренные совсем особыми способностями умы, другие утверждают, что для этого необходима особая, так сказать, «математическая память» для запоминания формул и т.д.

Нельзя, конечно, спорить против того, что существуют умы с резко выраженными склонностями к той или иной стороне умственной деятельности. Но точно также никоим образом нельзя утверждать, что существуют хотя мало-мальски нормальные умы, которые совсем не способны к восприятию и полному усвоению необходимых математических знаний, хотя бы, скажем, в размерах курса средней школы».

«В математике следует помнить не формулы, а процесс мышления. Прежде всего, приучайте охотно и сознательно мыслить. Остальное приложится».

Фактически Емельяном Игнатьевым еще в начале XX века были озвучены педагогические условия развития познавательных умений учащихся:

- первоначальные математические познания должны входить с ранних лет;
- введение в мир математики нужно совершать в ясной и приятной форме, с надлежащим остроумием и занимательностью, и этот процесс должен быть успешным (психологами доказано, что знания, усвоенные без интереса, не окрашенные собственным, положительным отношением, эмоциями, не становятся полезными – это мертвый груз);
- в математике следует помнить не формулы, а процесс мышления, то есть следует обучать методам мышления.

Для достижения данной цели, а именно развития познавательных умений обучающихся, воспользуемся атрибутивным анализом, который позволяет нам выделить следующие объекты, влияющие на достижение цели, а именно:

1) обучающийся (студент);
2) преподаватель;
3) учебные (методические) материалы;
4) учебные условия.

От студентов, их способностей, возможностей, привычек, зависят формы организации их деятельности (индивидуальная, парная, групповая, фронтальная и др.).

Педагог, исходя из собственных возможностей и способностей, задает формы и приемы обучения (инструкция, опрос, беседа, самостоятельная и контрольная работы, классификация и систематизация материала).

Содержание учебного материала позволяет организовать уровни деятельности, как студентов, так и педагогов: объяснительно-иллюстративный, репродуктивный, частично-поисковый, проблемный, исследовательский, творческий.

Условия, исходя из особенностей и возможностей факультета, позволяют использовать: доску, мел, таблицы, чертежи, фильмы, компьютерные технологии.

Деятельность каждого из объектов (студента, педагога, учебных материалов и условий) может находиться на одном из трех уровней: репродуктивном, частично-поисковом и творческом. Рассмотрим эти уровни для каждого объекта более подробно.

1. Объект «Студент»

Репродуктивная деятельность студентов чаще всего имеет форму фронтального или группового вида.

Частично-поисковая деятельность чаще всего имеет групповую форму (типа «мозговой штурм»).

Творческая деятельность чаще всего имеет индивидуальную форму (составление индивидуальных проектов, выполнение индивидуальных заданий).

2. Объект «Педагог»

На репродуктивном уровне преподаватель дает инструкции, рассказывает алгоритмы, проводит опрос студентов, организует работу с учебниками, выдает самостоятельные задания.

На частично-поисковом уровне преподаватель проводит проблемные беседы, классификацию и систематизацию учебного материала, предлагает контрольные работы разного уровня.

На творческом уровне преподаватель предлагает творческие домашние задания и исследовательские задания на занятиях.

3. Объект «Учебный материал»

Репродуктивный уровень деятельности для учебного материала представляет собой набор задач с готовыми решениями (т.н. «решебники»).

Частично-поисковой уровень для учебного материала представляет собой разделы с дополнительными задачами повышенной сложности, а также некоторыми логическими задачами (на смекалку).

Творческий уровень для учебного материала представляет собой различную специализированную математическую литературу, к примеру, тематические учебные пособия и сборники олимпиадных задач.

4. Объект «Учебные условия»

На репродуктивном уровне подразумевается использование доски и мела, готовых таблиц и наглядных пособий.

На частично-поисковом уровне подразумевается составление систематизированных схем, таблиц, наглядных пособий.

На творческом уровне подразумевается возможности компьютерного моделирования и программирования.

Сформулируем рекомендации по развитию *познавательных умений* в рамках выше перечисленных объектов в ходе учебного процесса в вузе.

1. По объекту «Студент»

В ходе учебного процесса можно выделить группы студентов с разным уровнем способностей (слабых, средних и сильных) и предложить для них следующие формы и методы обучения:

- слабых объединять в группы (по 4 человека одного уровня) или определяя к ним в качестве лидера более сильного студента (с дополнительным заданием для него). Во внеучебное время проводить для них дополнительные занятия, консультации, выдавать обязательные домашние задания;
- для средней группы можно применять парный или групповой метод, также дополнительно (при необходимости) назначать лидера из сильной группы;

- для сильных студентов группы можно предлагать работу в парах на занятиях или работу лидером в других, более слабых группах или индивидуальную по особому плану. Во внеучебное время можно проводить коллоквиумы, консультации, приглашать одаренных студентов на заседания научных кафедральных семинаров, выдавать творческие задания, проводить занятия по подготовке к олимпиадам.

2. По объекту «Педагог»

Деятельность преподавателя предполагает определенные действия на следующих этапах занятия:

- на мотивационном этапе – формирование интереса студентов к данной теме занятия и к процессу решения задач данной темы. Этот этап включает обобщенную формулировку задач данного класса (на примере одной ярко сформулированной) и показ рационального («красивого») способа решения задач;
- на этапе целеполагания – привлечение студентов к совместной деятельности по формулировке цели занятия и обучение разнообразным мыслительным операциям: анализу, сравнению, группировке и т.д.;
- на подготовительном этапе – развитие внимания, воображения, памяти и мышления в ходе выполнения устных упражнений, решения логических задач разного уровня;
- на основном этапе – обучение методам решения задач, составлению новых познавательных задач, осмыслению полученных результатов, обобщению и систематизации полученных данных;
- на этапе применения – постановка новых проблемно-поисковых задач и начало самостоятельной частично-поисковой деятельности;
- на творческом этапе – выдача домашних творческих исследовательских заданий на составление новых задач, поиска новых способов и методов решения.

3. По объекту «Учебные материалы»

Рассматривая более подробно учебные материалы, а именно задачи, стоит упомянуть о видах задач на основании различных признаков:

- по характеру объектов задачи делятся на практические (реальные) и математические;
- по характеру требований – на задачи по нахождению (распознаванию) искомых, на преобразование или построение, на доказательство или объяснение;
- по выполняемым функциям – обучающие (для отработки знаний, умений, навыков), развивающие (развитие мыслительных процессов) и контролирующие уровень математической подготовки (т.е. уровни деятельности).

На каждом уровне деятельности учебно-методических материалов можно выделить также и три уровня сложности предлагаемых задач. Рассмотрим их более подробно.

Итак, репродуктивные задачи можно условно разделить на:

- простые, т.е. алгоритмические, одношаговые задачи для первичного закрепления теоретического материала и соответствующих умений студентов;
- средние, т.е. алгоритмические многошаговые задачи для отработки известных алгоритмов;
- сложные, т.е. алгоритмические многошаговые задачи для отслеживания достижения стандарта образования.

Частично-поисковые задачи условно делятся на:

- простые, т.е. задачи, в которых требуется из известных алгоритмов выбрать нужный и применить его;
- средние, т.е. задачи, в которых требуется оценить несколько способов решения и выбрать наиболее рациональный способ;
- сложные, т.е. задачи, в которых требуется из известных алгоритмов скомбинировать новый метод решения задачи.

На творческом уровне можно аналогично выделить задачи:

- простые, т.е. задачи, в которых предполагается поиск нового метода решения на основе известных решений;
- средние, т.е. задачи, предполагающие нахождение нового оригинального метода решения;
- сложные, т.е. задачи, требующие в процессе решения создания нового продукта творческой мысли.

Приведем примеры заданий по теме «Предел функции на бесконечности».

Репродуктивный уровень:

1 уровень сложности: $\lim\limits_{x\to\infty}\frac{6x^3-2x+1}{6x^4+4x^2-5}$;

2 уровень сложности: $\lim\limits_{x\to\infty}\left(\frac{3}{x+2}-\frac{5}{2x+1}\right)$;

3 уровень сложности: $\lim\limits_{x\to\infty}\frac{6^x-3x^2+1}{2^x+6x-1}$;

Частично-поисковый уровень:

1 уровень сложности: $\lim\limits_{x\to\infty}\frac{(2x+100)^3}{(3x+10)^2(x+3)^{11}}$;

2 уровень сложности: $\lim\limits_{x\to\infty}\frac{1-q^x}{1-q}, q\neq 1$;

3 уровень сложности: $\lim\limits_{x\to\infty}\left(\frac{1}{1\cdot 2}+\frac{1}{2\cdot 3}+\cdots+\frac{1}{x\cdot(x+1)}\right)$;

Творческий уровень:

1 уровень сложности: доказать, что $\lim\limits_{x\to\infty}\frac{1}{x^3-1}=0$;

2 уровень сложности: доказать, что функции $y = e^{\frac{k}{x}} - 1$ и $y = \frac{k}{x}$ эквивалентны при $x \to \infty$;

3 уровень сложности: доказать, что $\lim_{x\to\infty} \sin x$ не существует. Привести примеры бесконечно малых функций при $x \to 1$, $x \to 2$, $x \to 3$, но не являющихся бесконечно малыми в окрестностях других точек.

По объекту «Учебные условия»

Для организации данной работы необходимо создать определенные условия для обучения учащихся разного уровня способностей и деятельности: оборудованные кабинеты с наличием специальной учебно-методической литературы и современных технических средств обучения.

Подводя итог, можно *сформулировать следующие рекомендации*.

Для слабых студентов желательно предлагать:

- при решении задач набор формул и правил по изучаемой теме;
- примеры решения данного блока задач;
- список контрольных вопросов по теме;
- различные обобщения.

Для средних студентов желательно предлагать:

- задачи разного уровня деятельности и сложности;
- использовать различную литературу по изучаемой теме;
- самостоятельно составлять обобщения по темам;
- решать задачи на коллоквиумах.

Для сильных студентов желательно предлагать:

- решать творческие задачи;
- искать разнообразные способы решения одной и той же задачи;
- составлять собственные задания;
- решать олимпиадные задачи;
- проводить консультации для слабых студентов.

В ходе занятия желательно:

- предлагать различные логические задачи;
- предлагать различные способы рационального счета;
- рассматривать различные способы решения задач;
- показывать обобщения;
- учить классификации;
- стимулировать желание решать задачи более высокого уровня сложности и деятельности;
- выдавать творческие домашние задания;
- организовывать коллоквиумы по решению нестандартных задач.

В заключение можно сказать, что в наших руках, руках преподавателей, есть все возможности для поднятия на новый, высокий уровень деятельности как нас самих, так и учебно-методических материалов, условий для обучения и, в конечном итоге, наших студентов.

Библиографический список

1. Епишева, О.Б. Учить школьников учиться математике: Формирование приемов учебной деятельности: Кн. для учителя / О.Б. Епишева, В. И. Крупич. – М.: Просвещение, 1990. – 128 с.
2. Игнатьев, Е.И. Математическая смекалка. Занимательные задачи, игры, фокусы, парадоксы / Е.И. Игнатьев. – М., Омега, 1994. – 192 с.
3. Крутецкий, В.А. Психология математических способностей школьников. / В.А. Крутецкий. – М.: Просвещение, 1968. – 432 с.
4. Окунев, А.А. Как учить не уча / А.А. Окунев. – СПб: Питер Пресс, 1996. – 448 с.
5. Сериков, Г.Н. К вопросу о моделировании учебно-познавательной деятельности / Г.Н. Сериков // Пути повышения эффективности учебно-познавательного процесса в педагогическом вузе. – Челябинск, 1979. – С. 74–81.
6. Черкасов, В.А. Взаимосвязь методов и приемов обучения как условие их оптимизации деятельности / В.А. Черкасов // Пути повышения эффективности обучения в школе. – Челябинск, 1981. – С. 3–20.
7. Шуба, М.Ю. Учим творчески мыслить на уроках математики: пособие для учителей общеобразоват. учреждений / М.Ю. Шуба. – М.: Просвещение, 2012. – 218 с.
8. Якиманская, И.С. Разработка технологии личностно-ориентированного обучения / И.С. Якиманская // Вопросы психологии. – 1995. – № 2. – С. 31–42.

К содержанию

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

УДК 539.162 + 539.165

СТАТИСТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ВЫБРОСОВ АКТИВНОСТИ РАДИОНУКЛИДА ИТТРИЙ-90

А.А. Шульгинов

Проведено экспериментальное исследование бета-распада иттрия-90 с целью обнаружения аномальных выбросов активности, среднего временного промежутка между импульсами и коэффициента вариации временного промежутка между импульсами. Выполнен статистический анализ появления аномальных выбросов по экспериментальным данным и по результатам моделирования.

Ключевые слова: бета-распад, статистический анализ.

Согласно современным представлениям, прямой бета-распад радионуклидов обусловлен только внутренними процессами, происходящими внутри ядер. Внешние явления не могут заметно влиять на скорость и другие параметры радиоактивного распада. Однако имеется ряд исследований, в которых доказано, что, вероятно, внешние факторы всё же могут влиять на этот процесс. Научный коллектив, возглавляемый С.Э. Шнолем, исследовал периодичность бета-распада радионуклидов [1]. В этих работах было доказано, что форма гистограммы процесса подвержена периодическим изменениям с периодами 24 ч, около 27 суток и 365 суток. Этим фактам не было дано никаких объяснений и не было выдвинуто никаких гипотез о возможных механизмах возникновения таких явлений. На основании полученных результатов можно сделать предположение о существовании неизвестной космофизической причины, которая влияет на случайные процессы.

А.Г. Пархомов выдвинул гипотезу о том, что на скорость бета-распада могут влиять потоки нейтрино ультранизких энергий [2]. Согласно полученным экспериментальным данным, на периодограммах скорости счёта установки с источником ^{90}Sr-^{90}Y наиболее заметен годичный ритм и его субгармоники (182, 122, 91,5, 61,0 суток), а также выделяется период синодического лунного месяца (29,27 суток) [2-4]. Аналогичные результаты получили Е.Н. Авдонина и В.Б. Лукьянов в ходе измерения радиоактивности ^{14}C и трития, которое длилось 10 лет [5]. В работах других исследователей [6, 7] было также доказано, что скорость бета-распада некоторых радионуклидов подвержена вариациям различной длительности.

На протяжении 10 лет А.В. Каравайкин работал над созданием устройства, которое способно повлиять на процесс радиоактивного распада [8]. По утверждению автора, ему удалось создать прибор «НГК-ВЕГА» – гене-

ратор неэлектромагнитной материи. А.В. Каравайкин совместно с А.Г. Пархомовым провели измерения влияния излучения этого генератора на процесс радиоактивного распада препарата ^{60}Co [2]. Оказалось, что такое воздействие никак не сказалось на средней активности препарата, но значительно уменьшило разброс результатов измерений. Это дало основание авторам исследования заявить о возможности управления хаотическими явлениями, такими, как радиоактивный распад.

Таким образом, на скорость бета-распада могут влиять внешние условия, например, изменяющиеся потоки нейтрино, или потоки неизвестных видов материи. Данная работа является продолжением этих исследований. Была поставлена цель исследовать статистические характеристики не средних величин, характеризующих бета-распад радионуклида, а аномальных выбросов этих величин. В качестве источника радиоактивности был выбран ^{90}Y – дочерний изотоп ^{90}Sr. Регистрация электронов, образовавшихся при бета-распаде, производилась трубкой Гейгера СБМ-20, соединённой с компьютером. Запись велась круглосуточно на протяжении нескольких месяцев.

В качестве величин, характеризующих бета-распад, были выбраны:

1) N_j – количество импульсов с трубки Гейгера за время одного измерения длительностью 30 с;

2) R – средний временной промежуток между импульсами за время одного измерения;

3) $V = \sigma_R / R$ – коэффициент вариации временного промежутка между импульсами.

Поток электронов ослаблялся при прохождении через 4 или 5 алюминиевых пластин, т.е. производилась регистрация только самых высокоэнергетических электронов, образующихся при распаде ^{90}Y. Это было сделано для того, чтобы увеличить вклад тех электронов в измерения, которые могут образовываться при обратном бета-распаде. В основу работы была заложена гипотеза А.Г. Пархомова о том, что потоки нейтрино ультранизких энергий являются тем космофизическим фактором, который влияет на параметры бета-распада радионуклидов. Это может приводить к возникновению аномальных выбросов параметров, характеризующих бета-распад.

Экспериментальные результаты составляют следующие массивы данных:

1) измерения гамма-фона (начало 23 июля 2014 г., окончание 21 августа 2014 г., 80 тыс. измерений, $\langle R \rangle$ = 3,48 с, $\langle V \rangle$ = 0,81);

2) измерения потока бета-частиц от ^{90}Y. Между источником и детектором находилось 4 алюминиевые пластины толщиной 0,3 мм (начало 21 августа 2014 г., окончание 6 декабря 2014 г., 260 тыс. измерений, $\langle R \rangle$ = 1,67 с, $\langle V \rangle$ = 0,91, поток бета-частиц в 1,1 раза превышал фон);

3) измерения потока бета-частиц от ^{90}Y. Между источником и детектором находилось 5 алюминиевых пластин (начало 6 декабря 2014 г., окончание 10 марта 2015 г., 240 тыс. измерений, $\langle R \rangle$ = 2,55 с, $\langle V \rangle$ = 0,87, поток бета-частиц в 2,8 раза был меньше фона).

Метод выделения аномальных выбросов

В работе [9] для выделения выбросов параметров бета-распада ^{90}Y использовался критерий Роснера [10]. Этот метод хорош, когда количество данных в массиве не очень велико. В математической статистике известен метод «трёх сигм» для выделения выбросов. В данной работе для выделения выбросов использовался аналогичный метод, но применённый к двумерной функции распределения *R*-*V*. Исследованию характеристик двумерных гистограмм была посвящена работа [11]. По экспериментальным данным построена гистограмма и определён её максимум $f_{\max} = f(R_0, V_0)$. Затем были оценены уровни гистограммы $S(R,V) = \left[\lg\left(f_{\max} / f(R,V)\right)\right]$. Минимальный уровень – S = 0, был приписан тем областям гистограммы, в которых она отличалась от своего максимального значения менее чем в 10 раз. Уровень S = 1 был приписан тем областям гистограммы, в которых она отличается от максимума более чем в 10 раз, но менее чем в 100 раз и т.д. Выбросом считались те величины, которые попадали в область, где уровень S больше или равен 3, т.е. функция гистограммы отличалась от её максимального значения более чем в 1000 раз. Затем все выделенные выбросы были разделены на 4 группы, аналогично четырём квадрантам тригонометрического круга:

1) те, которые попали в область, где $R_j > R_0$ и $V_j \geq V_0$. Условно эту область обозначили R^+V^+;

2) те, которые попали в область, где $R_j \leq R_0$ и $V_j \geq V_0$ (R^-V^+);

3) те, которые попали в область, где $R_j \leq R_0$ и $V_j < V_0$ (R^-V^-);

4) те, которые попали в область, где $R_j > R_0$ и $V_j < V_0$ (R^+V^-).

Это разделение было сделано, чтобы отделить выбросы, имеющие разные причины. Если выброс попадает в область R^+V^+ или R^-V^+, то это означает, что произошло несколько близких по времени всплесков во время измерения. Причиной тому может быть, например, обратный бета-распад. Если выброс попадает в область R^-V^- или R^+V^-, то, возможной причиной этого может быть процесс, аналогичный тому, который обнаружили А.В. Каравайкин и А.Г. Пархомов [2]. Конечно, причины появления выброса могут иметь чисто случайный характер. Именно поэтому, помимо экспериментальных данных для анализа результатов были использованы и данные моделирования процесса. При моделировании считалось, что появление импульса – чисто случайное событие с той же вероятностью, с которой они появлялись в ходе эксперимента. При этом длина массива данных моделирования была такой же, как и длина массива экспериментальных данных.

Экспериментальные данные и данные моделирования

В таблице представлено сравнение экспериментальных данных и данных, полученных при моделировании.

Таблица

Сравнение экспериментальных данных и данных моделирования

1) Гамма-фон	Количество выбросов (N)	Общее	R^+V^+	R^-V^+	R^-V^-	R^+V^-
	Эксперимент (N_e)	1542	363	87	156	936
	Моделирование (N_m)	1379	355	67	154	803
	Относит. отличие $(N_e–N_m)/N_m$	+12 %	+2 %	**+30 %**	+1 %	+17 %
2) ^{90}Y + 4 пластины	Эксперимент (N_e)	2148	1021	234	100	793
	Моделирование (N_m)	1777	942	170	62	603
	Относит. отличие $(N_e–N_m)/N_m$	**+21 %**	+8 %	**+38 %**	**+61 %**	**+32 %**
3) ^{90}Y + 5 пластин	Эксперимент (N_e)	2679	942	192	127	1418
	Моделирование (N_m)	2360	976	163	112	1109
	Относит. отличие $(N_e–N_m)/N_m$	+14 %	–4 %	+18 %	+13 %	**+28 %**

Основные выводы

1. Эксперимент по изучению бета-распада ^{90}Y показал, что количество аномальных выбросов величин R и V значительно превышает количество аномальных выбросов, полученное путём моделирования. Это указывает на то, что на этот процесс влияют внешние факторы. Конечно, определённую долю в аномальные выбросы вносит гамма-фон, но в экспериментах с бета-источником это превышение становится ещё больше. Особенно это заметно в эксперименте 2, в котором доля зарегистрированных бета-частиц превышала долю гамма-частиц.

2. Анализ по квадрантам. Наибольший относительный прирост количества выбросов показали области гистограммы R^-V^- и R^+V^-. Это доказывает, что при наличии бета-источника происходит уменьшение коэффициента вариации в отдельные промежутки времени. Следовательно, в природе происходят процессы уменьшения хаоса, на которые обратили внимание А.В. Каравайкин и А.Г. Пархомов [2], а также Н.Г. Големинов [7].

Библиографический список

1. О реализации дискретных состояний в ходе флуктуаций в макроскопических процессах / С.Э. Шноль, В.А. Коломбет, Э.В. Пожарский и др. // УФН. – 1998. – Т. 168, № 10. – С. 1128–1140.

2. Пархомов, А.Г. Космос. Земля. Человек. Новые грани науки / А.Г. Пархомов. – М.: Наука, 2009. – 272 с.

3. Пархомов, А.Г. Исследование неслучайных вариаций результатов измерения радиоактивности / А.Г. Пархомов // Атлас временных вариаций природных, антропогенных и социальных процессов. – М.: Янус-К, 2002. – Т. 3. – С. 607–612.

4. 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.

5. Авдонина, Е.Н. Гелиогеофизические эффекты в результатах измерения радиоактивности методами жидкостного сцинтилляционного счета и статистика радиоактивного распада / Е.Н. Авдонина, В.Б. Лукьянов // Биофизика. – 1995. – Т. 40, Вып. 4. – С. 876–881.

6. 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. Goleminov, N.G. Possible nuclear activity of dark matter / N.G. Goleminov // Gravitation and cosmology. 2002. V. 8. Pp. 2017–2020.

8. Каравайкин, А.В. Некоторые вопросы неэлектромагнитной кибернетики / А.В. Каравайкин. – М.: Наука, 2005. – 288 с.

9. Стадник, О.С. Обратный бета-распад иттрия-90 под воздействием нейтрино ультранизких энергий / О.С. Стадник, А.А. Шульгинов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 3. – С. 92–96.

10. Кобзарь, А.И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников / А.И. Кобзарь. – М.: Физматлит, 2006. – 816 с.

11. 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.

К содержанию

УДК 621.383

ИЗУЧЕНИЕ ФОТОЭФФЕКТА С ПОМОЩЬЮ УЧЕБНОГО КОМПЛЕКСА МУК-ОК

А.А. Шульгинов

Проведено исследование внешнего и внутреннего фотоэффекта с помощью учебного комплекса МУК-ОК. Изучение зависимости задерживающего напряжения вакуумного фотоэлемента от частоты света, падающего на фотокатод, позволило оценить постоянную Планка. Определена красная граница внешнего и внутреннего фотоэффекта. Оценена работа выхода электронов из фотокатода и ширина запрещённой зоны полупроводника. Исследованы световые характеристики вакуумного, полупроводникового фотодиода и фоторезистора.

Ключевые слова: фотоэффект, красная граница, работа выхода, запрещённая зона полупроводника.

Модульный учебный комплекс МУК-ОК «Квантовая оптика» производства ООО «Опытные приборы» [1] предназначен для проведения практикума по физике в высших учебных заведениях. Функционально комплекс разделён на 3 основных блока: блок управления, стенд с объектами и блок измерительных приборов. Блок управления содержит два регулируемых источника напряжения (0–6,3 В и 0–20 В) и источник питания двух светодиодных кластеров стенда с регулируемой интенсивностью. Стенд с объектами содержит вакуумный фотоэлемент, фоторезистор и фотодиод, совмещённые со светодиодными кластерами (8 длин волн). Блок измерительных приборов содержит вольтметр и амперметр. В состав комплекса могут входить и другие блоки, но все перечисленные блоки необходимы для изучения таких фотоэлектрических явлений, как внешний и внутренний фотоэффект.

Изучение внешнего фотоэффекта с помощью вакуумного фотоэлемента

Схема подключения вакуумного фотоэлемента показана на рис. 1. Если подключить вольтметр к клеммам вакуумного фотоэлемента, то, учитывая, что сопротивление вольтметра гораздо меньше сопротивления фотоэлемента, амперметр будет измерять силу тока через вольтметр. Вольтметр должен быть подключен к клеммам источника напряжения. Такая схема позволяет исследовать вольтамперную, световую и спектральную характеристики фотоэлемента [2–4].

Основные результаты исследования показаны на рис. 2–5. Ток насыщения наблюдается при приложении к фотоэлементу положительной разности потенциалов около 15 В (рис. 2). Задерживающее напряжение, полученное по вольтамперной характеристике (рис. 3), не является точным, т.к. катод и анод фотоэлемента выполнены из разных материалов, и при протекании тока между ними возникает контактная разность потенциалов, которая добавляется к внешнему напряжению. Поэтому определить красную границу фотоэффекта в этом измерении невозможно, но эта добавка не мешает оценить постоянную Планка по угловому коэффициенту прямой (рис. 3). Она получается равной h = 4,0·10–34 Дж·с. Погрешность составляет около 40 %.

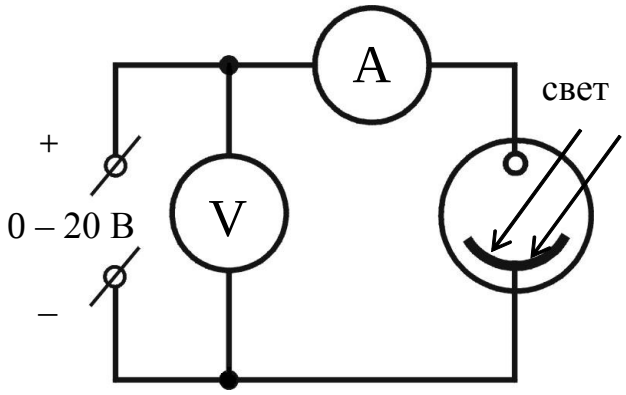


Рис. 1. Электрическая схема подключения вакуумного фотоэлемента

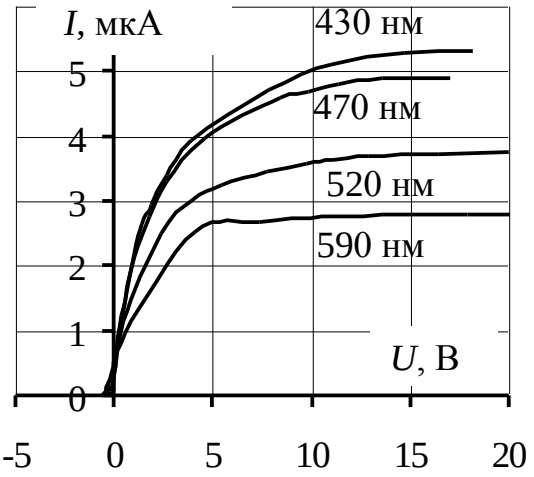


Рис. 2. Вольтамперная характеристика фотоэлемента при воздействии света разных длин волн

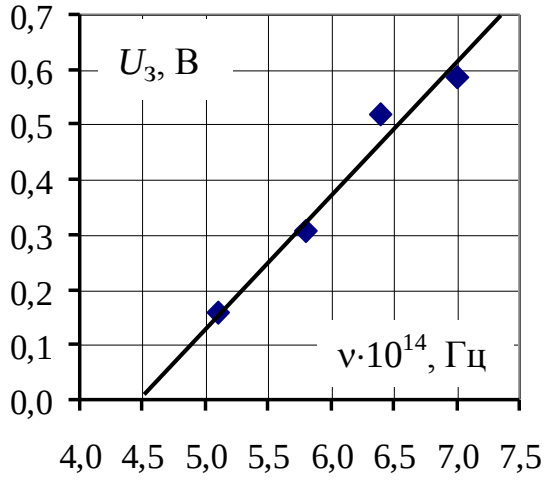


Рис. 3. Зависимость задерживающего напряжения от частоты падающего света

Световая характеристика фотоэлемента, т.е. зависимость фототока I насыщения от падающего светового потока Ф, показывает линейность фотоэлемента в широком диапазоне интенсивностей и для разных длин волн падающего света (рис. 4). Спектральная характеристика фотоэлемента показана на рис. 5. Путём экстраполяции по ней можно определить красную границу фотоэффекта ($\lambda_{кр}$ = 790 нм), а также работу выхода электронов из фотокатода (A = 1,56 эВ).

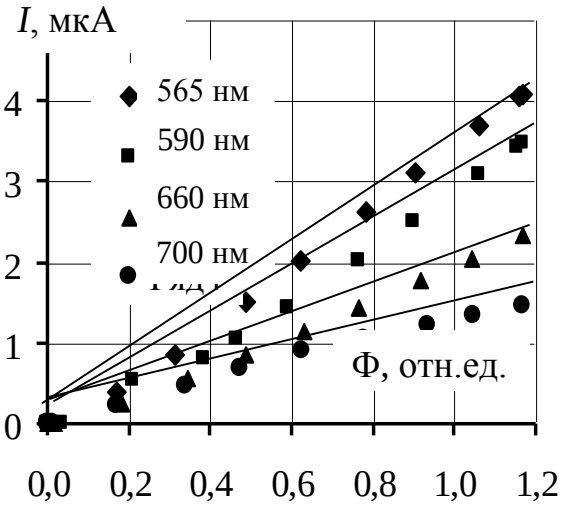


Рис. 4. Световая характеристика фотоэлемента при воздействии света разных длин волн

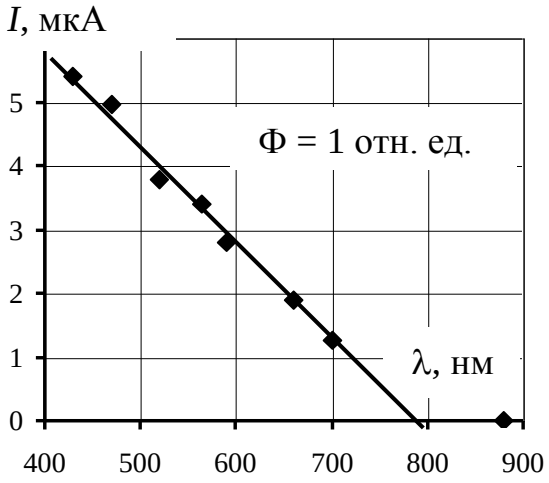


Рис. 5. Спектральная характеристика фотоэлемента

Изучение внутреннего фотоэффекта с помощью полупроводникового фоторезистора и фотодиода

Для исследования внутреннего фотоэффекта в модульном комплексе МУК-ОК имеются встроенные полупроводниковые элементы: фотодиод и фоторезистор. При воздействии света на фоторезистор, у него изменяется сопротивление, которое определяется путём измерения силы тока и напряжения на нём. Основные результаты измерений представлены на рис. 6 и 7.

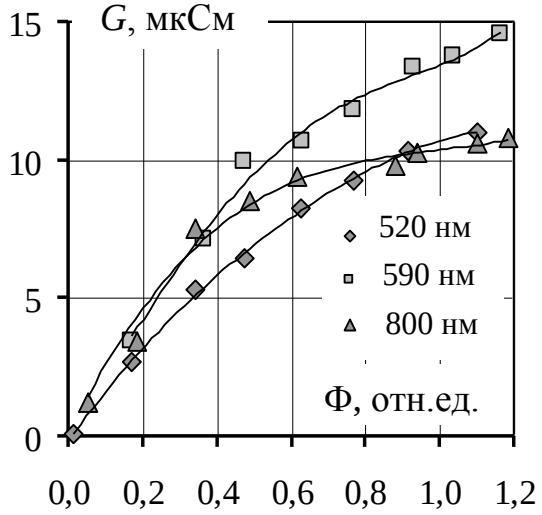


Рис. 6. Световая характеристика фоторезистора при воздействии света разных длин волн

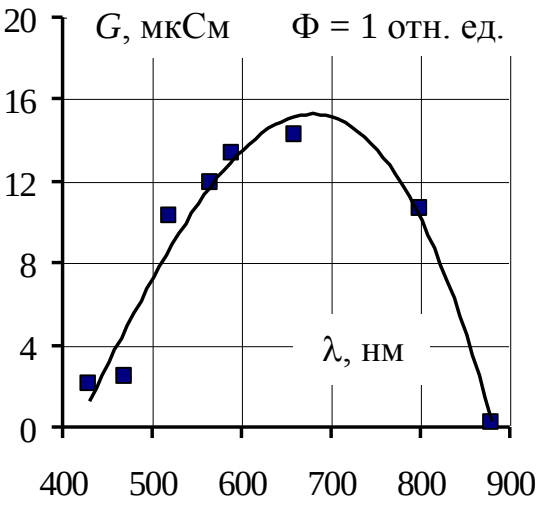


Рис. 7. Спектральная характеристика фоторезистора

Световая характеристика фоторезистора (рис. 6) – это зависимость его проводимости $G = 1/R$ от падающего светового потока Ф. Заметна существенная нелинейность этой функции при падении светового потока разных длин волн. Спектральная характеристика фоторезистора показывает диапазон чувствительности, который для данного фоторезистора составляет 420–880 нм. Красная граница фотоэффекта составляет 880 нм, что соответствует ширине запрещённой зоны – 1,40 эВ. Это близко соответствует ширине запрещённой зоны GaAs (1,42 эВ).

При воздействии света на фотодиод на его клеммах возникает разность потенциалов, которую измеряют с помощью вольтметра. Фотодиод в этих измерениях работал в вентильном режиме, т.е. внешний источник тока не подключался. В результате, было получено семейство световых характеристик – зависимостей разности потенциалов U на клеммах фотодиода от светового потока Ф при падении излучений разных длин волн (рис. 8). Кроме того, была определена спектральная характеристика фотодиода (рис. 9) – зависимость U от длины волны падающего излучения при одинаковом световом потоке. В исследованном спектральном диапазоне фотодиод проявляет незначительную селективность. Вероятно, красная граница фотоэффекта находится в ИК-диапазоне.

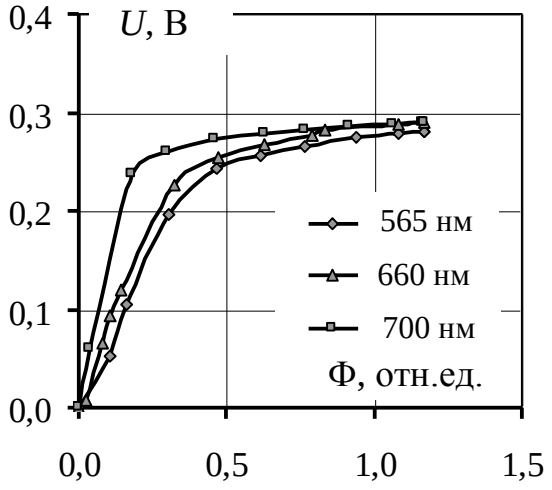


Рис. 8. Световая характеристика фотодиода при воздействии света разных длин волн

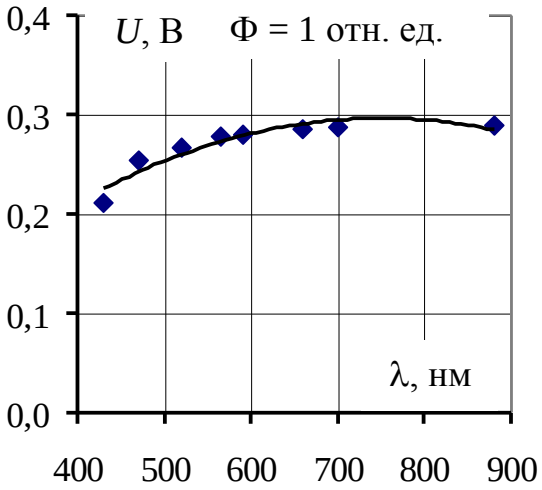


Рис. 9. Спектральная характеристика фотодиода

Таким образом, лабораторный комплекс МУК-ОК позволяет достаточно полно исследовать явления внешнего и внутреннего фотоэффекта. Но для определения красной границы внутреннего фотоэффекта на фотодиоде, необходимо либо расширить спектральный диапазон излучений до 2–3 мкм, либо заменить его на другой фотодиод, у которого красная граница не превышает 1 мкм.

Автор выражает благодарность студентам группы МТ-249 ЮУрГУ А.И. Альтдинову, А.Д. Кондакову, И.Е. Левшину и А.С. Лищуку за выполненные измерения, положенные в основу статьи.

Библиографический список

1. Физика. Модульный учебный комплекс МУК-ОК. – URL: http://www.opp-rib.ru/main/labor/html/complex/muk-ok.php.

2. Ландсберг, Г.С. Оптика. Учебное пособие / Г.С. Ландсберг. – 5-е изд. испр. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1976. – 928 с.

3. Сивухин, Д.В. Курс общей физики (в 5 томах). Т. 4. Оптика: учебное пособие для вузов / Д.В. Сивухин. – 3-е изд. стер. – М.: Физматлит, 2006. – 792 с.

4. Савельев, И.В. Курс общей физики (в 3-х томах). Т.3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твёрдого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц / И.В. Савельев. – М.: Изд-во Лань, 2008. – 320 с.

К содержанию

УДК 534.29-7/-8 + 537.622.4

ХАРАКТЕРИСТИКИ НАПРАВЛЕННОСТИ ПРОДОЛЬНЫХ УЛЬТРАЗВУКОВЫХ ВОЛН, ВОЗБУЖДАЕМЫХ В ФЕРРОМАГНИТНОМ МЕТАЛЛЕ ИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРОМ

Ю.В. Петров, С.Ю. Гуревич

Изложены результаты экспериментального определения характеристик направленности импульсного оптоакустического (лазерного) излучателя ультразвуковых волн. Описаны экспериментальный стенд и методика измерений. Проведено сравнение с пьезоэлектрическим и электромагнитоакустическим излучателем.

Ключевые слова: лазерный излучатель, ферромагнитный металл, продольные ультразвуковые волны, характеристики направленности.

Впервые процесс импульсной лазерной генерации ультразвуковых волн в металле с учетом его ферромагнитных свойств был изучен авторами работы [1]. В дальнейшем результаты этой и последующих работ рассматривались как основа для создания методов и средств неразрушающего акустического контроля ферромагнитных металлоизделий при высоких температурах и с грубообработанной поверхностью. В частности, были определены характеристики направленности импульсного лазерного излучателя продольных ультразвуковых волн при термоупругом механизме оптоакустического преобразования [2]. Резервом повышения эффективности акустического контроля металлоизделий является увеличение мощности лазерного излучения; при этом, однако, следует учитывать переход термоупругого

механизма генерации ультразвуковых импульсов в испарительный механизм (абляция), который сопровождается выносом атомов металла с его поверхности. На результаты выявления внутренних дефектов металлоизделий указанная смена механизма не повлияет, тем более, если акустическому контролю подвергаются изделия с грубообработанной поверхностью (после горячих проката, ковки, штамповки и пр.). В то же время осуществление неразрушающего контроля качества металлоизделий на ранних стадиях передела металла является эффективным, так как позволяет в результате выбраковки избежать затрат на последующие технологические операции.

Для создания методов и средств акустического контроля указанных металлоизделий необходимо знать характеристики направленности излучателей ультразвуковых волн, в рассматриваемом случае импульсных лазерных излучателей. Решение поставленной задачи производилось экспериментально.

Для проведения экспериментальных исследований использовали установку, схему которой показана на рис. 1.

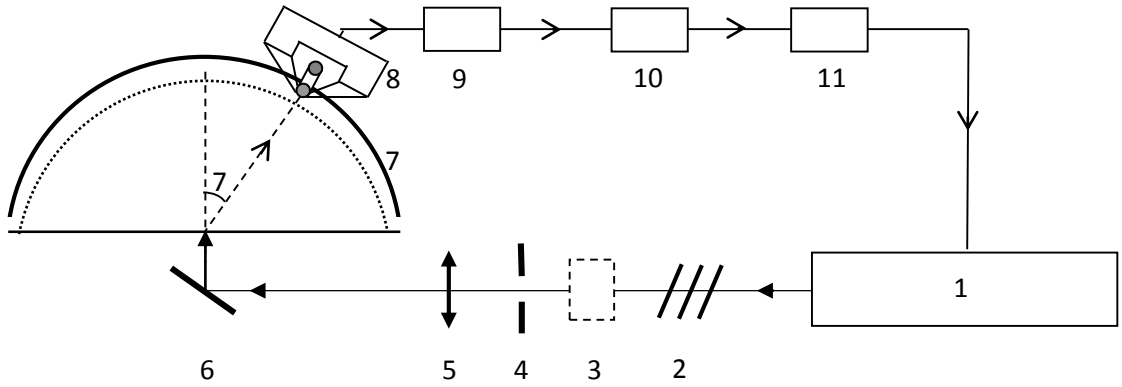


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:
1 – лазер, 2 – оптический аттенюатор, 3 – измеритель мощности лазерного излучения, 4– диафрагма, 5 – оптическая линза, 6 – поворотное зеркало, 7 – металлический полудиск, 8 – ЭМА приемник, 9 – усилитель тока, 10 – усилитель напряжения, 11 – цифровой осциллограф, – угол наблюдения

Нагрев поверхности металла осуществляется импульсным лазером 1 Nd: YAG Brilliant-B фирмы QUANTEL с модулированной добротностью. Длина волны лазерного излучения – 1064 нм, длительность и энергия световых импульсов 4–6 нс и 0,85 Дж соответственно. 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 и измерения мощности лазерного излучения использовали оптиче-

ский аттенюатор 2 и прибор ИМО-2Н 3. Размеры лазерного пятна устанавливали с помощью набора круглых диафрагм 4 и собирающей линзы 5. Направление лазерного луча устанавливали с помощью зеркала 6. Диаметр лазерного пятна принимал значения 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9,5 мм.

Поверхностная плотность тепловой мощности изменялась в пределах от q = 79 МВт/см^2 до q = 1783 МВт/см^2, что позволило реализовать испарительный механизм генерации.

В качестве образца, в котором возбуждаются ультразвуковые волны, использовали полудиск 7, изготовленный из мелкозернистого сплава инварного состава. Его диаметр и толщина равны соответственно 220 и 60 мм. На боковой поверхности полудиска нанесены полярные координаты для определения характеристики направленности лазерного излучателя в интервале от 0 º до 80 º.

Для регистрации возбуждаемых ультразвуковых волн использовали широкополосный (от 0 до 200 МГц) приемный тракт. Он состоит из последовательно соединенных электромагнитоакустического приемника (ЭМАП) 8, усилителей тока 9, напряжения 10 и цифрового осциллографа 11 модели GDS-2202. Конструкция ЭМАП обеспечивала наиболее оптимальный прием как продольных, так и поперечных ультразвуковых волн [3]. В осциллографе осуществляли цифровое запоминание импульсов, автоматическую установку их изображений, автоматическое измерение амплитудно-временных параметров, быстрое преобразование Фурье с выводом результатов на экран дисплея. Считается, что измеряемые на экране амплитуда, длительность, форма импульсов и их спектры, пропорциональны соответствующим величинам ультразвуковых импульсов. Методика исследования изложена, в основном, в работе [4].

Некоторые результаты определения параметров акустических импульсов представлены на рис. 2, 3.

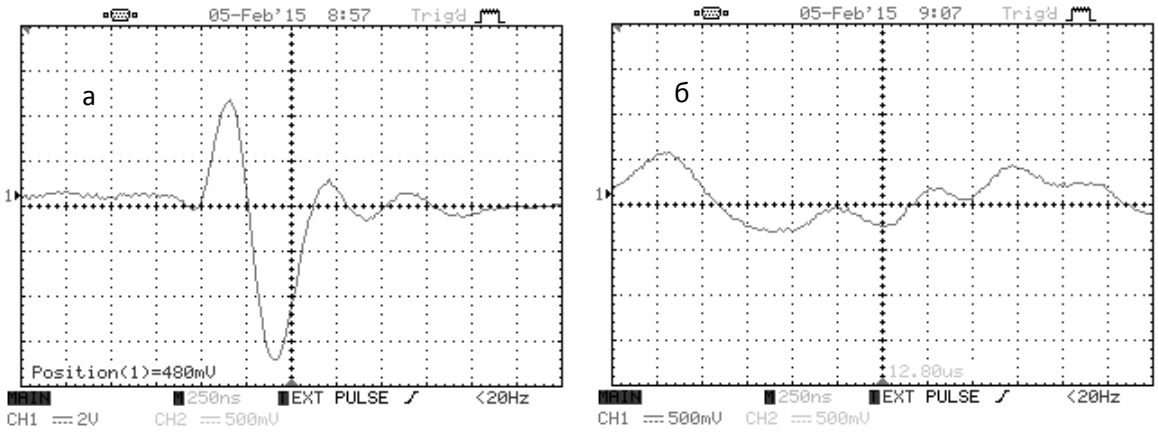


Рис. 2. Электромагнитные импульсы, зарегистрированные ЭМАП.
Диаметр лазерного пятна 9,5 мм. Угол наблюдения: а – = 0 °; б – = 80 °.
Продольные волны

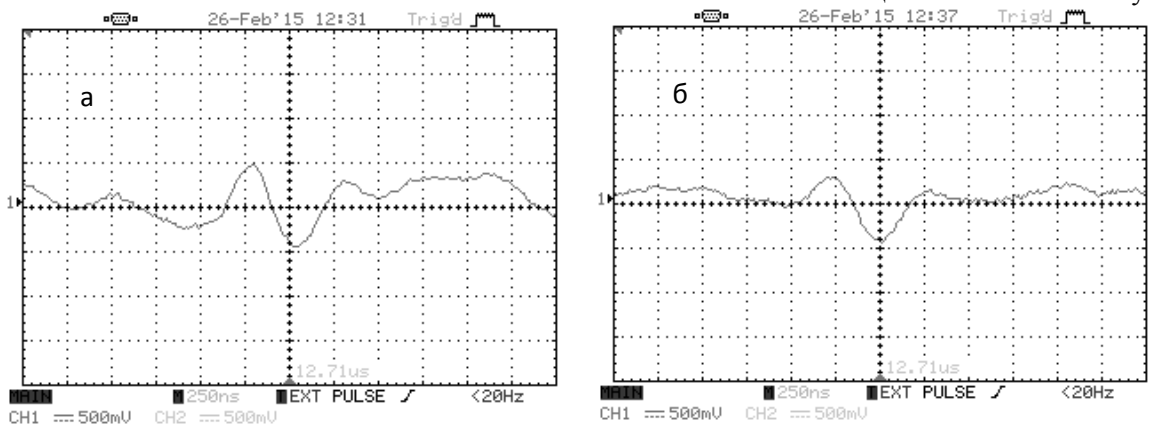


Рис. 3. Электромагнитные импульсы, зарегистрированные ЭМАП. Диаметр лазерного пятна 2,0 мм. Угол наблюдения: а – = 0 °; б – = 75 °. Продольные волны

Из сравнения представленных на рис. 2, 3 результатов следует, во-первых, что увеличение диаметра лазерного пятна приводит к увеличению амплитуды импульса почти в 3,5 раза и к сокращению условной длительности импульса с 2,3 мкс до 1,7 мкс. Условная длительность импульса определялась как сумма длительностей максимальных положительного и отрицательного пиков на временной зависимости формы импульса. Во-вторых, изменение угла наблюдения приводит к перераспределению акустической энергии между составляющими импульса: с увеличением угла наблюдения амплитуда центрального импульса уменьшается, соответственно амплитуда «боковых» составляющих формы импульса увеличивается. Таким образом, с точки зрения повышения чувствительности бесконтактных акустических методов контроля использование лазерного излучателя с увеличенным до 9…9,5 мм диаметром лазерного пятна является более эффективным, так как затухание импульса вследствие его распространения в металлоизделии в меньшей степени сказывается на импульсе большей амплитуды.

На рис. 4 представлены некоторые результаты экспериментального определения характеристик направленности лазерного излучателя для двух частных случаев.

Прежде всего, обращает на себя внимание отсутствие боковых «лепестков» характеристик направленности. По сравнению с аналогичными характеристиками пьезоэлектрических и электромагнитоакустических излучателей это является преимуществом, так как вся акустическая энергия сосредоточена в пределах центрального «лепестка». Кроме того, отчетливо проявляется более эффективное распределение акустической энергии с большим лазерным пятном. Если сравнивать ширину «лепестков» по уровню 0,7, то для лазерного пятна диаметром 9,5 мм она составляет 26 градусов, а для пятна диаметром 2 мм – 70 градусов. Промежуточные значения ширины «центрального «лепестка» в зависимости от площади лазерного пятна при неизменности мощности лазерного излучения, равной 7,5 Вт, представлены

на рис. 5. Видно, что ширина «лепестка» монотонно уменьшается по зависимости, напоминающей экспоненциальную. Противоположный характер носит зависимость максимального значения акустического сигнала, соответствующего центральному «лепестку» от площади лазерного пятна (рис. 6). Здесь максимальное значение сигнала монотонно возрастает с увеличением площади; при этом зависимость также напоминает экспоненциальную.

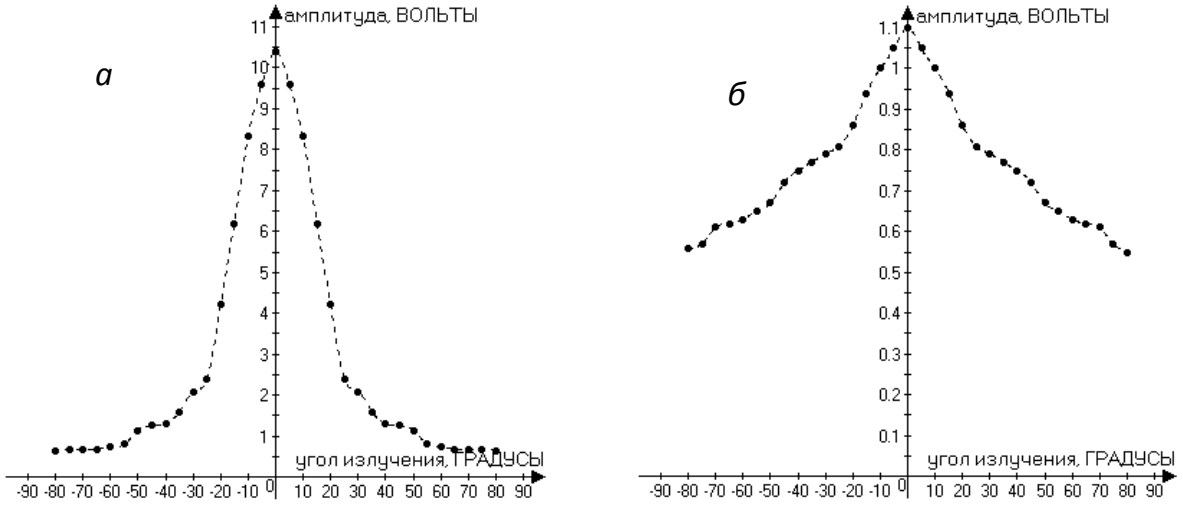


Рис. 4. Характеристики направленности лазерного излучателя импульсов продольных волн ультразвуковой квазичастоты. Диаметр лазерного пятна: *а* – 9,5 мм; *б* – 2,0 мм

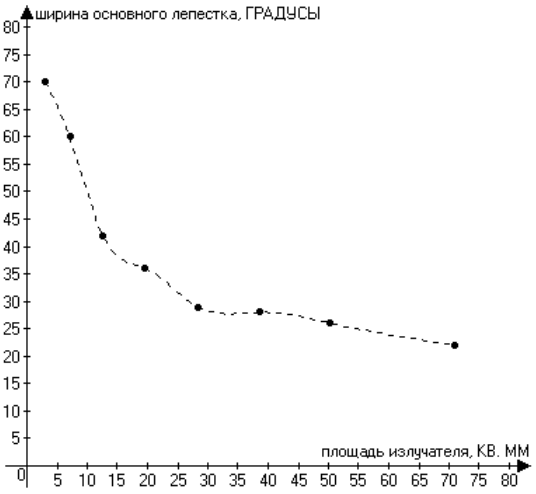


Рис. 5. Зависимость ширины центрального «лепестка» от площади лазерного пятна

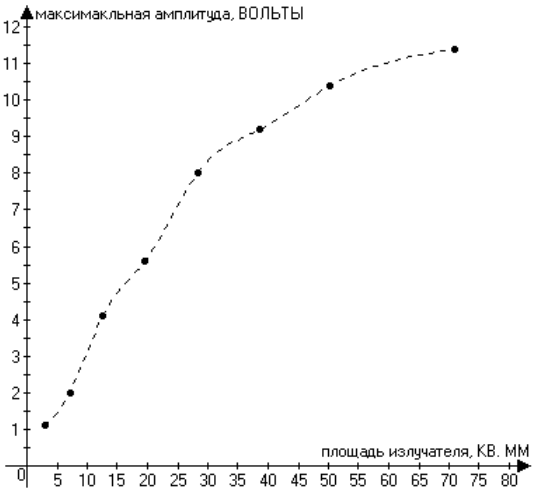


Рис. 6. Зависимость максимального значения акустического сигнала от площади лазерного пятна

Если при акустическом неразрушающем контроле качества ферромагнитных металлоизделий планируется использовать так называемый спектральный метод [5], то для его реализации необходимо знать спектральный состав акустического импульса. С этой целью было проведено соответствующее экспериментальное исследование, один из результатов которого представлен на рис. 7. Здесь изображены форма акустического импульса (вверху рисунка), и его спектр (внизу рисунка). Как видно, максимальное количество акустической энергии соответствует частоте 1,6 МГц. Кроме того, имеют место быть и другие частоты, на которые также приходится акустическая энергия, но её доля в данном случае весьма незначительна. Отметим, что спектральный анализ проводился методом быстрого преобразования Фурье, который является одним из опций осциллографа GDS-2202.

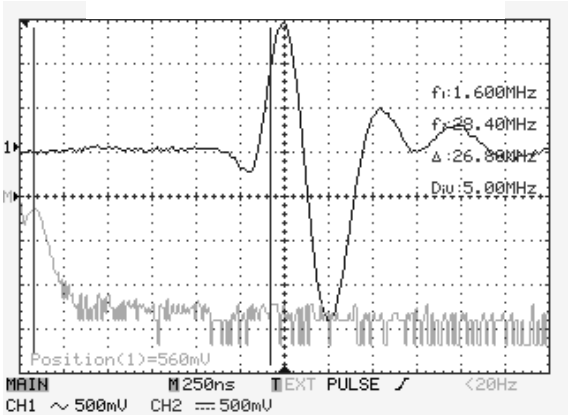


Рис. 7. Спектр акустического импульса, зарегистрированного ЭМАП. Диаметр лазерного пятна 9,5 мм. Угол = 0 °. Продольные волны

Таким образом, из результатов проведенного экспериментального исследования следует, что для повышения чувствительности и разрешающей способности [6] средств акустического контроля ферромагнитных металлоизделий, использующих импульсное лазерное излучение, эффективнее использовать импульсный лазер, дающий пятно на поверхности изделия диаметром 8–9 мм при поверхностной плотности тепловой мощности, равной 79 МВт/см^2.

Библиографический список

1. Возбуждение ультразвука в железе при фазовом переходе под действием лазерных импульсов / Г.А. Буденков, С.Ю. Гуревич, А.Д. Каунов, А.Ф. Маскаев // Акустич. журнал. – 1983. – Т. 29, № 4. – С. 561–562.

2. Гуревич, С.Ю. Стенд для определения характеристик направленности бесконтактных излучателей ультразвука / С.Ю. Гуревич, Ю.Г. Гальцев // Дефектоскопия. – 1991. – № 12. – С. 23–27.

3. Гуревич, С.Ю. ЭМА регистрация ультразвуковых волн Лэмба, возбуждаемых лазерными наноимпульсами / С.Ю. Гуревич, В.Ю. Петров, Е.В. Голубев, А.А. Шульгинов // Дефектоскопия. – 2013. – № 8. – С. 3–8.

4. Петров, Ю.В. Экспериментальные определения параметров волн Лэмба и их лазерной генерации / Ю.В. Петров, С.Ю. Гуревич, Е.В. Голубев // Дефектоскопия. – 2010. – № 3. – С. 45–49.

5. Харкевич, А.А. Спектры и анализ / А.А. Харкевич. – М.: Физматлит., 1962. – 236 с.

6. Ермолов, И.Н. Методы и средства неразрушающего контроля качества / И.Н. Ермолов, Ю.Я. Останин. – М.: Высш. шк., 1988. – 368 с.

К содержанию

УДК 531.76 + 534.29-7/-8

БЕСКОНТАКТНОЕ ИЗМЕРЕНИЕ СКОРОСТИ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ВОЛНЫ НА МАЛОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Х.Б. Толипов

Описана лабораторная установка, на которой экспериментально регистрировали акустические импульсы с малого участка поверхности. Установка включает бесконтактный электромагнито-акустический приемник, в котором индуктор был выполнен в виде двух прямых тонких параллельных проводников, находящихся на близком расстоянии друг от друга. Скорость волны Рэлея определяли в частотном диапазоне 2–10 МГц. При этих частотах длина поверхностной акустической волны варьировались от 600 до 240 мкм, а минимальная база измерения скорости волны Релея на частоте 10 МГц составила 500 мкм. Предложена новая методика измерения временного интервала между двумя акустическими импульсами.

Ключевые слова: волновое поле, теория упругости, механические напряжения, скорость волны, акустоупругость.

1. Введение

Проблема измерения скорости волны Рэлея и амплитуды смещений на малых участках поверхности давно привлекает исследователей. Его решение открывает уникальные возможности исследований в неразрушающем контроле, в физических исследованиях, технологии и т.п.

Так, например, известно [1], что скорость упругих волн, вследствие эффекта акустоупругости, зависит от механических напряжений. Однако эта скорость, как правило, является интегральной характеристикой, по которой определяется только среднее по длине значение напряжений. Однако часто

при сжатии стали [1, 2], происходит локализация деформаций практически до размеров миллиметрового диапазона. Поэтому, остаточные напряжения, складываясь с внешними, могут достигнуть и превысить предельно допустимые значения. Таким образом, уменьшение базы измерений при определении скорости волны является одной из важных задач при диагностике остаточных напряжений.

Первые шаги в этом направлении были предприняты в [2, 3], где для измерения скорости волны применили спекл-интерферометрическую установку. Авторам удалось уменьшить базу измерений до 5–10 мм, однако дальнейшее уменьшение сдерживалось диаметром светового пятна (40 мкм).

В данной статье описана лабораторная установка, позволяющая определять амплитуду смещений и скорости волн практически на неограниченно малой области поверхности. Работа этой установки была апробирована при определении амплитуд стоячей волны вблизи ребра [4–5].

2. Описание лабораторной установки

Установка также позволяет производить измерения скорости рэлеевской волны на участках миллиметрового размера. Основным элементом этой установки является электромагнитоакустический (ЭМА) приемник, расположенный на поверхности изделия для приёма волн и состоящего из постоянного магнита и индуктора, выполненного в виде двух прямых проводников.

Рассмотрим подробнее работу ЭМА приемника. При движении акустической волны по поверхности исследуемого изделия, колебания частиц среды доходят до расположения ЭМА приемника. Во внешнем магнитном поле ЭМА приемника колебания частиц среды сопровождаются появлением сил Лоренца, действующих на электроны проводимости. На поверхности электропроводящего изделия возникают магнитоакустические токи, которые излучают электромагнитную волну в окружающее пространство, и которые принимаются индуктором ЭМА приемника. Напряженность электрической составляющей электромагнитного поля вблизи поверхности определяется формулой [6]:

$$E = \frac{2HB_n^2}{\rho c_r},$$

где: H – напряженность переменного магнитного поля, вызванного колебаниями частиц среды, B_n – индукция магнитного поля, создаваемого постоянным магнитом, ρ – плотность среды, c_r – скорость волны Рэлея.

Индуктор обычно выполняется в виде плоской катушки, имеющей свою резонансную частоту [6]. Эта частота, как правило, составляет порядка единиц МГц, и создание ее с более высокой частотой наталкивается на трудности. Также отметим, что размеры таких индукторов сравнимы с размерами пьезодатчиков, находящимися в сантиметровом диапазоне. В предложенном

ЭМА приемнике индуктор представляет прямой тонкий проводник, занимающий узкую область поверхности и имеющий широкий частотный диапазон принимаемых волн. Напряжение на концах проводника такого индуктора будет линейно зависеть от его длины: $U = E\ell$.

На рис. 1 приведена блок-схема лабораторной установки, использованной для измерения амплитуды смещений поверхности и величины скорости волны Рэлея на клиновидной пластине. Как было выяснено [4–5], в этой пластине вблизи ребра возникает стоячая волновая картина, образованная падающей и отраженной от ребра волнами, и занимающая ограниченную область миллиметрового размера. Решение этой задачи было получено приближенными методами, что потребовало экспериментального подтверждения полученных результатов.

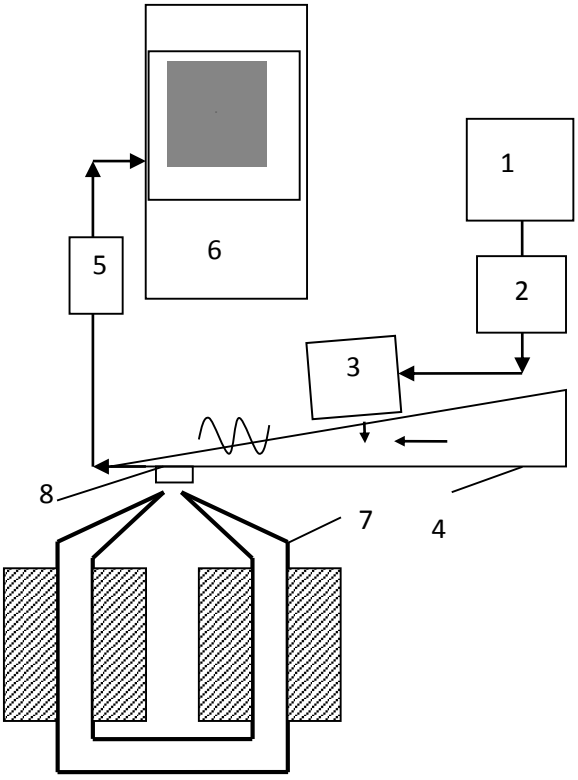


Рис. 1. Блок-схема лабораторной установки: 1 – генератор импульсов АНР 1001, 2 – высоковольтный усилитель, 3 – пьезодатчик, 4 – изделие, 5 – предусилитель, 6 – осциллограф GDS-2202, 7 – электромагнит, 8 – индуктор с проводниками 9, 10.

Акустическая волна возбуждалась наклонным пьезодатчиком 3 с углом ввода 70° импульсами длительностью 5 мксек и с частотой заполнения 2,5 МГц в направлении перпендикуляра к ребру клина. Электрические сигналы поступали на пьезодатчик с генератора импульсов 1, предварительно усиленные в блоке 2.

Клиновидная пластина 4 была выполнена из дюралюминия марки D16 с размерами 200х300 мм с углом раствора 26º. Сам ЭМА приемник состоит из электромагнита 7 и индуктора 8 представляющего собой два прямых тонких проводника диаметром 0,015 мм, жёстко закрепленные на подложке. Электрические сигналы с индуктора 8, затем через предварительный токовый усилитель 5 поступали на цифровой осциллограф 6 для определения их амплитуды. Образец перемещали относительно неподвижного ЭМА приемника с помощью микровинта (на рис. не показан) с шагом 0,5 мм. Опытные данные амплитуд смещений поверхности с этой установки представлены на рис. 2.

Измерение скорости волны Рэлея производили импульсным методом [7] на этой же установке. Базу измерения определяли два проводника 9 на индукторе (рис. 3), расположенные на небольшом расстоянии миллиметровых размеров [8].

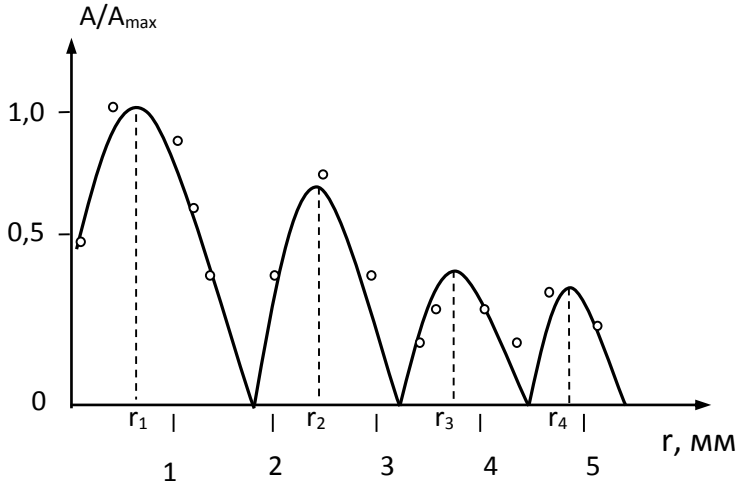


Рис. 2. Зависимость амплитуды стоячей волны
от расстояния до ребра для угла клина 26°.

Для разрешения электрических импульсов, поступающих с индуктора, применили используемый обычно в оптике критерий Рэлея [9]. Два импульса будут разрешены, если максимум амплитуды второго импульса приходится на минимум предыдущего импульса. Минимальная база измерения скорости волны Рэлея на частоте 10 МГц составила 500 мкм. В отличии от спекл-интерферометрической установки, проводники неподвижно установленные на подложке индуктора и определяющие базу измерения, можно измерить с высокой точностью. Скорость волны была определена на цифровом осциллографе, и имело значение 2740 м/сек со средним квадратичным отклонением $6 \cdot 10^{-3}$ м/сек от среднего значения по 10 измерениям. Переход на более высокие частоты позволяет еще уменьшить базу измерений, но при этом растет затухание волны, вносящее дополнительную погрешность в измерение скорости.

Эту погрешность можно значительно уменьшить, если учесть зависимость затухания от расстояния [10]. Обычно временной интервал измеряется между полуволнами в точках с максимальными амплитудами. Однако при прохождении по поверхности изделия, вследствие затухания волны, изменяется амплитуда сигнала, сопровождающаяся также изменением его формы.

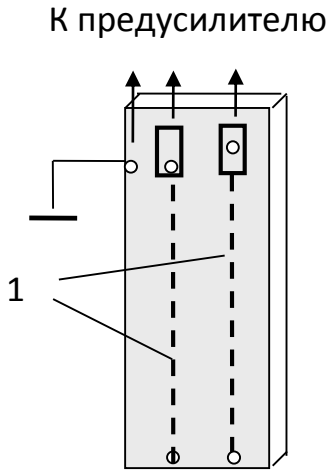


Рис. 3. ЭМА-приемник. На передней грани гетинакса располагается фольга, на задней – проводники 1

Уменьшение амплитуды волны с пройденным расстоянием по поверхности изделия происходит нелинейно, в основном, по экспоненциальной зависимости:

$$U = U_0 \exp(-\delta x) \cos(\omega t - kx),$$

где U_0 – начальное смещение, ω – круговая частота, δ – коэффициент затухания, t – время, k – волновое число, x – координата, вдоль которой распространяется волна.

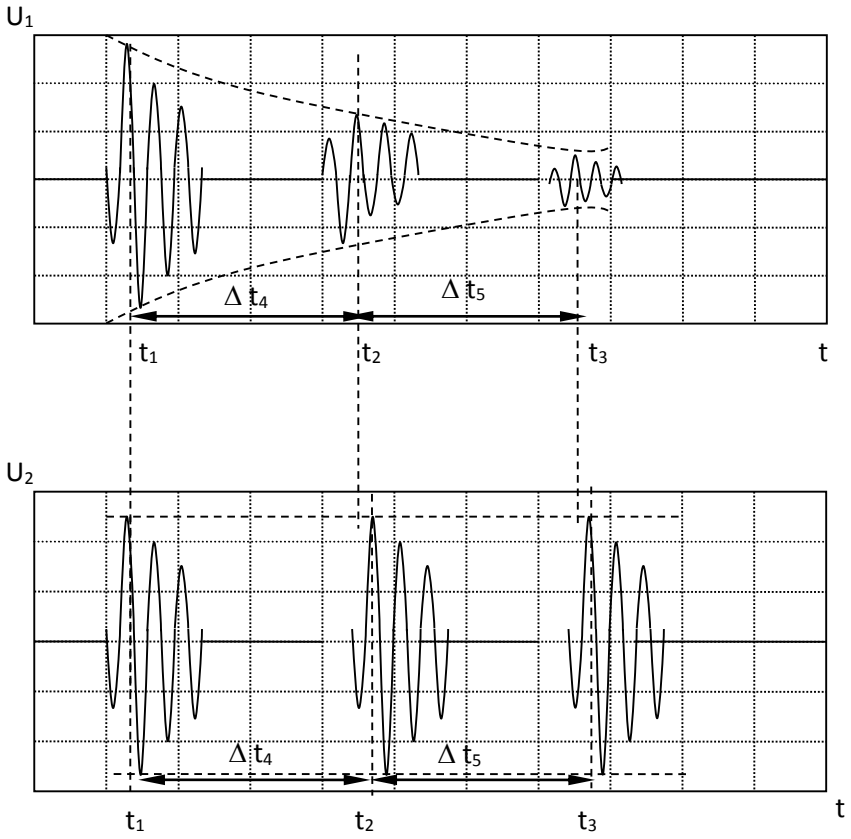


Рис. 4. Ультразвуковые импульсы: реальные затухающие с расстоянием U_1 и обработанные и пронормированные на компьютере по амплитуде U_2

Это приводит к смещению положения максимума каждой полуволны, и временной интервал между полуволнами с максимальными амплитудами будет зависеть не только от пройденного расстояния, но и от затухания волны, вносящего неучитываемый вклад в погрешность измерения.

Зависимость амплитуды ультразвуковых импульсов от пройденного расстояния можно определить из экспериментальных измерений по серии, по крайней мере, трех ультразвуковых цугов волн [10]. После нормировки ультразвуковых импульсов временные интервалы между полуволнами в точках с максимальными амплитудами в каждом цуге выравниваются (рис. 4).

Это свидетельствует о том, что положение максимума полуволны не искажено вследствие затухания волны, и тем самым исключается погрешность измерения.

3. Выводы

Таким образом, выполнение индуктора в виде прямых проводников позволяет расширить диапазон принимаемых волн в сторону более высоких частот. Возможность приема акустических волн на высоких частотах позволяет существенно сократить базу измерений при определении скорости волны, а также осуществлять неразрушающий контроль микрообъектов.

Библиографический список

1. Камышев, А.В. Диагностика остаточных напряжений в ободьях железнодорожных колес методом акустоупругости / А.В. Камышев, Н.Е. Никитина, В.А. Смирнов // Дефектоскопия. – 2010. – № 3. – С. 50–54.

2. Спекл-интерферометрическая установка для определения скорости ультразвуковой волны Релея на участках миллиметрового размера / А.П. Владимиров, Э.С. Горкунов, Л.С. Горулева и др. // Дефектоскопия. – 2011. – № 3. – С. 3–9.

3. Спекл-интерферометрическая установка для бесконтактного измерения скорости ультразвуковой волны Релея / А.П. Владимиров, Э.С. Горкунов, П.С. Еремин и др. // Приборы и техника эксперимента. – 2010. – № 1. – С. 128 –131.

4. Tolipov, Kh. Stagnant Nonuniform Acoustic Waves / Kh. Tolipov // Advanced Material Research. – 2013. – Vol. 684. Pp. 667–670. Trans Tech Publications. Switzerland. doi:10.4028/www.scientific.net/AMR.684.667.

5. Толипов, Х.Б. Акустические стоячие волны в ограниченной однородной среде / Х.Б. Толипов // АЖ. – 2013. – № 4. – С. 1–6.

6. Клюев, В.В. Неразрушающий контроль и диагностика. Справочник / В.В. Клюев. – М: Машиностроение, 2003. – С. 230.

7. Викторов, И.А. Физические основы применения ультразвуковых волн Рэлея и Лэмба в технике / И.А. Викторов. – М.: Наука, 1966. – 166 с.

8. Пат. №115492. РФ, МПК G01N 29/01. Устройство для измерения скорости поверхностной акустической волны / Х.Б. Толипов, Ю.Х. Толипова. Опубл. 27.04.2012, Бюл. № 12.

9. Детлаф, А.А. Курс физики / А.А. Детлаф, Б.М. Яворский. – М.: Высшая школа, 1989. – С. 375.

10. Пат. №.2490606 РФ, МПК G01N 29/0. Способ измерения скорости поверхностной ультразвуковой волны / Х.Б. Толипов, Ю.Х. Толипова. Опубл. 20.08.2013, Бюл. №23.

К содержанию

УДК 537.39 + 537.52

СПОСОБЫ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ТЕПЛОВЫХ ГЕНЕРАТОРОВ, ИСПОЛЬЗУЮЩИХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ РАЗРЯД

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

Рассмотрены основные закономерности процесса электрического разряда в растворе электролита, а также способы повышения эффективности тепловых генераторов использующих электрический разряд, базирующиеся на особенностях этого процесса.

Ключевые слова: электрический разряд, тепловые генераторы, β-распад.

В ЮУрГУ на кафедре ОиЭФ в течение 4-х лет (2009–2012 гг.) проводились работы по проекту № 2.1.1/1043 «Физические основы разработки новых источников энергии» аналитической ведомственной программы «Развитие научного потенциала высшей школы». Полученные результаты свидетельствуют о перспективности данного направления, что подтверждается также данными работ [1, 2] В докладе рассмотрены наиболее целесообразные пути дальнейших исследований с целью повышения эффективности тепловых генераторов.

Исследования по выявлению основных параметров, влияющих на характеристики электрического разряда в растворах электролитов и величину переменного электрического тока, проведены на экспериментальной установке с постоянным напряжением U, подаваемым на реактор, которая подробно описана в [3]. Трехфазное электрическое напряжение величиной 380 В из электрической цепи подается на регулируемый теристорный выпрямитель, позволяющий получать на его выходе постоянное напряжение в диапазоне 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. Для исследований был сконструирован и изготовлен реактор, имеющий форму цилиндра (внутренний диаметр – 30 мм; длина – 100 мм). В основания цилиндра ввинчены проточные трубчатые электроды внутренним диаметром

8 мм. Обращенные друг к другу концы электродов проточены до диаметра 12 мм. В хвостовой части электродов имеются контактные шпильки для крепления проводов электропитания и штуцеры для присоединения шлангов подачи раствора электролита, который насосом-дозато-ром подается из расходной емкости. Скорость подачи раствора регулировалась запорным вентилем и определялась с помощью расходомера для жидкости.

В опытах использовали электроды, изготовленные из меди марки М1к (ГОСТ 859-2001), либо из графита марки ISEM-1. В качестве электролита использовали растворы хлорид натрия (квалификация «хч») и гидроксида натрия (квалификация «хч») в дистиллированной воде. Напряжение U варьировали от 270 до 530 В, емкость конденсатора – от 50 до 400 мкФ, концентрацию растворов от 0,05 до 0,25 моль/л, скорость подачи раствора – от 0,1 до 0,9 л/мин. При разряде наблюдалась эрозия поверхностного слоя электродов, что приводило к увеличению зазора между электродами. По окончании каждого эксперимента реактор разбирали, взвешивали электроды и определяли изменение их массы Δm. При электрическом разряде наблюдалось образование в растворе осадка, а также увеличение температуры электролита.

Эксперименты показали, что в зависимости от параметров процесса (величины напряжения, емкости конденсатора, концентрации электролита и др.) в реакторе реализуются различные режимы процесса: от кратковременных ярких вспышек до образования оранжево-розового плазмона. Установлены следующие основные процессы, протекающие при электрическом разряде в реакторе:

а) возникновение во вторичной цепи установки переменного электрического тока частотой до нескольких МГц, величина которого может достигать до 300 А. Наблюдается корреляция между величиной тока и частотой возникающего переменного электрического поля;

б) нагрев электролита, причем величина выделяющейся при электрическом разряде тепловой энергии в некоторых экспериментах оказалась в 1,5–2,2 раза больше затраченной электрической энергии. Отмечено, что в этих экспериментах в реакторе возникал электрический разряд в виде плазмоида;

в) образование химических элементов, которые отсутствовали в таких количествах в исходных материалах (хлорид натрия, электроды, дистиллированная вода).

Вышеуказанные процессы, протекающие при электрическом разряде в реакторе, достаточно сложны, протекают одновременно и накладываются друг на друга. Они обеспечивают образование и подпитку плазмоида. Плазма имеет не высокую температуру, например, корпус реактора нагревается до 90–100 °С. Существенно большая часть получаемой энергии за-

фиксирована в виде электрического тока высокой частоты, носителями которого являются электроны. Более тяжелые частицы, например, ионы не участвуют в создании высокочастотного тока.

Параллельно протекает процесс превращения жидкости в плазму. Помогает этому процессу переменные электрические и магнитные поля, а также активные электроны, возникающие при β-распаде [4]. Свидетельством тому является большое количество углерода в осадках, формирующихся при электрическом разряде в реакторе. Углерод – новый электрический элемент, который может образоваться только в результате β-распада.

Движущиеся с большой скоростью электроны, образующие токи высокие частоты способствуют инициированию процессов в реакторе в целом.

Таким образом, описанные процессы, подтвержденные экспериментом, протекают параллельно и зависят друг от друга, образуя сложную цепочку. Поэтому для повышения эффективности теплового генератора можно воздействовать на любой из элементов процесса.

Однако процессом, связывающим все рассматриваемые элементы является создание стабильного потока электронов. Для этого можно изменять концентрацию химических элементов, а также агрегатное состояние вещества, подаваемого в реактор. Другим способом является подбор амплитуды и частоты напряжения в первичной цепи.

Библиографический список

1. Пат. Р.Ф. № 2096846. Способ получения элементов и устройство для его осуществления / А.В. Вачаев, Н.И. Иванов, Г.А. Павлова. – 1997.

2. Исследование вихревых и кавитационных потоков в гидравлических системах / Е.П. Запорожец, Л.П. Холпанов, К.Г. Зиберт, А.В. Артемов // ТОХТ. – 2004. – Т. 38, № 3. – С. 243–253.

3. О возможности получения энергии при электрических разрядах / Г.Ф. Кузнецов, Д.Г. Клещев, В.В. Крымский и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Энергетика». – 2010. – Вып. 13. – № 14. – С. 73–77.

4. Ишханов, Б.С. Частицы и атомные ядра / Б.С. Ишханов, И.М. Капитонов, Н.П. Юдин. – М.: Изд-во МГУ, 2013. – 536 с.

К содержанию

УДК 537.39 + 537.52

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО РАЗРЯДА В ПОТОКЕ ЭЛЕКТРОЛИТА

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

Изучены процессы, протекающие при электрическом разряде (U = const) в потоке водного раствора хлорида натрия. Показано, что электрический разряд инициирует как низкоэнергетические ядерные реакции, приводящие к трансформации ядер; так и появление во вторичной электрической цепи переменного электрического тока частотой до нескольких МГц, который по величине в 10–20 раз больше тока в первичной цепи, подаваемого на установку. Установлено, что в ряде опытов тепловая энергия, выделяющаяся при электрическом разряде, по величине в 1,3–2,2 раза больше электрической энергии, потребляемой установкой.

Ключевые слова: электрический разряд, водный раствор NaCl, трансформация ядер, тепловая и электрическая энергия.

Введение

В последние 20 лет обнаружен новый вид низкоэнергетических ядерных реакций (НЭЯР), которые реализуются при относительно низких температурах проведения эксперимента. Так, в 1989 году М. Флешман и С. Пенс установили, что при электролизе «тяжелой» воды с использованием катода из палладия выделяется энергия, которая в несколько раз по величине превышает подводимую к установке энергию, причем этот процесс сопровождается излучением нейтронов [1]. Ю. Ивамура впервые обнаружил превращения элементов Cs и Sr на поверхности палладия при пропускании газообразного D_2 [2]. В работе [3] подтверждаются данные о выделения избыточного тепла и образовании ^{4}He при поглощении газообразного D_2 наноразмерными порошками из палладия. Эмиссия α-частиц зарегистрирована в работе [4]. В [5] сообщается о протекании высокоэнергетических НЭЯР, приводящих к разрушению лабораторных установок. С. Шпак с соавторами подтверждают явления выделения избыточной тепловой энергии [6], образование ядерных частиц и превращения элементов [7].

Экспериментально доказано [8–11], что НЭЯР могут протекать при некоторых режимах электрического разряда в воде и водных растворах как органических, так и неорганических соединений, вызванного подачей на электроды постоянного или переменного напряжения. Это проявляется в формировании новых химические элементов, которые отсутствовали как в исходном растворе, так и в материалах электродов и деталях установки. Образование новых элементов зарегистрировано также и при электоразрыве тонких металлических проволок в жидкостях [12], что указывает на общие закономерности протекающих НЭЯР.

Явление синтеза новых элементов представляет как научный, так и практический интерес как с точки зрения изучения природы протекающих процессов, так и изучения возможности их использования в принципиально новых источниках энергии. Целью данной работы является изучение особенностей электрического разряда в водном растворе NaCl.

Методика проведения экспериментов т методы исследования

Экспериментальная установка подробно описана в [13]. Она состоит из источника постоянного напряжения, конденсатора *C*, включенного параллельно с реакторм проточного типа Р, балластного сопротивления $R_Б$, расходной и приемной емкостей, комплекта измерительных приборов. Напряжение *U* подается на конденсатор *C* и электроды реактора.

В первой группе экспериментов, направленных на подтверждение эффекта реализации НЭЯР при электрическом разряде в растворах, использовали электроды, изготовленные из катодной меди марки М1к (ГОСТ 859–2001), а в качестве электролита – раствор хлорида натрия (квалификация «хч») в дистиллированной воде (температура – 20–25 °С). Начальный зазор между электродами во всех опытах составлял 1,0±0,1 мм; средняя скорость подачи электролита в реактор – 0,5 дм^3/мин. Напряжение *U* варьировали от 270 до 530 В, емкость конденсатора *C* – от 50 до 330 мкФ, концентрацию NaCl в электролите – от 0,10 до 0,25 моль/дм^3.

По окончании каждого эксперимента, сопровождавшегося образованием суспензии, тракт подачи раствора тщательно промывали дистиллированной водой, установку разбирали и исследовали физический износ всех ее частей. Установлено, что корпус реактора и соединительные шланги установки значительных изменений не претерпевают. При разряде наблюдалась эрозия поверхностного слоя (торца) электродов, что приводило к небольшому (менее 0,5 мм) увеличению зазора между ними. В некоторых опытах определяли изменение массы Δm электродов.

Во второй группе экспериментов исследовали зависимость количества теплоты Q_T, выделяющейся при электрическом разряде, от режимов работы установки. В этих опытах использовали электроды, изготовленные из меди марки М1к, и раствор хлорида натрия с концентрациями 0,088 и 0,175 моль/дм^3. Во всех опытах поддерживали постоянными напряжение *U* (530 В) и емкость конденсатора *C* (330 мкФ), а варьировали: зазор между электродами (от 1 до 12 мм) и среднюю скорость $\overline{w}$ подачи электролита в реактор (от 0,1 до 0,5 дм^3/мин).

Токи I_1 (подаваемый на установку) и I_2 (через конденсатор) измеряли амперметрами А1 и А2;соответственно, общее потребление электроэнергии экспериментальной установки $W_Э$ – счетчиком электрическим энергии; разность потенциалов на термопаре – милливольтметром. Все приборы соответствовали необходимому классу точности.

Полученные порошки исследовали на элементный (метод рентгенофлюоресцентного анализа – растровый электронный микроскоп JEOL JSM-7500F (Япония) с системой микроанализа OXFORD INCA EWC453 (Великобритания); использовались стандарты на элементы C, O, Na, Al, Si, P, Cl, Ca, Cr, Ni, и Cu) и фазовый (рентгеновский аппарат ДРОН-3М с приставкой для цифровой регистрации количества импульсов; фильтрованное $Co_{K\alpha}$-излучение; использовали электронную базу данных порошковой дифрактометрии PDF2 ICDD) составы, а также методами термогравиметрии и масспектроскопии (прибор синхронного термического анализа Netzsch 449C «Jupiter», совмещенный с квадрупольным масс-спектро-метром Netzsch QMS 403C «Aeolos»).

Результаты исследования

Химический и фазовый составы осадков. Установлено, что при подаче на электроды реактора напряжения $U \geq 300$ В в реакторе возникают электрические разряды, частота которых возрастает с ростом анодного напряжения U, величины емкости конденсатора C и концентрации NaCl в растворе. При электрических разрядах наблюдалось появление в растворах осадка и повышение температуры суспензии. Условия получения наиболее характерных осадков представлены в табл. 1.

Таблица 1

Условия проведения экспериментов для исследования элементного и фазового составов образующегося осадка

№ образца	1	2	3
Материал реактора	оргстекло		фторпласт
Концентрация NaCl, моль/дм^3	0,25	0,10	0,17
Объем раствора, дм^3	1	1	2,5
Напряжение U, В	350	350	530
Скорость подачи раствора, дм^3/мин	0,5	0,5	0,4
Емкость конденсатора C, мкФ	200	200	330
Расстояние между электродами, мм	1	1	1
Изменение массы электродов Δm, г	–	–	–2,08
Масса осадка m, г	–	–	2,03
Изменение pH фильтрата, ед.	–	–	2,1
Постоянный ток I_1, А	10	7	–
Переменный ток I_2, А	80–140	30–70	–

Осадки опытов 1 и 3 были исследованы на элементный состав. На рентгеновских спектрах отчетливо видны полосы испускания элементов C, O, Al, Si, P, Cl, Ca, Cr, Ni и Cu. Их атомная доля в образце приведена в табл. 2[1].

[1] Использованная нами методика рентгенофлюоресцентного анализа позволила определить элементы, содержащиеся в осадке, с атомным номером $Z \geq 6$ (углерод). Термогравиметрические и масспектроскопические исследования показали существенные

Здесь же приведены данные по элементному составу осадков опыта 3, а также соли, выпаренной из водного раствора NaCl после прохождения через реактор в отсутствии электрического разряда, и материала электродов, использованных в опытах.

Таблица 2

Элементный состав осадков,
материалов электродов и электролита (в % атомных)

Вещество	Элемент											
	C	O	Na	Al	Si	P	Cl	Ca	Cr	Ni	Cu	Mn
Электрод	–	–	–	–	–	–	–	–	–	–	99,5	0,5
Соль NaCl	–	–	44,3	–	–	–	55,7	–	–	–	–	–
Образец 1	21,8	43,3	–	0,17	0,45	0,08	3,9	0,44	0,06	0,18	29,6	–
Образец 3	8,76	40,33	–	0,05	–	–	13,74	–	0,05	–	37,09	–

Рентгенограммы осадков, полученных в опытах 1 и 2 во многом схожи. В частности, на них присутствует одинаковая совокупность широких рефлексов ($\Delta 2\Theta > 0{,}5$ град.), которые из сопоставления с базой данных PDF2 ICDD (card № 2-1067) следует отнести к оксиду меди состава Cu_2O. Вместе с тем, следует отметить, что фазы Cu_2O, присутствующие в этих осадках, различаются по среднему размеру кристаллов d: в осадке опыта 1 величина d составляет 10 нм, а в осадке опыта 2–25 нм. Кроме того, в отличие от осадка опыта 1 на рентгенограммах осадка опыта 2 присутствует два дополнительных рефлекса слабой интенсивности с межплоскостными расстояниями 0,275 и 0,227 нм, которые предположительно можно отнести к гидроксидхлориду меди(II) состава $Cu_2(OH)_3Cl$ (card 2-146).

Рентгенограмма осадка, полученного в опыте 3, существенно отличается от предыдущих. На ней наблюдаются узкие рефлексы ($\Delta 2\Theta \approx 0{,}2$ град., что соответствует аппаратурному уширению рефлексов; средний размер кристаллов более 100 нм), которые следует отнести к $Cu_2(OH)_3Cl$.

Электрические измерения. Как в первой, так и во второй группе экспериментов при электрических разрядах в реакторе амперметром А2 зарегистрирован переменный электрический ток I_2 через конденсатор C частотой до нескольких МГц. Величина I_2 в разных опытах составляла от 30 до 200 А, что по величине в 10–20 раз больше тока I_1.

(до 15 % масс.) изменения массы образцов №№ 1 и 2 в интервале 100–400 °С, обусловленные процессом дегидратации. Следовательно, кроме вышеуказанных в табл. 2 элементов, образец 1 содержит в своем составе водород, входящий в состав кристаллизационной воды и ОН-групп.

Выделение тепловой энергии. Во второй группе экспериментов оценивалось соотношение между потребляемой установкой электрической энергией $W_Э$ (определялась по изменению показаний счетчика электрической энергии) и тепловой энергией Q_T, выделяющейся при электрическом разряде в реакторе. Исследования кинетики изменения температуры суспензии, выходящей из реактора, показали, что сразу же после начала разряда в реакторе температура суспензии начинает возрастать от t_0 (температура исходного электролита) , монотонно приближаясь к величине t_1 (постоянная температура, достигаемая в данном опыте). Время достижения t_1 незначительно изменялось от опыта к опыту и не превышало $\tau = 40$ с. Расчет величины Q_T проводили по известной формуле термодинамики:

$$Q_T = c_{уд} \cdot (t_1 - t_0) \cdot m = c_{уд} \cdot \Delta t \cdot \rho_{Эл} \cdot V_{Эл},$$

где $c_{уд}$ – удельная теплоемкость электролита, которая принималась равной удельной теплоемкости воды; Δt – изменение температуры электролита; m – масса прошедшей через реактор суспензии.

Во второй группе проведено 137 экспериментов. В таблице 3 приведены результаты некоторых опытов: параметры экспериментов, значения Q_T, $W_Э$ и $\eta = Q_T/W_Э$.

Таблица 3

Параметры проведения экспериментов
и энергетические показатели работы установки

d, мм	C_{NaCl}, моль/дм^3	$\overline{W}$, дм^3/мин	Δt, ^{o}C	$W_Э$, кДж	Q_T, кДж	$Q_T/W_Э$
2	0,175	0,35	30	72	66,9	0,93
2	0,088	0,122	35	72	27,8	0,39
2	0,088	0,153	30	36	27,6	0,77
2	0,088	0,150	25	18	23,1	1,28
7	0,175	0,385	30	36	66,3	1,84
7	0,175	0,45	25	36	52,8	0,47
7	0,175	0,455	30	90	64,0	0,71
12	0,175	0,446	25	36	61,7	2,2
12	0,175	0,446	25	72	54,6	0,76

Обсуждение результатов

1. Полученные нами экспериментальные данные подтверждают результаты работ [8–11] о формировании новых элементов при электрическом разряде в водных растворах. Вместе с тем необходимо отметить следующие установленные нами экспериментальные факты:

а) существенную зависимость элементного и фазового составов образующегося осадка, полученного при приблизительно одинаковых параметрах процесса, от состояния поверхностности электродов. На НЭЯР могут оказывать существенное влияние протекающие на электродах процессы. Этим

может объясняться плохая воспроизводимость опытов, если не контролируется состояние поверхности электродов, даже изготовленных из одного материала, а также зависимость состава формирующегося осадка от состава раствора, расстояния между электродами и величины подаваемого напряжения, наличия в электролите нанодисперсных частиц и др.;

б) различный брутто и фазовый составы осадков полученных при использовании Cu-электродов: так по данным рентгенофлюоресцентного анализа для осадка, полученного в опыте 1, соотношение Cu : O = 0,68, что ближе к составу Cu_2O (фаза именно такого состава регистрируется по данным рентгенофазового анализа). У осадка, полученного в опыте 3, это соотношение равно 0,92 и, кроме того, обнаруживается в осадке значительная часть ионов Cl^- (13,74 ат. %), что подтверждается данными рентгенофазового анализа о формировании гидроксидхлорида меди(II).

2. Перспективным на наш взгляд является экспериментально установленный факт, что в достаточно большом количестве опытов (~ 20 % от общего числа экспериментов второй группы) количество выделившейся при электрическом разряде в реакторе теплоты Q_T по величине превышает (в 1,3–2,2 раза) потребленную электрическую энергию $W_Э$ (табл. 3). Величина коэффициента полезного действия установки η по производству тепловой энергии больше единицы не противоречит закону сохранения энергии и, скорее всего, обусловлена протеканием НЭЯР. Выделяющаяся при НЭЯР энергия, по-видимому, частично трансформируется в тепловую, что и обуславливает наблюдаемый положительный энергетический эффект. Вместе с тем, необходимо отметить большой разброс в энергетических характеристиках процессов, протекающих в параллельных опытах, которые проводили последовательно один за другим в один и тот же день приблизительно в одинаковых условиях[5] (см., например, данные для η опытов 47–49 и 68–70). Этот факт согласуется с данными предыдущих исследований НЭЯР [9, 10] и, скорее всего, обусловлен природой этого явления. Для того, чтобы уменьшить разброс в энергетических характеристиках процесса в настоящее время проводятся дополнительные экспериментальные исследования, где определяется тенденции влияния основных параметров на результирующий процесс.

3. Технологический процесс на основе электрического разряда в плазме можно использовать для различных целей, одной из которых является создание на его основе нового источника энергии, разработки которого ведутся со времен Николы Теслы вплоть до настоящего времени. В настоящее время практическое применение нашел катализатор Росси. Теоретической моделью процесса, протекающего в катализаторе с некоторыми замечаниями,

[5] Вариация величины скорости подачи электролита через реактор, скорее всего, связана с влиянием процессов, протекающих в реакторе, на гидродинамические характеристики движения потока.

изложенными в [14], может служить модель Видома–Ларсена [15], которая предполагает, что на 1-ом этапе процесса в электромагнитном поле образуются «тяжелые» электроны, которые играют роль катализатора, как при мюоном катализе [16].

Далее следует захват «тяжелых» электронов протонами с образованием медленного нейтрона и электронного нейтрино, которые взаимодействуют с ядрами других атомов. Каждый нейтрон инициирует цепочу ядерных превращений. Незахваченные нейтроны распадаются (периодом полураспада 613,9 с) на протон, электрон и антинейтрино с выделением 0,784 МэВ энергии. Нестабильное ядро распадается аналогичным образом и приводит к существенному выделению энергии. Ядерные превращения протекают при низкой температуре, при этом не требуется преодоление кулоновского барьера, как при термоядерном синтезе.

На пути применения рассматриваемых процессов в качестве технологического основания для новых источников энергии лежит сложность протекающих процессов в плазме электрического разряда, а также их малая изученность. Эти два препятствия дополняют друг друга, хотя технологии будущего с большой вероятностью будут их использовать.

Заключение

Показано, что при электрическом разряде в водном растворе NaCl протекают ядерные реакции трансформации элементов, а во вторичной электрической цепи индуцируется переменный электрический ток, который по величине на порядок превышает значения постоянного тока, потребляемого в первичной электрической цепи. Установлено, что в ряде экспериментов количество выделившейся при электрическом разряде в реакторе теплоты по величине значительно (в 1,3–2,2 раза) превышает потребленную электрическую энергию.

Библиографический список

1. Fleischmann M. Electrochemically induced nuclear fusion of deuterium / M. Fleischmann, S. Pons // Journal of Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry. 1989. Vol. 261, Is. 2, Part 1. Pp. 301–308.

2. Iwamura Y. Elemental Analysis of Pd Complexes: Effects of D_2 Gas Permeation / Y. Iwamura, M. Sakano, T. Itoh // Japanese ournal of Applied Physics. 2002. Vol. 41. Pp. 4642–4650.

3. Anomalous effects in charging of Pd powders with high density hydrogen isotopes / A. Kitamura, T. Nohmi, Y. Sasaki *et al.* // Physics Letters A. 2009. Vol. 373, Is. 35. Pp. 3109–3112.

4. Triple tracks in CR-39 as the result of Pd–D Co-deposition: evidence of energetic neutrons / P.A. Mosier-Boss, S. Szpak, F.E. Gordon, L.P.G. Forsley // Naturwissenschaften. 2009. Vol. 96, Is. 1. Pp. 135–142.

5. Biberian J.-P. Unexplained Explosion During an Electrolysis Experiment in an Open Cell Mass Flow Calorimeter / J.-P. Biberian // J. Condensed Matter Nucl. Sci. 2009. Vol. 2. Pp. 1–6.

6. Thermal behavior of polarized Pd/D electrodes prepared by co-deposition / S. Szpak, P.A. Mosier-Boss, M.H. Miles, M. Fleischmann // Thermochimica Acta. 2004. Vol. 410, Is. 1–2. Pp. 101–107.

7. Evidence of nuclear reactions in the Pd lattice / S. Szpak, P.A. Mosier-Boss, C. Young, F.E. Gordon // Naturwissenschaften. 2005. Vol. 92, Is. 8. Pp. 394–397.

8. Основные положения дейтонной горно-метал-лургической технологии / И.И. Иванов, А.В. Вачаев, Г.А. Павлова, Л.А. Скворцов // Изв. вузов. Сер. чёрн. металлург. – 1998. – № 4. – С. 54–59.

9. Паньков В.А. Демонстрационная методика синтеза из воды в плазме электрического разряда / В.А. Паньков, Б.П. Кузьмин //Актуальные проблемы современной науки. – 2008. – № 5 (44). – С. 112–116.

10. Трансформация ядер в условиях электроразряда / Н.Г. Ивойлов, М.М. Бикчинтаев, О.А. Стребков и др. // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. – 2009. – Т. 151, кн. 3. – С. 52–62.

11. Крымский, В.В. Воздействие наносекундных электромагнитных импульсов на свойства веществ / В.В. Крымский, В.Ф. Балакирев // ДАН. – 2002. – Т. 385, № 6. – С. 786–787.

12. Уруцкоев, Л.И. Экспериментальное обнаружение странного излучения и трансмутация химических элементов / Л.И. Уруцкоев, В.И. Ликсонов, В.Г. Циноев // Прикл. физика. – 2000. – № 4. – С. 83–100.

13. О возможности получения энергии при электрических разрядах / Г.Ф. Кузнецов, Д.Г. Клещев, В.В. Крымский и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Энергетика». – 2010. – Вып. 13. – № 14. – С. 73–77.

14. Tennfors E. On the idea of low energy nuclear reactions in metallic lattices by production neutrons from protons capturing “heavy” electrons / E. Tennfors // Eur. Phys. J. Plus. 2013. 128: 15 DOI 10.1140/epjp/i2013-13015-3.

15. Widom A., Larsen L. Ultra low moment neutron catalyzed nuclear reactions on metallic hydride surfaces // Eur. Phys. J. Plus. 2006 DOI 10.1140/epjc/s2006-02479-8.

16. Физический энциклопедический словарь. – М.: Советская энцикл, 1983. – С. 441.

К содержанию

УДК 538.915 + 669.112.227.322

DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ФОРМИРОВАНИЯ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ ФЕРРИТ-ЦЕМЕНТИТ

А.В. Верховых, А.А. Мирзоев

С помощью программного пакета WIEN2k была смоделирована межфазная граница феррит-цементит с ориентационным соотношением Багаряцкого. Наилучшее сопряжение решеток обеспечивается, когда на границе находится плоскость (101)ц, состоящая из атомов железа в S-позициях. Были определены оптимальные параметры моделирования данной системы, а также энергия формирования межфазной границы феррит-цементит 594 эрг/см^2, что хорошо согласуется как с теоретическими, так и с экспериментальными данными.

Ключевые слова: перлит, феррит, цементит, межфазная граница, энергия формирования.

Одной из важнейших и наиболее сложных структурных составляющих железоуглеродистых сплавов является перлит. Термин «перлит» связан с перламутровым (жемчужным) блеском, который наблюдается на свежепротравленном шлифе. В общем случае различают пластинчатый и глобулярный перлит. Пластинчатый перлит представляет собой конгломерат чередующихся пластин феррита и цементита.

Среди множества причин, объясняющих пристальное внимание специалистов к структуре перлита можно выделить следующие: большое количество изделий изготовлено из сталей со структурой перлита (канаты, высокопрочная проволока, пружины, рельсы, заготовки для волочения, арматура и др.) и ферритоперлитных сталей, перлит в которых в значительной степени определяет важнейшие механические свойства, а следовательно, надежность и долговечность конструкций; пластинчатое строение перлита позволяет с помощью электронной микроскопии надежно фиксировать процессы, происходящие во время пластической деформации и разрушения сталей; перлит представляет собой уникальную сложную структуру, которая может быть воспроизведена во многих модификациях [1, 2].

Таким образом, интерес теоретиков к перлитному превращению обусловлен устойчивыми морфологическими характеристиками перлита, которые хорошо воспроизводятся и поддаются измерениям. Это позволяет сопоставлять результаты расчета с экспериментальными данными. Несмотря на то, что структура перлита исследуется десятки лет, на многие частные вопросы, связанные с этой проблемой, пока не могут быть даны однозначные ответы. В связи со всем вышесказанным, целью данной работы являлось моделирование межфазной границы феррит-цементит в программном пакете WIEN2k.

Цементит Fe3C имеет орторомбическую решётку, принадлежащую к пространственной группе Pnma. Элементарная ячейка с параметрами a = 4,524; b = 5,088; c = 6,741 Å [3] содержит 12 атомов железа и 4 атома углерода. Атомы железа в решётке цементита занимают две кристаллографически неэквивалентные позиции – G (general):

$$\begin{aligned} &\pm [[\ x,\ y,\ z\ ]];\\ &\pm [[\ 1/2–x,\ 1/2+y,\ z\ ]];\\ &\pm [[\ x,\ y,\ 1/2–z\ ]];\\ &\pm [[\ 1/2–x,\ 1/2+y,\ 1/2–z\ ]], \end{aligned} \qquad (1)$$

и S (special):

$$\begin{aligned} &\pm [[\ u,\ v,\ 1/4\ ]];\\ &\pm [[\ 1/2–u,\ 1/2+v,\ 1/4\ ]], \end{aligned} \qquad (2)$$

где параметры равны x = 0,333; y = 0,175; z = 0,065; u = –0,167; v = 0,040 [4]. Атомы углерода при расположении в центрах «нормальных» призм имеют координаты:

$$\begin{aligned} &\pm [[\ r,\ s,\ 1/4\ ]];\\ &\pm [[\ 1/2–r,\ 1/2+s,\ 1/4\ ]], \end{aligned} \qquad (3)$$

где r = 0,43; s = –0,13 [4].

Ориентационная связь между ферритом и цементитом в перлите выражается двумя типами ориентационных соотношений (ОС): Багаряцкого и Питча. Для перлита, образующегося при небольших переохлаждениях ниже критической точки, доля колоний с каждым из ОС примерно одинакова, но с понижением температуры превращения вероятность реализации ОС Багаряцкого повышается [5]. ОС Багаряцкого предполагает параллельность следующих направлений:

$$(100)\text{ц} \parallel (0\bar{1}1)\alpha; \quad (010)\text{ц} \parallel (1\bar{1}\bar{1})\alpha; \quad (001)\text{ц} \parallel (211)\alpha, \qquad (4)$$

а габитусная плоскость пластин соответствует (101)ц || (112)α [5, 6].

Плоскости (101) в железной подрешётке цементита образуют двенадцатислойную укладку со средним межплоскостным расстоянием $\sqrt{a^2+c^2}/12 =$ =0,677 Å (рис. 1), причём можно выделить плоскости двух типов, содержащие атомы железа в G- и S-позициях, расположение атомов в которых несколько различается. Наиболее вероятно, что плоскости (101)ц, образующие когерентную межфазную границу, будут содержать S-атомы: во-первых, поскольку укладка атомов в таких плоскостях гораздо ближе к плоскости (112)α [7], а во-вторых, поскольку при этом не нарушается целостность образующих решётку цементита трёхгранных призм, внутри которых находятся атомы углерода.

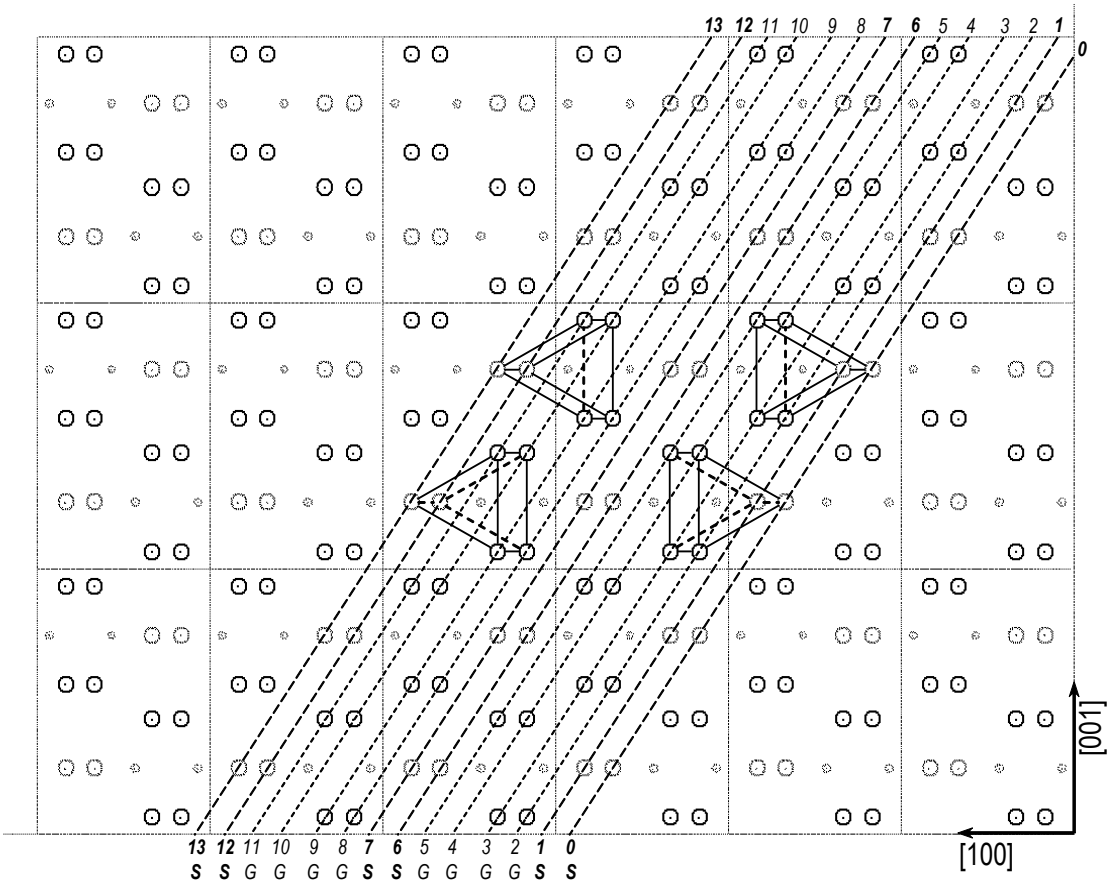


Рис. 1. Проекция решётки цементита вдоль направления [010]. Показаны плоскости (101). S-атомы изображены светлее; кружочки меньшего размера – атомы углерода в центрах «нормальных» трёхгранных призм. Цифры – номера последовательных плоскостей

Расчет электронной структуры проведен методом линейных присоединенных плоских волн (LAPW) с учетом обобщенного градиентного приближения (GGA). В методе LAPW волновые функции, зарядовая плотность и потенциал разлагаются по сферическим гармоникам в неперекрывающихся атомных сферах радиуса Rmt и по плоским волнам в остальной области элементарной ячейки. Предполагается, что внутри muffin-tin сферы зарядовая плотность сферически-симметрична. Волновые функции в междоузлии раскладываются по плоским волнам с вектором обрезания Kmax. Эта величина является одним из основных параметров, влияющих на точность, так как она определяет число базисных функций (размер матриц). Данный параметр определяется из задаваемого произведения RmtKmax при фиксированном Rmt. Еще одним немаловажным параметром является количество k-точек, Nk – величина, характеризующая дискретную сетку, используемую для численного интегрирования по зоне Бриллюэна. Чем больше это значение, тем больше точек учитывается при интегрировании, тем выше точность. Однако это значение нельзя бесконечно увеличивать, нужно остановиться, когда значения энергии стабилизируются.

В первую очередь была выполнена оптимизация количества k-точек, так как этот параметр не зависит от других. Были взяты значения: a=5,088 Å; b=8,118 Å; c=16,842 Å; α=94,221°; β=γ=90°; $R_{mt}^{Fe}=2,0$ a.e. $R_{mt}^{C}=1,4$ a.e.; $E_{cut}=7,0$ Рб, $R_{mt}K_{\max}=7,0$. Увеличение Nk выше 64 не приводит к значительному изменению величины полной энергии (в пределах 1 мРб), следовательно, оптимальным значением количества k-точек является Nk =64.

При данных параметрах проведена серия расчетов, позволяющая определить постоянные решетки равновесной структуры межфазной границы феррит-цементит. Для этого сначала варьировался объем суперячейки при постоянных значениях параметра решетки c и отношении a/b. Для случая с минимальной энергией была проведена релаксация, из которой было получено, что объем системы равен 679,924 Å^3 (–2 % от исходного объема). После определения оптимального объема суперячейки, необходимо было найти значения параметров решетки. Была проведена оптимизация параметра c при постоянных значениях объема системы (V) и отношении a/b. Требованию минимального значения энергии системы отвечает параметр решетки c=17,173 Å (+2 % от исходного значения). Именно эта структура была отрелаксирована и были получены следующие параметры: a=4,987 Å; b=7,957 Å; c=17,173 Å; α=93,945°; β=γ=90°. Затем необходимо было определить оптимальный параметр muffin-tin сферы для углерода (для чистого железа уже был найден этот параметр, $R_{mt}^{Fe}=2,0$ a.e. [8]). Для этого с ранее оптимизированными параметрами была получена зависимость полной энергии системы от Rmt. Увеличение Rmt выше 1,45 не приводит к значительному изменению величины полной энергии, следовательно, оптимальным значением является $R_{mt}^{C}=1,45$ (рис. 2).

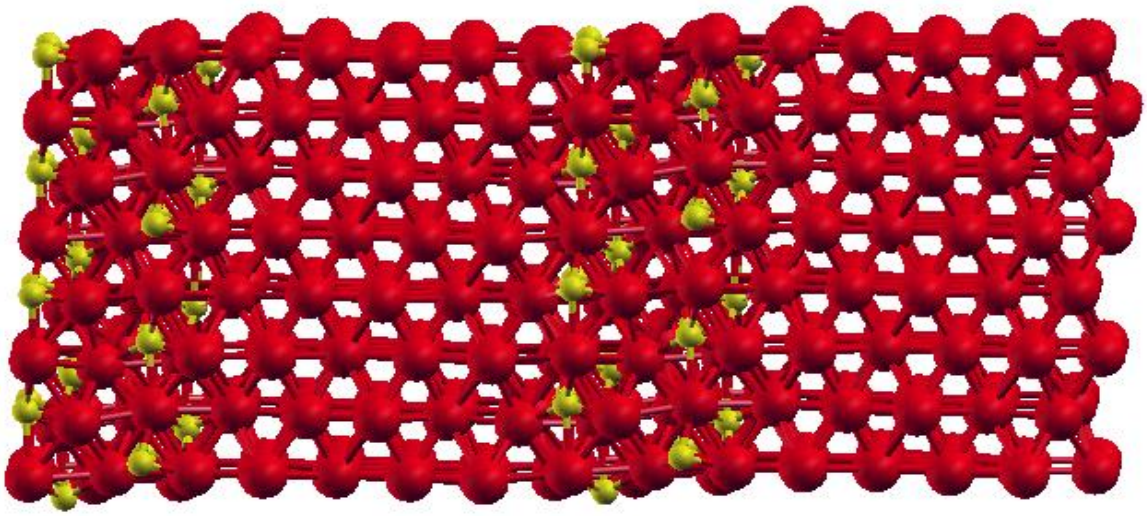


Рис. 2. Оптимальная конфигурация межфазной границы феррит-цементит (желтый – углерод, красный – железо)

Таким образом, оптимальным параметрам соответствуют следующие значения [9]:

– количество k-точек Nk =64;

– параметр, контролирующий сходимость $R_{mt}K_{\max}=7{,}25$;

– радиусы атомных сфер $R_{mt}^{Fe}=2{,}0$ а.е., $R_{mt}^{C}=1{,}45$ а.е.

При данном выборе параметров обеспечивается максимальная точность определения энергетических характеристик 0,01 эВ.

Одной из наиболее важных характеристик перлита является его энергия формирования, поскольку именно эту величину можно измерить экспериментально, а также она содержит основную информацию о процессах взаимодействия на границах раздела двух сред.

Энергия формирования межфазной границы феррит-цементит определялась соотношением:

$$E_f^{Fe/Fe_3C}=\frac{E_{inb}^{Fe/Fe_3C}-E_{bulk}^{Fe}-E_{bulk}^{Fe_3C}}{2S},$$

где E_{inb}^{Fe/Fe_3C} – полная энергия системы содержащей межфазную границу цементит/феррит; E_{bulk}^{Fe} – полная энергия объёмного кристалла феррита; $E_{bulk}^{Fe_3C}$ – полная энергия объёмного кристалла цементита; S – площадь границы.

Результаты расчётов в сравнении с данными других работ приведены в таблице.

Таблица

Сравнение результатов

	E_f^{Fe/Fe_3C}, эрг/см2
[10]	560
[11]	248–417
[12]	700±300
[13]	500±360
[14]	520±130
[15]	615
Данная работа	594 ±4

Видно, что наши результаты хорошо согласуется как с экспериментальными данными, так и с теоретическим расчетом [15].

Таким образом, была исследована система пластинчатого перлита с ориентационным соотношением Багаряцкого. Найдены оптимальные параметры моделирования, а также определена энергия формирования межфазной границы.

Работа частично поддержана грантом РФФИ 14-03-00618_а.

Библиографический список

1. Sorby, H.C. On the application of vePб high powers to the study of microscopic structure of steel / H.C. Sorby // J. Iron Steel Inst. 1886. V. 1. Pp. 140–147.

2. Graef, M.D. A modern 3-D view of an old pearlite colony / M.D. Graef, M.V. Kral, M. Hillert // Journal of Metals. 2006. V. 58. Pp. 25–28.

3. Эндрюс, К. Электронограммы и их интерпретация / К. Эндрюс, Д. Дайсон, С. Киоун. – М.: Мир, 1971. – 256 с.

4. Andrews, K.W. The structure of cementite and its relation to ferrite / K.W. Andrews // Acta Metallurgica. 1963. V. 11. Pp. 939–946.

5. Счастливцев, В.М. Структура термически обработанной стали / В.М. Счастливцев, Д.А. Мирзаев, И.Л. Яковлева. – М.: Металлургия, 1994. – 288 с.

6 Тушинский, Л.И. Структура перлита и конструктивная прочность стали / Л.И. Тушинский, А.А. Батаев, Л.Б. Тихомирова. – Новосибирск: ВО «Наука», 1993. – 280 с.

7. Окишев, К.Ю. Возможности захвата атомов водорода в сталях межфазными границами феррит / цементит. 1. Кристаллогеометрический анализ / К.Ю. Окишев, Д.А. Мирзаев, А.В. Верховых // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Металлургия». – 2013. – Т. 13, № 2. – С. 95–102.

8. 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. – Вып. 2, № 9 (185). – С. 97–101.

9. Verkhovykh, A.V. Elaboration of atomic model for ab initio calculation of the ferrite / cementite interface / A.V. Verkhovykh, K.Yu. Okishev, A.A. Mirzoev, D.A. Mirzaev // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 2. – С. 49–55.

10. Das, S.K. Volume fraction dependent particle coarsening in plain carbon steel / S.K. Das, A. Biswas, R.N. Ghosh. // Acta Metallurgica et Materialia. 1993. V. 41(3). Pp. 777–781.

11. Deb, P. Coarsening behaviour of cementite particles in a ferrite matrix in 10B30 steel / P. Deb, M. C. Chaturvedi // Metallography. 1982. V. 15. Pp. 341–354.

12. Kramer, J.J. The free energy of formation and the interfacial enthalpy in pearlite / J.J. Kramer, G.M. Pound, R.F. Mehl // Acta Metallurgica. 1958. V. 6. Pp. 763–771.

13. Kirchner, H.O.K. A calorimetric determination of the interfacial enthalpy of Cu-In and Cu-Al lamellar eutectoids / H.O.K. Kirchner, B.G. Mellor, G.A. Chadwick // Acta Metallurgica. 1978. V. 26. Pp. 1023–1031.

14. Martin, A.G. Measurement of interfacial energy from extraction replicas of particles on grain boundaries / A.G. Martin, C.M. Sellars // Metallography. 1970. V. 3. Pp. 259–273.

15. Ruda, M. Atomistic simulations in the Fe-C system / M. Ruda, D. Farkas, G. Garcia // Computational Materials Science. 2009. V. 45. Pp. 550–560.

К содержанию

УДК 538.9 + 544.277.6

СТРУКТУРА АТОМНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ

А.Г. Воронцов

Методами компьютерного моделирования проведено исследование формирования гетерофазных флуктуаций (атомных комплексов) при конденсации паров металла. По результатам анализа усредненных структурных характеристик установлена область размеров атомных комплексов, которые могут быть отнесены к конденсированной фазе.

Ключевые слова: конденсация; гетерофазные флуктуации.

Конденсация пара при гомогенной нуклеации качественно описывается в рамках классической термодинамической теории Гиббса. Однако один из практически важных случаев, реализующийся при конденсации металлических паров, – конденсация с очень высокими степенями пересыщения плохо описывается в рамках данной теории. Это происходит из-за того, что критический зародыш – ядро конденсированной фазы имеет размеры до сотни атомов и не может быть описан, как «фаза» в термодинамическом понимании этого слова. Такую группу атомов, движущихся вместе время много большее среднего времени столкновений, будем называть атомным комплексом. Анализ литературы [1, 2] показал, что основное внимание уделяется описанию структуры и свойств стабильных групп атомов – кластеров, находящихся в твердом состоянии, при этом вопросам статистического описания возбужденных атомных комплексов практически не занимаются из-за чрезвычайной трудоемкости их рассмотрения. В последнее время появилась возможность использовать многопроцессорные суперкомпьютеры для моделирования процесса конденсации и получении большого объема статистических данных. Удается проанализировать до 106–107 состояний атомных комплексов [3] и анализировать до 107 отдельных столкновений атомных комплексов с мономерами пара и друг с другом. В этой работе обсуждаются представления о процессе формирования атомного комплекса, который можно отнести к новой (конденсированной) фазе, в отличие от малых гетерофазных флуктуаций.

Метод моделирования

Моделирование проводилось методом молекулярной динамики, реализованном в пакете многопроцессорных вычислений LAMMPS. Система состояла из атомов металла (Cu), для которых изучалась конденсация, и атомов буферного газа (Ar), через которые осуществлялся теплоотвод [3]. Изучалась как динамика столкновений (вероятность присоединения дополнительного атома металла к атомному комплексу) так и структура атомных

комплексов разных размеров (20-3000 атомов) и разной степени возбуждения (температура газовой среды Ar - 1150 ... 1540 К). Под структурой понимается статистическая информация о взаимном расположении атомов в атомном комплексе. Взаимное расположение атомов в комплексе изучалась методом, основанным на разбиении Делоне [4]. Изучение более 105 конфигураций позволило установить послойную структуру атомных комплексов для сферических слоев, находящихся на разном расстоянии от его центра. Были получены данные для комплексов разных размеров, имеющих разные значения внутренней энергии.

Формирование комплексов и их структура

По результатам анализа структуры атомных комплексов разных размеров и состояний можно предложить следующий механизм их роста. На первоначальной стадии формируются димеры, тримеры, тетрамеры и т.д., атомы которых совершают сложное движение вокруг центра масс. При увеличении количества атомов до 10–15 время, проводимое атомами вблизи центра масс, увеличивается. В результате вблизи центра масс атомы начинают формировать тетраэдрические координации с межатомными расстояниями характерными для конденсированной фазы. Занимаемая ими область составляет 2–3 средних межатомных расстояния около центра масс. Указанные тетраэдрические координации характерны для икосаэдрического типа упорядочения и в отсутствии теплового движения являются энергетически выгодными для малых кластеров [5]. Увеличение числа частиц в комплексе до сотен приводит к возникновению в середине комплекса структуры, соответствующей объемной фазе материала, которая является комбинацией тетраэдрического и октаэдрического локального упорядочения. При этом вблизи поверхности сохраняется слой с тетраэдрической координацией частиц. Данный комплекс уже можно рассматривать как двухфазную систему, т.к. дальнейшее увеличение количества атомов приводит к росту центральной части комплекса (объемной фазы) при неизменных размерах и структуре граничного слоя. Это хорошо согласуется с результатами работы Томсона и др. [6], в которой показано, что зависимость свойств капель жидкости от размера можно описывать аналитически (с учетом поправок на кривизну поверхности) начиная с 50–100 атомов. В нашем случае 50–100 атомов это размер комплекса для которого центральная часть имеет радиус 2–3 межатомных расстояния.

Структура центральной части сформированного атомного комплекса соответствует объемной структуре вещества, но меняется в зависимости его размера и энергетического состояния (перегрева). Структура комплекса из 3200 атомов практически эквивалентна структуре объемной жидкости при тех же условиях [7], т.е. по структурным критериям такой комплекс уже является фрагментом жидкой фазы.

Заключение

Компьютерное моделирование методом молекулярной динамики и методика анализа локальной атомной структуры, основанная на разбиении Делоне, позволила изучить этапы формирования структуры конденсированной фазы вещества. Формирование структуры при увеличении размера комплекса проходит через следующие этапы: появление в «облаке» атомов плотного центра с тетраэдрической локальной структурой; расширение области тетраэдрической структуры и формирование из нее оболочки внутри которой растет область со структурой объемной жидкости. Центральная часть комплекса наблюдается у частиц с размером более 4-5 Å, а ее структура мало отличается от структуры объемной жидкости для комплексов более 10 Å.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 15-03-04182.

Библиографический список

1. 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.

2. Altavilla, C. Inorganic Nanoparticles: Synthesis, Applications, and Perspectives / C. Altavilla, E. Ciliberto. – London: CRC Press, 2010. – 546 p.

3. 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. – В. 5. – С. 897.

4. Воронцов, А.Г. Статистико-геометрический метод анализа структуры однокомпонентных систем / А.Г. Воронцов, Д.А. Куц // Расплавы. – 2008. – № 3. – С. 83–92.

5. Doye, J.P.K. Entropic effects on the structure of Lennard-Jones clusters / J.P.K. Doye, F. Calvo // The Journal of chemical physics. 2002. V. 116. Pp. 8307.

6. Thompson, S.M. A molecular dynamics study of liquid drops/ S.M. Thompson, K.E. Gubbins, J. Walton, R.A.R. Chantry, J.S. Rowlinson // The Journal of Chemical Physics. 1984. V. 81. P. 530.

7. 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

538.935 + 620.22-419.8-022.53

МЕТОД РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Н.С. Дюрягина, А.П. Яловец

Разработан метод описания электрофизических свойств нанокомпозиционных материалов в рамках модели Роуза-Фаулера. Получены спектры люминесценции в зависимости от концентрации и размера наночастиц Ge в GeO_2. Объясняется, смещение спектра в коротковолновую область с уменьшением размеров наночастиц и уменьшение интенсивности с увеличением концентрации наночастиц. Численно исследована температурная зависимость нанокомпозита в зависимости от размера наночастиц и объясняется падением проводимости с увеличением размеров наночастиц Ge и уменьшением температуры. Все результаты качественно согласуются с экспериментами.

Ключевые слова: электрофизические свойства, нанокомпозит, Роуз-Фаулер, энергетический спектр, локализованные состояния, интенсивность, спектр люминесценции, рекомбинация.

В настоящее время нанокомпозитные материалы широко используются в различных областях науки и техники, и исследование свойств таких материалов является актуальной и важной задачей современной физики твердого тела, поскольку на их основе можно создать новые функциональные материалы с уникальными свойствами. Это обусловлено тем, что свойства таких сред могут значительно отличаться от свойств, как объемных материалов, так и отдельных наночастиц, формирующих нанокомпозит.

На сегодняшний момент существует большое число экспериментальных работ, посвященных исследованию электрофизических свойств нанокомпозитных материалов [1–8], в то время как теоретические исследования недостаточно развиты [2, 9–15]. Известно, что электрофизических свойства нанокомпозитных материалов зависят от размеров и концентрации включений, что обусловлено изменением спектра разрешенных состояний в запрещенной зоне. Разработанные на сегодняшний день модели описания оптических свойств не учитывают в полное мере этих изменений [2, 9–15], и как следствие, не все явления, протекающие в запрещенной зоне, а именно рекомбинацию носителей зарядов.

Модель Роуза-Фаулера еще не применялась для описания оптических свойств нанокомпозитных материалов, однако она наиболее полно описывает динамику свободных и захваченных на ловушки носителей зарядов в запрещенной зоне [16–17] и позволяет определить концентрацию свободных и захваченных на ловушки носителей зарядов. Зная концентрации

свободных и захваченных на ловушки носителей зарядов, можно рассчитать спектр люминесценции, поглощения и проводимость нанокомпозиционного материала.

В нанокомпозитных материалах включение наночастиц приводит к появлению энергетических уровней в запрещенной зоне аналогично тому, как наличие примесей в диэлектриках приводят к примесной проводимости. Таким образом, зная энергетические спектры разрешенных состояний, обусловленные включениями наночастиц, модель Роуза-Фаулера вполне можно применить к описанию оптических свойств нанокомпозитных материалов.

Уравнения кинетики носителей заряда, основанные на модели Роуза-Фаулера, учитывают инжекцию заряда, их взаимную рекомбинацию, захват и освобождение носителей заряда из ловушек, дрейф носителей заряда в созданном ими электрическом поле.

В одномерном случае система уравнений модели Роуза-Фаулера имеет вид [16–17]:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial N}{\partial t} = S - \dfrac{\partial J_N}{\partial z} - \alpha \sum\limits_{l=1}^{L} N \cdot p_l - \sum\limits_{m=1}^{M} \dfrac{N}{T_m}\left(1 - \dfrac{n_m}{N_m}\right) + \sum\limits_{m=1}^{M} \dfrac{n_m}{\tau_m}; \\ \dfrac{\partial P}{\partial t} = S - \dfrac{\partial J_P}{\partial z} - \alpha \sum\limits_{m=1}^{M} P \cdot n_m - \sum\limits_{l=1}^{L} \dfrac{P}{T_l}\left(1 - \dfrac{p_l}{P_l}\right) + \sum\limits_{l=1}^{L} \dfrac{p_l}{\tau_l}; \\ \dfrac{\partial n_m}{\partial t} = -\alpha P \cdot n_m + \dfrac{N}{T_m}\left(1 - \dfrac{n_m}{N_m}\right) - \dfrac{n_m}{\tau_m}, \ m = 1,2,3,...; \\ \dfrac{\partial p_l}{\partial t} = -\alpha N \cdot p_l + \dfrac{P}{T_l}\left(1 - \dfrac{p_l}{P_l}\right) - \dfrac{p_l}{\tau_l}, \ l = 1,2,3,...; \\ \rho = -e\left[\left(N - P\right) + \left(\sum\limits_{m=1}^{M} n_m - \sum\limits_{l=1}^{L} p_l\right)\right]; \\ \dfrac{\partial E}{\partial z} = \dfrac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь m и l – индексы отрицательных и положительных ловушек соответственно, $N(z,t)$ и $P(z,t)$ – плотности свободных отрицательных и положительных ловушек, n_m и p_l – концентрации захваченных носителей зарядов на ловушках, $N_m(z,t)$ и $P_l(z,t)$ – концентрация отрицательных и положительных ловушек *m*-того и *l*-того сорта соответственно, где $m = 1,2,...,M$ и $l = 1,2,...,L$, τ_m и τ_l – время жизни отрицательного и положительного заряда в ловушках *m*-сорта и *l*-сорта соответственно, T_m и T_l – время захвата отрицательного и положительного зарядов на ловушку, $\alpha = (\mu_+ - \mu_-)e/\varepsilon\varepsilon_0$ – коэффициент рекомбинации, где μ_+ и μ_- подвижности дырок и электронов,

ε – диэлектрическая проницаемость, а ε_0 – электрическая постоянная, S – скорости генерации электронов и дырок за счет термализации, $J_N = -\mu_- NE$ и $J_P = \mu_+ PE$ – токи, обусловленные движением электронов и дырок, $E = -\partial\varphi/\partial z$ – напряженность электрического поля, φ – потенциал, ρ – массовая плотность.

В данной работе рассматривается однородный слой, подверженный воздействию электромагнитного излучения. В этом случае электронейтральность не нарушается, и влиянием электрического поля на кинетику зарядов, можно пренебречь в отличие от [17], т.е. пренебречь слагаемыми $\partial J_N/\partial z$ и $\partial J_P/\partial z$. Времена жизни на ловушках определяются из энергетического спектра:

$$\tau_{l,m} = \nu^{-1} e^{-E_{l,m}/kT},$$

где E_m и E_l – энергетические спектры для электронов и дырок соответственно, $\nu\left(c^{-1}\right)$ – частотный фактор, k – постоянная Больцмана, T – температура.

Энергетические спектры свободных носителей заряда в зоне проводимости и валентной зоне квазинепрерывны и распределены по закону Ферми-Дирака. Для определения энергетического спектра локализованных состояний, обусловленных включениями наночастиц, решалось уравнение Шредингера для сферической потенциальной ямы конечной глубины в сферических координатах (r, ϑ, φ):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r \psi(r) + U(r)\psi(r) = E\psi(r),$$

где $\hbar$ – постоянная Планка, m – масса электрона, ∇_r – радиальная часть оператора Лапласа, $U(r)$ – потенциал, определяющийся глубиной потенциальной ямы, $\psi(r)$ – волновая функция и E – энергетический спектр локализованных состояний.

При включении наночастиц Ge в диэлектрическую матрицу GeO_2 образуется потенциальная яма для электронов глубиной $U_0 = 1{,}5$ эВ [7]. Ширина потенциальной ямы a оценивается из условия, что количество энергетических состояний в запрещенной зоне N_{E_m} будет не меньше, чем электронов $N_e = C \cdot V_k / e$, которые должны перейти из наночастицы Ge в матрицу GeO_2, с учетом того, что на одном энергетическом состоянии может находиться два электрона: $N_{E_m} \geq N_e/2$. Здесь $C \cdot V_k$ – заряд, который дол-

жен передаться от наночастицы матрице, чтобы образовалась потенциальная ямы глубиной V_k, $C = 4\pi\varepsilon\varepsilon_0 d/2$ – емкость наночастицы диаметром d, $\varepsilon = 16$ – диэлектрическая проницаемость Ge.

Чтобы определить спектр люминесценции нанокомпозиционного материала, решалось уравнение переноса излучения через вещество в направлении $\vec{\Omega}$. При отсутствии внешнего фотовозбуждения и пренебрегая в силу малых концентраций включений рассеянием в случае изотропной испускательной способности кинетическое уравнение будет иметь вид:

$$I\left(\vec{r},\vec{\Omega},\omega\right) = \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty Q\left(\vec{r}-\xi\vec{\Omega},\omega\right)e^{-\tau\left(\vec{r},\vec{r}-\xi\vec{\Omega},\omega\right)}d\xi. \qquad (2)$$

Здесь $I\left(\vec{r},\vec{\Omega},\omega\right)$ – спектральная интенсивность излучения, $Q\left(\vec{r},\omega\right)$ – мощность излучения в единице объема вещества около точки $\vec{r}$ с частотой ω, $\tau\left(\vec{r},\vec{r}-\xi\vec{\Omega},\omega\right) = \int_0^\infty \Sigma_a\left(\vec{r}-\xi'\vec{\Omega},\omega\right)d\xi'$ – оптическая длина пути, пройденного излучением частоты ω от точки $\vec{r}$ до $\vec{r}'$, $\Sigma_a\left(\vec{r}-\xi\vec{\Omega},\omega\right)$ – коэффициент поглощения излучения соответствующей частоты ω в точке $\vec{r}'$, ξ – геометрически путь, пройденный излучением. Испускательная способность $Q\left(\vec{r},\omega\right)$ учитывает испускание квантов при рекомбинационных процессах, захвате носителей зарядов на ловушки и освобождении с них.

На рис. 1 а–г представлена зависимость спектра люминесценции в высокоэнергетической области от размера включений Ge в GeO_2 от 1 до 10 нм 4 ат%. Видно, что с уменьшением размеров частиц, происходит смещение спектра люминесценции в коротковолновую область, что согласуется с экспериментом [1, 6–7].

Смещение спектра люминесценции в коротковолновую область связано с тем, что при включении наночастиц малого размера в запрещенной зоне образуется меньше разрешенных состояний на большом расстоянии друг от друга. Таким образом, увеличивается количество рекомбинационных переходов носителей заряда, сопровождающихся испусканием фотона большей энергии.

В тоже время наблюдается падение интенсивности с уменьшением размеров наночастиц, что объясняется уменьшением разрешенных состояний, и как следствие, уменьшением количества переходов носителей зарядов, сопровождающихся испусканием света.

На рис. 2 показана зависимость спектра люминесценции нанокомпозита в зависимости от концентрации наночастиц Ge в GeO_2 до 4 ат%. С ростом концентрации наночастиц увеличивается концентрация локализованных состояний, следовательно, уменьшается концентрация свободных носителей заряда, в результате испускательная способность нанокомпозита падает.

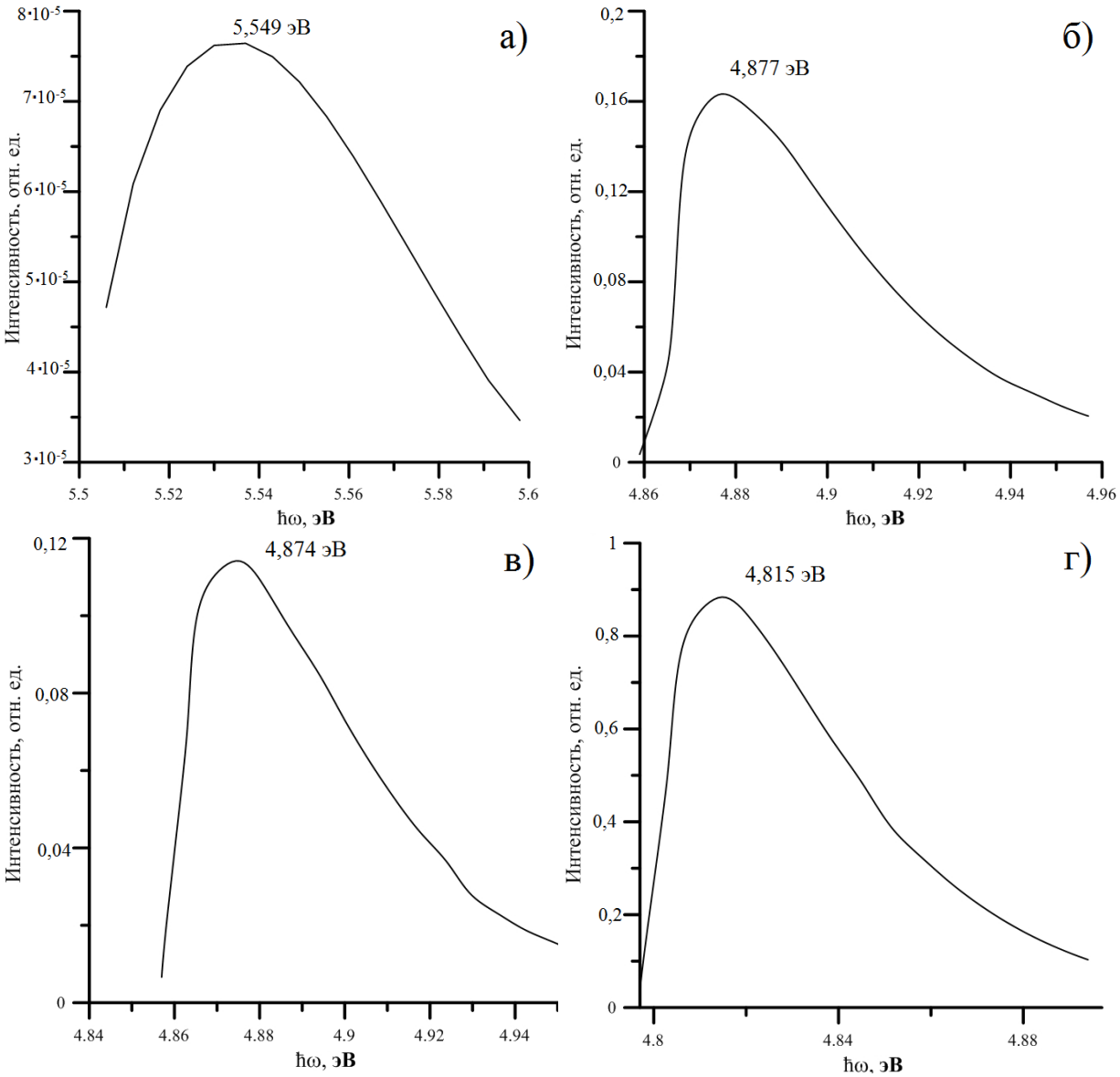


Рис. 1. Зависимость спектра люминесценции
от размеров включений Ge в GeO_2: а) 1,2 нм, б) 4 нм, в) 8 нм, г) 10 нм.
Численные значения – положение максимума

На рис. 3 видно, что выполняется закон $\ln\sigma = 1/T$ и что с увеличением размера наночастиц, скорость падения проводимости с уменьшением температуры. Это связано с увеличением уровней в запрещенной зоне, на которые захватываются носители заряда. В результате уменьшается концентрация свободных носителей заряда N и P, которые дают вклад в проводимость формула (3). Данный результат качественно согласуется с экспериментом [3].

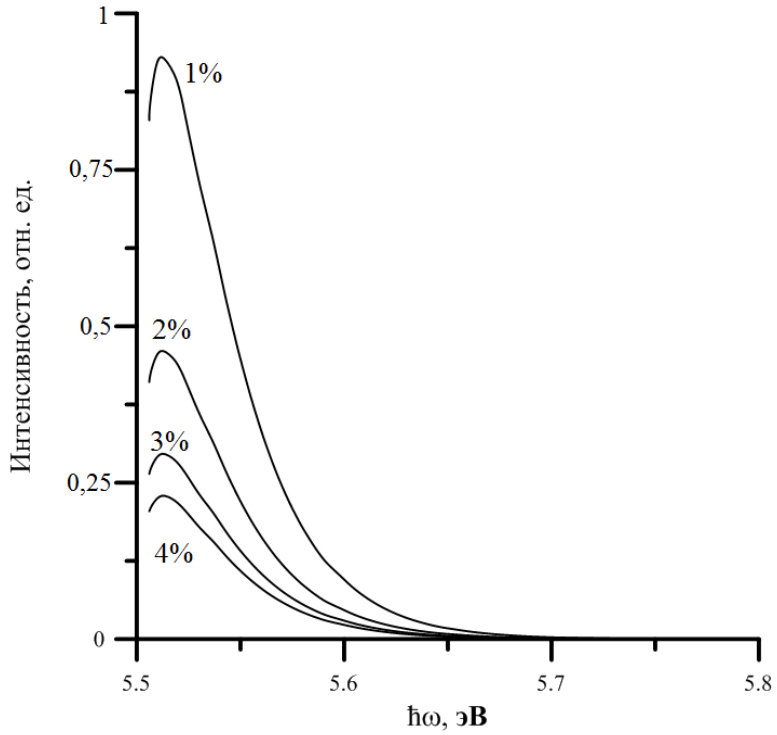


Рис. 2. Зависимость спектра люминесценции нанокомпозита Ge в GeO_2 от концентрации включений. Размер включений – 1,2 нм.

$\alpha = 10^{-2}$ м^3/с, $\beta = 10^{-17}$ м^3/с, $\nu = 10^{12}$ с$^{-1}$

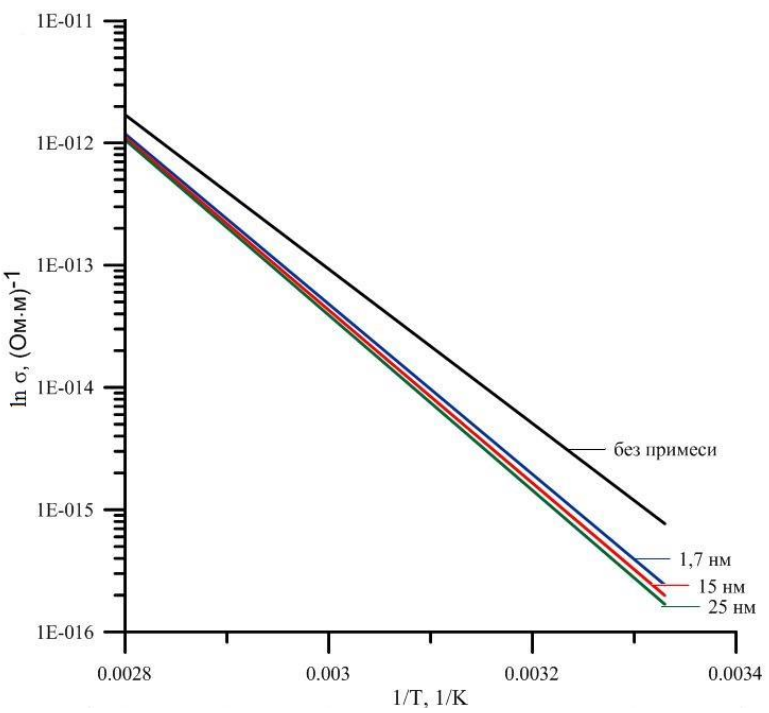


Рис. 3. Проводимость нанокомпозита Ge в CdS $\ln\sigma = 1/T$ в интервале температур $300 \div 570$ К и концентрации включений $n_л = 10^{18}$ м$^{-3}$ (1,7 нм – 10^{-6} %; 15 нм – 10^{-4} %; 25 нм – 10^{-3} %)

Таким образом, с помощью модели, основанной на уравнениях Роуза-Фаулера, были получены следующие результаты:

1. Смещение спектра люминесценции в коротковолновую область с уменьшением размеров наночастиц Ge в GeO_2, что согласуется с экспериментом [1, 6–7]. Это объясняется изменением энергетического спектра: число энергетических уровней с увеличением размера наночастиц растет, а расстояние между ними соответственно уменьшается. Поэтому при рекомбинации свободных носителей заряда с захваченными на ловушки при больших размерах наночастиц испускается больше квантов меньшей энергии, чем при малых размерах.

2. Уменьшение интенсивности излучения с увеличением концентрации наночастиц Ge в GeO_2, что также согласуется с экспериментом [1, 4, 7] и объясняется увеличением локализованных состояний и уменьшением свободных носителей зарядов, которые дают вклад в рекомбинационное излучение.

3. Проводимость нанокомпозита Ge в CdS. Показано, что выполняется закон $\ln\sigma = 1/T$ и что скорость падения проводимости с уменьшением температуры с увеличением размера наночастиц увеличивается, что также согласуется с экспериментом [3].

Библиографический список

1. Beecroft, L.L. Nanocomposite Materials for Optical Applications / L.L. Beecroft, C.K. Ober // J. Chem. Mater. – 1997. – N. 6. – P. 1302–1317.

2. Головань, Л. А. Оптические свойства нанокомпозитов / Л. А. Головань, В. Ю. Тимошенко, П. К. Кашкаров // «Успехи физических наук». – 2007. – Т. 177, № 6. – С. 619–638.

3. Мисуркин, И.С. Электропроводность нанокомпозитов поли-n-ксилилен + CdS / И.С. Мисуркин, С.В. Титов, Т. С. Журавлева, И.В. Клименко и др. // Журнал физической химии. – 2009. – Т. 83, № 3. – С. 534–540.

4. Kasim, F.A. Preparation and optical properties of CdS/Epoxy nanocomposites / F.A. Kasim, M.A. Mahdi, J.J. Hassan, S.K. Al-Ani, S.J. Kasim // Int. J. Nanoelectronics and Materials. 2012. V. 5. Pp. 57–66.

5. Christobel, G.J. Luminescence properties of ZnS-ZnO nanocomposites synthesized by solvothermal method / G.J. Christobel, C.K. Mahadevan // International Conference on “Advanced Nanomaterials and Emerging Engineering Technologies” (ICANMEET-2013). 2013. V. 1. Pp. 309–312.

6. Maeda, Y. Visible photoluminescence from nanocrystallite Ge embedded in a glassy SiO2 matrix: Evidence in support of quantum-confinement mechanism / Y. Maeda // Phys. Rev. B. 1995. V. 51, N. 3. Pp. 1658–1670.

7. Gorokhov, E.B. Effect of Quantum Confinement on Optical Properties of Ge Nanocrystals in GeO2 Films/ E.B. Gorokhov, V.A. Volodin, D.V. Marin, D.A. Orekhov et // Semiconductors. 2005. V. 39. Pp. 1168–1175.

8. Askari, A. Optical properties of a metalo-dielectric nanocomposite: small gold spherical nanoparticles in a cylindrical di-block copolymer / A. Askari, L. Rahimi, A. Bahrampour, G. Pepe // The European Physical Journal B, Springer-Verlag. 2013. V. 86. Pp. 1–8.

9. Benchaabane, A. Performances of effective medium model in interpreting optical properties of polyvinylcarbazole: ZnSe nanocomposites / A. Benchaabane, Z.B. Hamed, F. Kouki, M.A. Sanhoury, K. Zellama, A. Zeinert, H. Bouchriha // Journal of Applied Physics. 2014. V. 115. Pp. 1–9.

10. Покнутий, С.И. Поглощение и рассеяние света на одночастичных состояниях носителей заряда в полупроводниковых квантовых точках / С.И. Покнутий // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40, № 2. – С. 223–229.

11. Шпак, А.П. Межзонное поглощение света полупроводниковыми нанокристаллами / А.П. Шпак, С.И. Покунтий, В.А. Смынтына, В.Н. Уваров // Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies. 2008. V.6, N. 1. Pp. 83–95.

12. Головань, Л.А. Учет динамической деполяризации в модели эффективной среды для описания оптических свойств анизотропных наноструктурированных полупроводников / Л.А. Головань, С.В. Заботнов, В.Ю. Тимошенко, П.К. Кашкаров // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43, № 2. – С. 230–234.

13. Кульчин, Ю.Н. Спектр пропускания света диэлектрическими наночастицами в объемных гетерокомпозитах / Ю.Н. Кульчин, В.П. Дзюба, А.В. Щербаков // Физика и техника полупроводников. – 2009. – Т. 43, № 3. – С. 349–356.

14. Дзюба, В.П. Модель нелинейного пропускания света диэлектрическими нанокомпозитами / В.П. Дзюба, А.Е. Краснюк, Ю.Н. Кульчин, И.В. Дзюба // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45, № 3. – С. 306–311.

15. Володин, В.А. Улучшенная модель локализации оптических фононов в нанокристаллах кремния / В.А. Володин, В.А. Сачков // Журнал экспериментальной и технической физики. – 2013. – Т. 143, № 1. – С. 100–108.

16. Роуз, А. Основы теории фотопроводимости / А. Роуз. – М.: Мир, 1966. – 192 с.

17. Эбель, А.А. Численное исследование радиационного заряжения диэлектриков в рамках модели Роуза-Фаулера / А.А. Эбель, А.Е. Майер, А.П. Яловец // Известия ВУЗов, Физика. – 2009. – № 8/2. – С. 276–279.

К содержанию

УДК 538.915 + 544.142.4

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДОРОДА С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ В ОЦК-ЖЕЛЕЗЕ

А.А. Мирзоев, Г.П. Вяткин

Примеси замещения оказывают существенное влияние на поведение водорода в железе. Это открывает возможность управления водородной деградацией при помощи направленного легирования сталей. В работе методами теории функционала плотности в рамках компьютерного пакета WIEN-2k рассмотрено влияние примесей 3d- и 4d-металлов на энергию растворения водорода в матрице ОЦК-железа.

Ключевые слова: атомистическое компьютерное моделирование, ОЦК-железо, стали, водород, энергия связи.

Введение

Водород, захватываемый из окружающей среды при выплавке сталей, приводит к существенному снижению прочностных свойств последних (водородная деградация) [1–2]. Его природа [1–3] связана с выделением водорода в виде газовой фазы после кристаллизации массивных деталей в области микроскопических пор, возникающих вблизи протяженных дефектов структуры решетки железа, таких как дислокации и границы зерен. В качестве одного из возможных методов борьбы с указанным явлением может использоваться захват водорода в ловушки, образованные точечными дефектами (вакансиями и атомами легирующих примесей), в областях, где отсутствуют критические дефекты микроструктуры.

Даркен и Смит [4] первыми предположили, что в качестве подобных ловушек могут выступать точечные дефекты кристаллической решетки. Впоследствии было показано, что ловушками водорода являются вакансии, примесные атомы, дислокации, границы зерен, поры и многие другие структурные дефекты [5–6]. Наиболее удобным и практичным методом управления захватом водорода является использование примесей замещения. Отметим, что благодаря работе В.И. Архарова [7] стало хорошо известно о сильном воздействии палладия на растворение водорода [8]. Можно попытаться найти более дешевые и эффективные варианты, переходные элементы являются перспективными кандидатами для этой цели. В обзоре [5] приведены данные об опытных значениях величины энергии взаимодействия водорода с примесями в металлах. Однако следует отметить, что все упомянутые экспериментальные методы не позволяют достоверно оценить величину энергии захвата атома водорода, поскольку во всех методах данная величина определяется не прямо, а на основе моделей, точность которых может быть оспорена.

Исследование взаимодействия водород-примесь методами современного компьютерного моделирования может обеспечить дополнительной информацией о многих деталях явления, которые затруднительно получить экспериментально. Поскольку величина энергии взаимодействия водорода с растворенными атомами примесей составляет нескольких десятых электрон-вольта, то методика моделирования должна обеспечивать высокую точность расчета. По этой причине методы первопринципного компьютерного моделирования, основанные на теории функционала плотности наиболее пригодны для указанной цели. К настоящему времени систематическое изучение энергии захвата водорода примесями в железе проведено в единственной работе [9] с помощью программного пакета VASP. Полученные результаты представляют собой исключительный интерес, однако требуют дополнительной проверки и подтверждения.

Перспективным является также изучение взаимодействия водорода с другим видом точечных дефектов – вакансиями. Связано это, прежде всего с тем, что в ряде исследований отмечено существование притяжения между вакансиями и атомами водорода в α-железе [6, 10–12]. Оказалось, что в одной вакансии могут накапливаться до шести атомов водорода [6, 13–15]. Подобное взаимодействие приводит к росту концентрации вакансий, о чем свидетельствует ряд экспериментов [14].

Несколько вычислительных работ было посвящено исследованию поведения водорода в железе, включая энергию его растворения, предпочтительное расположение, диффузионный барьер, энергию связи водорода с моновакансиями, дислокациями и примесными атомами [16–17]. Однако остается несколько открытых вопросов, в частности тех, которые касаются взаимодействия между водородом и вакансиями в разных магнитных состояниях.

В связи с этим в настоящей работе проведены расчеты из первых принципов энергии взаимодействия водорода с 3d и 4d-примесями замещения и вакансиями, более точным полнопотенциальным методом линеаризованных сферических волн LAPW, реализованным в пакете WIEN-2k.

Детали расчета

Моделирование проводилось с помощью программного пакета WIEN2k, реализующего метод линеаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ), который является полноэлектронным методом теории функционала плотности. Использовалось приближение обобщенного градиента плотности с обменно-корреляционным потенциалом GGA-PBE96, широко используемым в последнее время в работах по моделированию железа. Суперячейка во всех расчетах состояла из 54 узлов ОЦК-решетки Fe, а также внедренного атома водорода.

Использовались основные параметры моделирования, определенные в работе [18] и позволяющие с точностью ±0,01 эВ рассчитывать значение энергии растворения водорода в ОЦК-железе.

Структурная релаксация решетки проводилась в два этапа. На первом этапе проводится оптимизация размеров суперячейки. При объемной оптимизации осуществлялось равномерное расширение и сжатие (a=b=c), было рассмотрено по 7 конфигураций для каждого состава с изменением параметра решетки от –1 % до +1 % с шагом 0,33 % от экспериментального параметра решетки ОЦК-железа. На каждом шаге изменения параметров решетки проводился отдельный цикл минимизации конфигурации атомов внутри ячейки координат, т.е. проводился поиск стабильной конфигурации с минимальной полной энергией и близкими к нулю действующими на атомы силами. На каждом шаге минимизации проводился самосогласованный расчет электронной структуры. Критерии сходимость во всех расчетах были установлены в 10-6 эВ для электронных итераций и 10-3 е- по заряду, соответственно, а в случае релаксации кристаллической решетки дополнительно использовался критерий сходимости по силам с точностью не менее 2 мРб/а.е.

Моделирование производилось на высокопроизводительном вычислительном кластере СКИФ Урал, СКИФ Аврора и Торнадо ЮУрГУ в параллельном режиме. Некоторые предварительные результаты исследования были представлены в работе [20].

Результаты расчетов и их обсуждение

Важной характеристикой в оценке захвата и удержания водорода является энергия растворения. Она рассчитывается следующим образом:

$$\Delta E(H) = E(Fe_{n-1}MeH) - E(Fe_{n-1}Me) - \frac{1}{2}E[H_{2(g)}], \quad (1)$$

где ΔE(H) – энергия растворения атома водорода в кристалле ОЦК-железа с примесями Me; $E(Fe_{n-1}MeH)$ и $E(Fe_{n-1}Me)$ – полные энергии Fen-1MeH и Fen-1Me соответственно; n – размер суперячейки, в нашем случае – 54; $E[H_{2(g)}]$ – полная энергия молекулы водорода. Во всех исследованиях энергия $E[H_{2(g)}]$ принималась равной – 2,346 Рб, что соответствует общепринятому экспериментальному значению [27].

Компьютерное моделирование равновесных параметров суперячейки, после введения туда примесей Mg, Al, Si,Sc, Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Y, Zr, Nb, Mo, Pd, Cd проведения структурной релаксации, позволили оценить величину объемного эффекта, вызываемого ими. Подробные данные об изменении параметров решетки ОЦК-железа при введении атома водорода и примесей замещения приведены в табл. 1 .

Видно, что при растворении водорода наиболее сильно деформируется решетка чистого ОЦК-железа. Это связано с тем, что легирование железа примесями замещения, которые имеют больший ионный радиус, само по себе увеличивает параметр решетки сплава. Вероятно, поэтому растворение водорода деформирует решетку сплава в меньшей степени.

Таблица 1

Параметры решетки чистого ОЦК-железа и ОЦК-железа с примесями, полученные в результате моделирования

Сплав	Параметр решетки чистого сплава Fe с примесями замещения, (ангстремы)	Параметр решетки сплава при растворении 1 атома водорода в суперячейке из 54 атомов (c≈2 ат. %), ангстремы	Относительное изменение параметра решетки, %	Энергия растворения атома водорода, эВ	Порядковый номер окружения примеси, в который захватывается водород
Fe54	2,837	2,848	0,191	0,27	-
Fe53Sc	2,848	2,854	0,11	0,06	3
Fe53Ti	2,843	2,849	0,111	0,18	2
Fe53V	2,842	2,848	0,114	0,24	3
Fe53Cr	2,841	2,848	0,131	0,24	3
Fe53Mn	2,839	2,846	0,132	0,27	4
Fe53Co	2,841	2,846	0,080	0,25	3
Fe53Ni	2,843	2,849	0,107	0,24	3
Fe53Cu	2,842	2,847	0,095	0,22	2
Fe53Zn	2,844	2,851	0,128	0,19	2
Fe53Y	2,866	2,868	0,032	0,045	2
Fe53Zr	2,852	2,857	0,087	0,095	2
Fe53Nb	2,849	2,854	0,096	0,19	2
Fe53Mo	2,847	2,853	0,11	0,23	3
Fe53Pd	2,854	2,857	0,11	0,18	2

В этой же таблице приведен основной результат нашего моделирования – энергия растворения водорода в сплаве, рассчитанная в соответствии с формулой (1) для тетраэдрической поры, находящейся в том окружении легирующей примеси, в котором эта энергия минимальна.

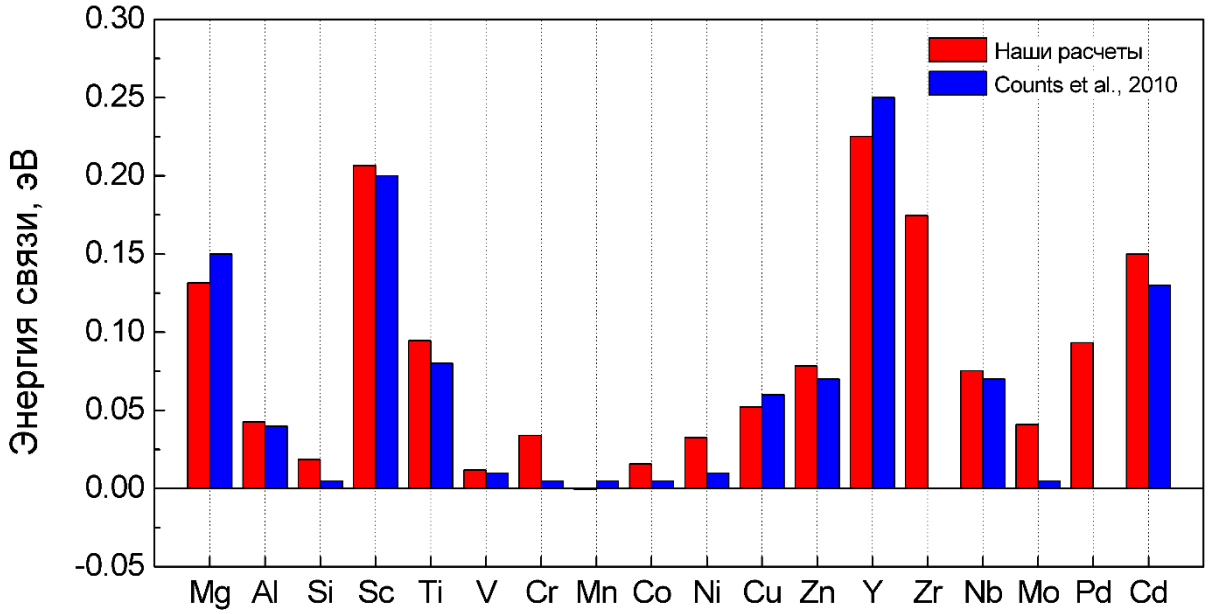
Величина этой энергии составляет 0,267 эВ, что с хорошей точностью соответствует экспериментальному значению, равному 0,296 эВ.

Энергия связи между атомом водорода и точечным дефектом X рассчитывалась по формуле:

$$E_{св}(H\text{-}X) = E(Fe_nH) - E(Fe_{n-1}XH), \qquad (2)$$

где $E_{св}(H\text{-}X)$ – энергия связи атома водорода с дефектом X (примесь или вакансия) в ОЦК-железе; $E(Fe_{n-1}XH)$ и $E(Fe_nH)$ – полные энергии суперячейки состава $Fe_{n-1}XH$ и Fe_nH, соответственно (в нашем случае n = 54).

С использованием выражения (2) нами была рассчитаны энергии связи атома водорода с исследуемыми примесями замещения. Результаты сравнения полученных данных, с результатами первопринципного моделирования, проведенного в работе[9], приведены на рис.



Сравнение результатов моделирования энергии связи атомов водорода
с примесями замещения в ОЦК-железе с данными работы [9]

Из рис. видно, что полученная нами энергия связи достаточно хорошо согласуется с результатами работы [9]. Однако, в отличие от данных [9], нами показано, что хром имеет ненулевую энергию связи, а значит, способен связываться с водородом. Энергия связи водорода с палладием оказалась равной 0,087 эВ, что подтверждает, что атом палладия охотно захватывает водород. Таким образом, обнаружено, что наибольшими возможностями по захвату водорода обладают примеси Y, Zr и Sc, несколько меньшей энергией обладают ловушки, создаваемые атомами Mg, Pd ,Ti.

Таблица 2

Сравнение рассчитанных значений энергии взаимодействия ε1
с результатами [20], полученными термодинамическим анализом
литературных данных по растворимости водорода в бинарных сплавах железа

Примесь Y	$\varepsilon_{вз}$, эВ данные работы [20]	$\varepsilon_{вз}$, эВ наши расчеты
Al	0,071	0,043
Si	0,062	0,019
Ti	0,229	0,10
V	0,183	0,012
Cr	0,042	0,034
Mo	0,059	0,041
Mn	0,102	0,000
Ni	0,081	0,033
Pd	0,204	0,1

В таблице 2 некоторые полученные нами значения энергии связи сравниваются с значениями, полученными на основе термодинамического анализа имеющихся в литературе данных по растворимости водорода в разбавленных сплавах Fe-Me [20]. В целом обнаруживается, что результаты, полученные методом термодинамического анализа растворимости водорода, примерно в 2 раза (за исключением V и Mn) завышают значение энергии взаимодействия, однако правильно передают тенденцию усиления и ослабления взаимодействия для широкого ряда элементов.

На основе формулы (2) нами было проведено также DFT компьютерное моделирование энергии взаимодействия водорода с вакансией в ОЦК железе для ферро- и парамагнитного состояния матрицы железа. Полученное значение энергии формирования вакансии 1,78 эВ в парамагнитном состоянии ОЦК-Fe, хорошо согласуется с существующими экспериментальными данными [21]. Обнаружена существенная зависимость энергии захвата водорода вакансией от магнитного порядка. Детали моделирования и подробные результаты приведены в работе [22].

Выводы

1. С помощью расчетов из первых принципов на основе теории функционала плотности рассмотрено влияние малых примесей замещения Mg, Al, Si,Sc, Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Y, Zr, Nb, Mo, Pd, Cd на энергию растворения водорода в ОЦК решетке железа.

2. Показано, что даже при наличии указанных примесей в ОЦК-железо энергетически наиболее предпочтительной позицией для растворения водорода остается тетраэдрическая пора.

3. Проведенное исследование позволило определить энергии растворения водорода в октаэдрических позициях ОЦК-железа в зависимости от расстояния до примесей.

5. Полученные в наших расчетах результаты по энергии связи с примесями Ti, Mn, V в целом согласуются с данными [9]. Существенное расхождение обнаруживается для примеси хрома, для которой в [9] получено нулевое значение энергии связи, в то время как в нашем расчете – 0,032 эВ, что значительно лучше согласуется с данными эксперимента.

6. Выяснено, что наибольшей энергией захвата атомов водорода обладают атомы Y,Sc,Zr,Cd,Ti Mg. Впервые в литературе получено значение энергии связи водорода с примесью палладия, равное 0,087±0,01 эВ.

7. Рассчитана энергия взаимодействия водорода с вакансией в парамагнитном состоянии ОЦК железа (1,78 эВ), что хорошо согласуется с существующими экспериментальными данными.

Библиографический список

1. Hirth, J.P. Effects of hydrogen on the properties of iron and steel / J.P. Hirth. // Metall. Trans., 1980, V. 11A, 861 p.

2. Troiano, A.R. The role of hydrogen and other interstitials in the mechanical behavior of metals / A.R. Troiano // Trans. ASM, V. 52, Pp. 54 (1960).

3. Vehoff, H. Hydrogen related material problems / H. Vehoff // In book “Hydrogen in Metals III” Topics in Applied Physics Volume 73, 1997. Pp. 215–278.

4. Darken L.S. Behaviour of hydrogen in steel during and after immersion in acid / L.S. Darken and R.P. Smith //Corrosion, 5:1–16, 1949.

5. Myers, S.M. Hydrogen interactions with defects in crystalline solids / S.M. Myers, M.I. Baskes, H.K. Birnbaum, J.W. Corbett, G.G. DeLeo, S.K. Estreicher, E.E. Haller, P. Jena, N.M. Johnson, R. Kirchheim, S.J. Pearton, M.J. Stavola // Rev. Mod. Phys. 1992. V .64. Pp. 559–617.

6. Fukai, Y. The metal-hydrogen system / Y. Fukai. – Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005. Pp. 202–229.

7. Архаров, В.И. О влиянии примеси палладия к железу на его проницаемость для водорода / В.И. Архаров, А.А. Кралина // ФММ. – 1959. – Т. 8. – Вып. 1. – С. 45–52.

8. 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. Окишев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2009. – № 10. – С. 66–73.

9. Counts, W.A. First-principles energetics of hydrogen traps in α-Fe: Point defects / W.A. Counts, C. Wolverton, R. Gibala // Acta Materialia. 2010. V. 58. Pp. 4730–4741.

10. Besenbacher, F. Multiple Hydrogen Occupancy of Vacancies in Fe / F. Besenbacher, S.M. Myers, P. Nordlander, J.K. Nørskov // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 61. No. 5. Pp. 1788–1794.

11. Mirzaev, D.A. Theory of hydrogen solubility in binary iron alloys based on ab initio calculation results / D.A. Mirzaev, A.A. Mirzoev, K.Yu. Okishev, M.S. Rakitin // Molec. Phys. 2012. Vol. 110. No. 11–12. Pp. 1299–1304.

12. Верховых, А.В. DFT моделирование взаимодействия водорода с вакансией в ОЦК-железе / А.В. Верховых, А.А. Мирзоев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2015. – Т. 7. – № 1. – С. 48–56.

13.Fukai, Y. Formation of Superabundant Vacancies in M–H Alloys and Some of Its Consequences: A Review / Y. Fukai // Journal of Alloys and Compounds. 2003. Vol. 356–357. Pp. 263–269.

14. Tateyama, Y. Stability and Clusterization of Hydrogen-Vacancy Complexes in α-Fe: An ab Initio Study / Y. Tateyama, T. Ohno // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 67. 174105.

15. 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.

16. 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.

17. Мирзоев, А.А. Влияние примесей на растворение водорода в ОЦК-железе / А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев, М.С Ракитин // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 10 (227). – С. 77–83.

18. 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 Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – № 10 (227). – С. 114–119.

19. Jiang, D.E. Diffusion of interstitial hydrogen into and through bcc Fe from first principles / D.E. Jiang, E.A. Carter // Phys. Rev. B. 2004. V. 70. P. 064102.

20. Mirzaev D.A., Mirzoev A.A., Okishev K.Yu., Rakitin M.S. Theory of hydrogen solubility in binary iron alloys based on ab initio calculation results // Molecular Physics. 2012. V. 110. № 11–12. Pp. 1299–1304.

21. De Schepper, L. Positron Annihilation on Pure and Carbon-Doped α-Iron in Thermal Equilibrium / L. De Schepper, D. Segers, L. Dorikens-Vanpraet, M. Dorikens, G. Knuyt, L.M. Stals, P. Moser // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 27. No. 9. Pp. 5257–5269.

22. Верховых, А.В. DFT моделирование взаимодействия водорода с вакансией в ОЦК-железе / А.В. Верховых, А.А. Мирзоев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2015. – Т. 7. – № 1. – С. 48–56.

К содержанию

УДК 669.25+539.211

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОБАЛЬТА В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ $NI_{20-X}CO_X$. МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Г.П. Вяткин, С.И. Морозов

Работа посвящена компьютерному моделированию поверхности сплавов на основе Ni первопринципными методами. Получены модели поверхности сплавов Ni(111), рассчитаны их физические свойства: релаксация, поверхностная энергия, работа выхода. Исследовано влияние расположения атомов Co на эти характеристики.

Ключевые слова: моделирование, первопринципные методы, поверхность, никель, кобальт, сегрегация, релаксация.

В настоящее время продолжаются активные научно-исследовательские работы по созданию и совершенствованию альтернативных источников энергии, которые позволяют бережнее использовать окружающую среду. Одним из наиболее перспективных направлений является развитие топливных элементов. Однако, несмотря на более полувековую историю их разработки проблема сравнительно высокой себестоимости энергии остается не решенной. Это порождает необходимость поиска новых материалов, обладающих требуемыми каталитическими свойствами. При этом развитие вычислительной техники, новых компьютерных технологий, методик и допущений теоретической физики позволяет исследовать свойства различных

металлических катализаторов на качественно новом уровне, подтверждая или опровергая получаемые из опытных данных гипотезы. Так в экспериментальной работе [1] отмечается, что получаемое количество нанотрубок и характер их роста существенно зависит от используемой поверхности-катализатора Ni, Fe, Co. Для объяснения этого явления предложено несколько моделей (механизмов) роста углеродных нанотрубок (механизм карбидного цикла, модель «твердая фаза–жидкость–твердая фаза»), которые объясняются характером взаимодействия атомов углерода с поверхностными атомами. К сожалению, применение экспериментальных методов для изучения такого взаимодействия затруднено, но, использование современных методов компьютерного моделирования из первых принципов позволяет исследовать его подробно и надежно. Согласно [2] в настоящее время число теоретических работ по изучению адсорбции атомов углерода на поверхности Ni невелико, при этом иногда они имеют противоречивый характер [3, 4].

В настоящей работе проведены расчеты энергетики и структур моделей исследуемых поверхностных слоев сплавов Ni20-xCox, которые в дальнейшем предполагается применить для изучения механизма взаимодействии атомов углерода, водорода и фрагментов молекул метана с поверхностью этих катализаторов.

Вычисления проводились с использованием лицензионной программы ab-initio расчета полной энергии и молекулярной динамики VASP (Vienna ab-initio simulation program), разработанной факультетом физики Университета Вены [5, 6].

Расчет электронной структуры атомов выполнялся в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) с использованием базиса плоских волн и формализма PAW, потенциалов обменно-коррекционного функционала PBE (Пердью–Бурке–Эрнцерхофа). Энергия обрезания базиса плоских волн была выбрана равной 500 eV.

Для исследования в качестве модели использовалась суперячейка (рис. 1), размерами 2 x 2 x 5 (5 слоев по 4 атома в слое). Атомы первого и второго слоя, для корректного воспроизведения электронной структуры объема, были зафиксированы в равновесных «идеальных» позициях объемной решетки, атомы других «верхних» слоев могли релаксировать. Толщина вакуумного слоя составляла 10 Å, что исключало взаимодействие поверхностей из-за периодических граничных условий. Интегрирование в зоне Бриллюэна выполнялось по методу Монкхорста-Пака для K-сетки 9 x 9 x 1.

Релаксация получаемых структур проводилась методом сопряженных градиентов до достижения критериев сходимости по полной энергии системы менее 10-5 эВ и до величины остаточной силы, действующей на ион, менее 10-3 эВ/Å. Использованные значения параметров расчетной схемы были достаточны для обеспечения надежности результатов.

Для обозначения положения атомов Co используется нумерация атомов Ni в ячейке. Для визуализации моделей использовалась программа VESTA [7].

а) вид сверху; б) вид сбоку

Рис. 1. Модель исследуемой поверхности Ni (111)

В качестве начальной модели для исследования была принята оптимизированная модель Ni(111), в которой, последовательно, один атом никеля в позициях с 9 по 20 замещался атомом железа. Полученные значения полной энергии структур и их отличие от минимально возможной энергии представлены в табл. 1.

Таблица 1

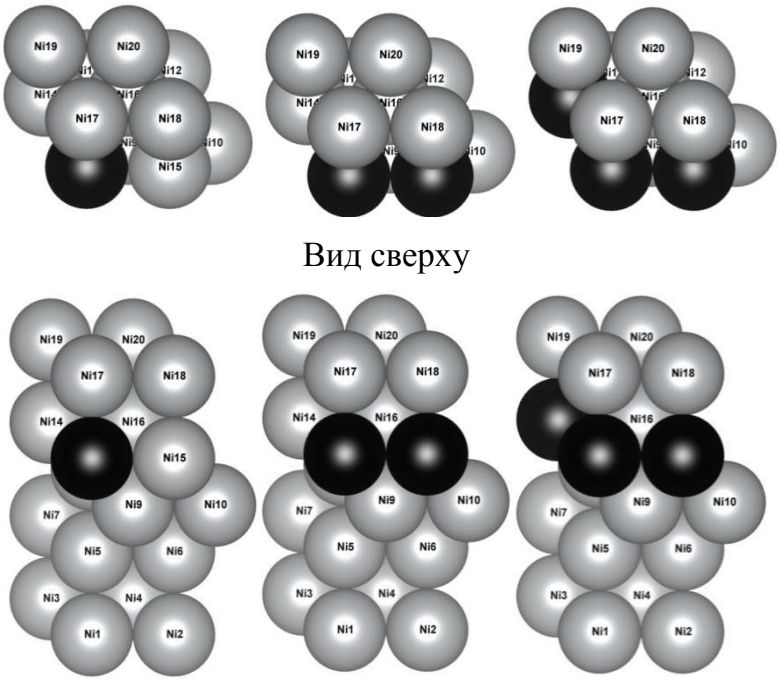
Зависимость полной энергии структур $Ni_{11}Co$ от расположения атома Co

Положение атомов Co	Полная энергия, эВ	Приращение энергии, эВ
13	-105,80	0,00
14	-105,80	0,00
15	-105,80	0,00
16	-105,80	0,00
9	-105,78	0,02
10	-105,78	0,02
11	-105,78	0,02
12	-105,78	0,02
17	-105,68	0,12
18	-105,68	0,12
19	-105,68	0,12
20	-105,68	0,12

Наиболее энергетически выгодным является расположение атомов Co в четвертом слое в эквивалентных по энергиям положениях 13, 14, 15, 16. Далее, менее приоритетными являются места в третьем слое (позиции 9–12). Нахождение атома замещения в пятом поверхностном слое (позиции 17–20) вызывает наибольшее увеличение энергии структуры. В качестве базовой для дальнейших исследований была выбрана структура I с минимальной энергией и с расположением атома кобальта в положении 13 (рис. 2а).

Затем в структуре I последовательно замещался атом никеля атомом кобальта в положениях 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20 и выполнялся расчет полной энергии полученных структур. Результаты расчета, упорядоченные по возрастанию энергий, представлены в табл. 2.

Наименьшая энергия для изучаемой структуры была получена при нахождении атома Co в четвертом слое (положение 14, 15, 16), где уже расположен атом кобальта. В структуре II атом Co размещен в положении 15. Менее энергетически выгодными, но равновероятными (эквивалентными) в плане энергии являются также позиции в третьем слое – 9, 10, 11 и 12. Наибольшую энергию имеет рассматриваемая структура при замещении атомов пятого слоя (позиции 18, 17, 19, 20).



Вид сверху

Вид сбоку

а) x=1; б) x=2; в) x=3

Рис. 2. Наиболее энергетически выгодные модели поверхностного слоя $Ni_{12-x}Co_x$ атомы Ni показаны серым цветом, атомы Co черным

Аналогичные манипуляции по размещению третьего атома Co были произведены со структурой II. Результаты расчета полной энергии представлены в табл. 3.

Исходя из представленных расчетов, по-прежнему наиболее энергетически выгодной является заполнение четвертого слоя позиции 14 и 16. В структуре III (рис. 2в) атом кобальта зафиксирован в положении 14. Наибольшей энергией структура обладает при замещении атомов никеля в верхнем пятом слое в положениях 17, 18, 19, 20.

Таблица 2

Зависимость полной энергии структур $Ni_{10}Co_2$ от расположения второго атома Co (первый атом Co зафиксирован в положении 13)

Положение атомов Co	Полная энергия, эВ	Приращение энергии, эВ
14	-107,42	0,00
15	-107,42	0,00
16	-107,42	0,00
9	-107,38	0,04
10	-107,38	0,04
11	-107,38	0,04
12	-107,38	0,04
18	-107,28	0,14
17	-107,27	0,15
19	-107,27	0,15
20	-107,27	0,15

Таблица 3

Зависимость полной энергии структур Ni_9Co_3 от расположения атома Co

Положение атомов Co	Полная энергия, эВ	Приращение энергии, эВ
14	-109,04	0,00
16	-109,04	0,00
9	-109,00	0,04
11	-109,00	0,04
10	-108,99	0,05
12	-108,99	0,05
18	-108,90	0,14
17	-108,89	0,15
19	-108,89	0,15
20	-108,89	0,15

По полученным моделям поверхностного слоя I, II и III были вычислены следующие физические характеристики (табл. 4): поверхностная энергия, работа выхода электронов, относительное изменение расстояния между слоями поверхности по отношению с расстояниями в объеме (релаксация поверхностного слоя), энергия Ферми.

Замена атома никеля атомом кобальта приводит к изменению расстояний между слоями. Так, расстояние между вторым и третьим слоем в структурах I, II, III, больше объемного расстояния, в то время как в чистом

металле оно меньше. Сжатие для всех структур наблюдается только между слоями 4 и 5. В целом, толщина приповерхностного слоя с добавлением атомов кобальта не изменяется и сохраняется равной 8,09 Å.

В полученных моделях поверхностная энергия практически не изменяется – 0,64 эВ для чистой поверхности Ni(111) и 0,63 эВ для структуры III. Энергия Ферми возрастает с 3,07 до 3,15 эВ. Средний магнитный момент атомов Ni сохраняется, а Co уменьшается. Работа выхода электрона по сравнению с чистой поверхностью 4,43 эВ при добавлении одного атома кобальта увеличивает до 4,61 эВ и далее практически не зависит от количества атомов кобальта.

Таблица 4

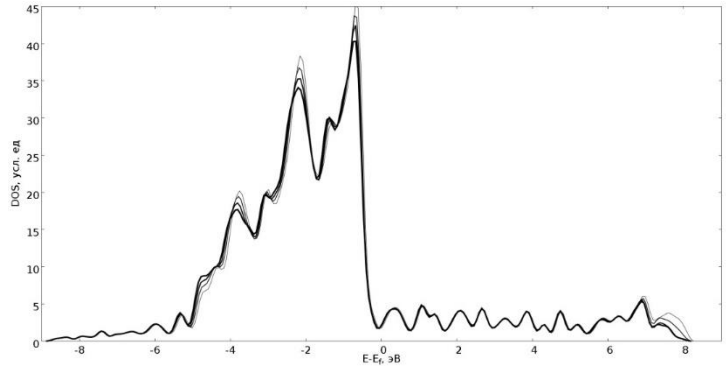
Характеристики моделей поверхности

Состав	Релаксация поверхностного слоя, %			Толщина слоев, Å	Поверхностная энергия, эВ	Работа выхода электрона, эВ	Энергия Ферми E_F, эВ	Средние магнитные моменты атомов	
	δ23	δ34	δ45					Ni	Co
Ni(111)	-0,32	-0,22	-1,44	8,09	0,64	4,43	3,02	0,66	
$Ni_{11}Co$	-0,10	-0,29	-1,61	8,09	0,64	4,61	3,07	0,66	1,80
$Ni_{10}Co_2$	0,13	-0,41	-1,74	8,09	0,63	4,61	3,11	0,66	1,78
Ni_9Co_3	0,38	-0,56	-1,86	8,09	0,63	4,59	3,15	0,66	1,76

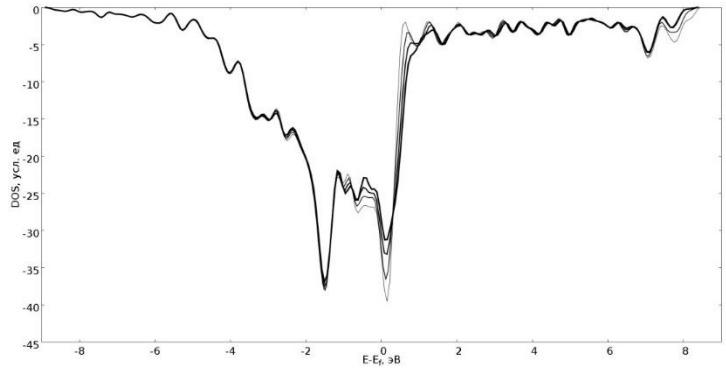
Для структуры I, II и III были рассчитаны плотности электронных состояний (рис. 3). Наличие атомов кобальта проводит к их перераспределению. Так последовательное увеличение количества атомов кобальта уменьшает плотность состояний для энергий -3,7; -2,2; -0,7; 7,0 и 7,6 эВ для конфигурации «спин вверх» и -0,4; 0,1; 7,1 и 7,7 эВ для конфигурации «спин вниз».

Авторы благодарят директора лаборатории суперкомпьютерного моделирования ЮУрГУ П.С. Костенецкого, директора суперкомпьютерного центра ЮУрГУ К.В. Бородулина за всестороннюю техническую поддержку при проведении исследований.

Выполненные расчеты в рамках теории функционала электронной плотности позволили получить модели поверхностных слоев сплавов Ni (111) с различным содержанием атомов Co, которые в дальнейшем предполагается использовать для расчета энергий и геометрических параметров при адсорбции атомов и молекул. Выявлено влияние содержания атомов Co в исследуемых моделях на изменение физических характеристик поверхностного слоя. Их увеличение приводит к снижению поверхностной энергии, к снижению работы выхода электрона для структур I и II и ее росту для структуры III, релаксации расстояний между атомными слоями, вызывает изменение электронной структуры.



а) спин «вверх»;



б) спин «вниз»

Рис. 3. Плотность электронных состояний исследуемых моделей. Толщина линии показывает количество атомов Co: самая тонкая линия соответствует «чистой» поверхности Ni (111), самая толстая – структуре с тремя атомами Co

Наиболее энергетически выгодной для адсорбции частиц является структура III, содержащая три атома Co, размещенных в одном приповерхностном слое, как можно ближе друг к другу.

Библиографический список

1. Новикова, А.А. Исследование микроструктуры углеродного наноматериала, полученного на железо-никелевом катализаторе / А.А. Новикова, Т.Ю. Киселева, Б.П. Тарасов, В.Е. Мурадян // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2004. – № 3. – С. 70–73.

2. Мутигуллин, И.В. Влияние степени покрытия углеродом на возможность формирования твердого раствора внедрения в подповерхностном слое железа (001) и (111) / И.В. Мутигуллин, Д.И. Бажанов, А.С. Илюшин // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53, № 3. – С. 558–563.

3. Mueller, Jonathan E. Structures, Energetics and Reaction Barriers for CHx Bound to the Nickel (111) Surface] / Jonathan E. Mueller, Adri C.T. van Duin, and William A. Goddard III //J. Phys. Chem. C. 2009. Vol. 113, No. 47. Pp. 20290–20306.

4. Вяткин, Г.П. Моделирование из первых принципов сегрегации атомов железа на поверхности (111) никеля / Г.П. Вяткин, С.И. Морозов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2015. – Т. 7, № 2. – С. 44–49.

5. Kresse, G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. 1996. V. 54. P. 11169.

6. Kresse, G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse, D. Joubert // Phys. Rev. B. 1999. V 59. P. 1758.

7. Momma, K. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data / K. Momma, F. Izumi // J. Appl. Crystallogr. 2011. 44. PP. 1272–1276.

К содержанию

УДК 514.174.6 + 548.121

ОЦЕНКА РАЗМЕРНОСТИ ХАУСДОРФА НЕКОТОРЫХ ФРАКТАЛОВ ИЗ ПЯТИКОНЕЧНЫХ ЗВЕЗД

А.А. Поляков

Проведена оценка размерности Хаусдорфа фракталов из пятиконечных звезд d0w(2w), d0w(3w), d0w(4w), d0w(2w3w), d0w(3w4w), d0w(4w3w) в обозначениях автора. Размерности лежат в пределах от 1,9269 для наиболее плотного фрактала d0w(2w), до 1,1962 фрактала d0w(4w). Приведены рекуррентные формулы для вычислений. Вычисление общего количества точек предфракталов проводилось без округлений, применялась арифметика с варьируемой точностью, расчеты велись для предфракталов до 200000 порядка.

Ключевые слова: фракталы; мозаика Пенроуза; фрактальная размерность; фракталы из пятиконечных звезд.

Паркет Пенроуза является наиболее простым примером квазипериодических двумерных решеток с пентагональной симметрией, он формируется из ромбов двух типов[1]. В работах де Брюина [2], предложившего современный вид паркета Пенроуза, полученного проекцией 5-мерной кубической решетки на плоскость, отмечено, что возможно построение трехмерной поверхности из ромбов одного типа, ориентированных в трехмерном пространстве различным образом, причем проекция такой конструкции на плоскость даст паркет Пенроуза. Такая поверхность была названа кровлей Виринга (“Wieringa roof”). Вершины ромбов в кровле Виринга расположены в четырех параллельных слоях. В работах [3 – 5] проанализировано строение этих слоев, оказалось, что все точки в них являются вершинами правильных пятиконечных звезд двух ориентаций. Эти звезды можно выбрать одинакового, наименьшего размера. Они могут иметь различное взаимное расположение: звезды могут быть расположены отдельно, касаться друг друга вершинами и частично пересекаться. Были выделены кластеры звезд, наблюдаемые в паркете Пенроуза, которые можно описать следующим

образом: центры звезд в кластере расположены по 10 вершинам звезд бóльшего размера. Отношение размеров таких обобщенных звезд – центров звезд к размерам исходных звезд равно золотому сечению, взятому в целой степени; также было предложено [5] рассматривать кластеры кластеров звезд. Бесконечная последовательность таких обобщенных кластеров является фракталом [6]. Различные фракталы из пятиконечных звезд, похожие на кластеры, наблюдаемые в паркете Пенроуза могут быть построены дефляционным образом – заданием инициатора и генератора (разбиение фигуры на все более мелкие элементы), а также методом инфляции, как при построении квазипериодических решеток (соединением полученных кластеров в бесконечно возрастающие фигуры). В работе [7] показано, как можно связать оба подхода к построению фрактала из пятиконечных звезд, дано строгое описание методики построения таких фракталов.

В настоящей статье рассматривается методика подсчета фрактальных размерностей некоторых фракталов из пятиконечных звезд.

Будет использоваться относительное дефляционное [7] описание фракталов: звезды могут иметь две ориентации, связанные между собой операцией инверсии относительно точки.

Изображаем исходную звезду размером $a_0 = a\tau^{-N_0}$ и одной из двух ориентаций (“w” или “b”). Обозначаем ее символами N_0c_0, где $c_10 =$ "\"w\"" Или "b\"" . Здесь $\tau = 0.5 + 0.5 \cdot 5^{0.5} \approx 1.618$ – золотое сечение.

Обобщенные звезды первого шага ориентации c_1 и размера $a_1 = a\tau^{-(N_0+N_1)}$, располагается так, что их центры совпадают с вершинами звезд предыдущего шага. Точки предыдущего шага удаляются. Ориентацию будем обозначать “w”, если она совпадает с этой характеристикой предыдущего шага, иначе – “b”.

Обобщенные звезды i-го этапа, с размерами $a_i = a\tau^{-\sum_{k=0}^{i} N_k}$ и относительной ориентацией c_i, располагаем так, что их центры совпадают с вершинами предфрактала предыдущего этапа. При этом совпадающие вершины учитываются один раз, предыдущий предфрактал удаляется.

Среди возможных вариантов можно выделить такие фракталы из пятиконечных звезд, у которых в относительном дефляционном описании бесконечно повторяется последовательность операций, например:

$$^{d}0w\ N_1c_1N_1c_1N_1c_1 \ldots = {}^{d}0w\ (N_1c_1).$$

Скобки здесь символизируют повторение, как в бесконечной дроби. В общем случае:

$$^{d}N_0\ c_0N_1c_1N_2c_2 \ldots N_kc_k(N_{k+1}c_{k+1} \ldots N_mc_m).$$

В таких фракталах наиболее ярко выражено самоподобие (повторение характеристик в меньших масштабах). В данной работе будут рассчитаны размерности фракталов $^{d}0w(2w)$, $^{d}0w(3w)$, $^{d}0w(4w)$, $^{d}0w(2w3w)$, $^{d}0w(3w4w)$.

Оценка фрактальной размерности Хаусдорфа-Безиковича [6] дается соотношением:

$$d_H = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\ln N(\varepsilon)}{\ln \frac{1}{\varepsilon}},$$

где ε – диаметр (радиус) дисков, покрывающих множество точек фрактала, N(ε) – число таких дисков, необходимых для покрытия. У фрактала $^{d}0w(2w)$, (который в [4, 5] назывался «Бутон из Бутонов») лепестки некоторых звезд взаимно пересекаются, что усложняет расчет размерности. В связи с этим проводился подсчет его фрактальной размерности покрытием дисками лепестков звезд и покрытием ядер звезд (рис. 1). Оказалось, что оценки размерности при увеличении порядка фрактала сходятся, например, при порядке предфрактала 30000 разница составляет 0,0025 % и уменьшается с ростом порядка. В данной работе оценка фрактальной размерности проводится покрытием дисками ядер звезд.

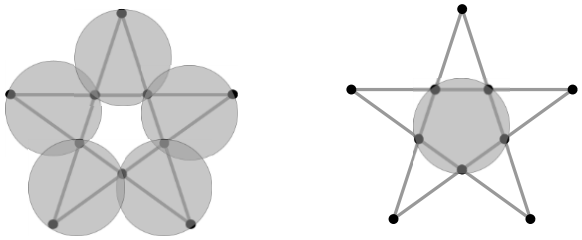


Рис. 1. Сравнение покрытия дисками лепестков и ядра звезды

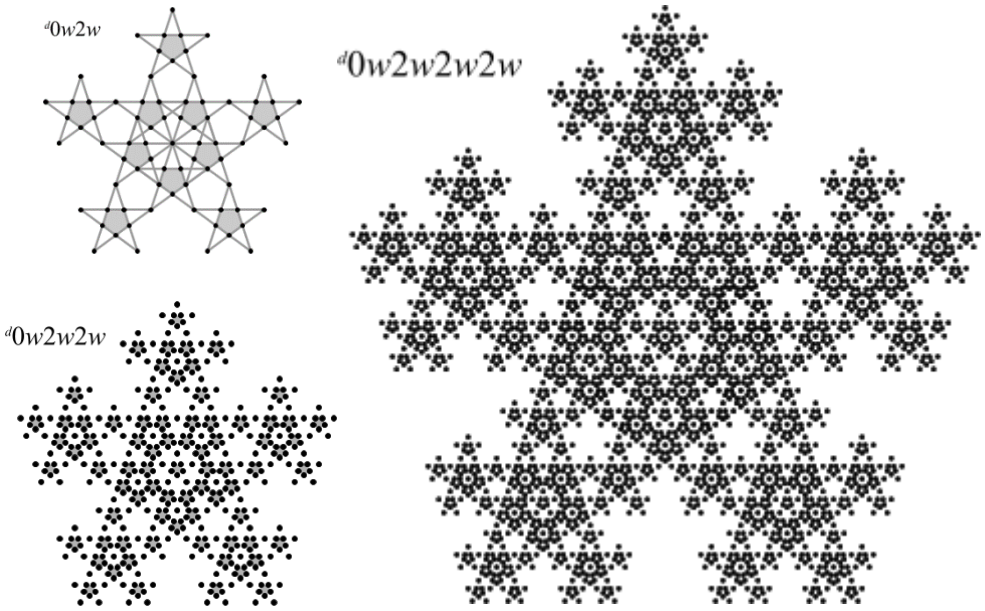


Рис. 2. Фрактал d0w(2w). Показаны предфракталы d0w2w, d0w2w2w, d0w2w2w2w.

Рассмотрим подробнее подсчет элементов фрактала ${}^{d}0w(2w)$ на каждом шаге роста. Каждая вершина предфрактала на следующем шаге становится звездой, поэтому количество ядер звезд равно количеству вершин предфрактала предыдущего порядка. На первом шаге () предфрактал – звезда – имеет 10 вершин ($N_1 = 10$). На втором шаге (рис. 2. – предфрактал ${}^{d}0w2w$) $N_2 = 10N_1 - 24 = 76$ вершин, здесь совпадают 10 вершин звезд лепестков и ядра предфрактала, 10 вершин звезд внутри ядра оказываются общими и в центре совпадают вершины 5 звезд. На третьем шаге (${}^{d}0w2w2w$) $N_3 = 10N_2 - 24N_1 + 5 = 525$ вершин. Добавляются 5 вершин, так как звезды, которые совпадают внутри ядра предфрактала и поэтому вычитаются, касаются друг друга вершинами, то есть точки удаляются два раза. Заметим, что такая логика подсчета соответствует, инфляционному [7], а не дефляционному подходу к описанию фрактала. Рекуррентная формула для подсчета вершин предфрактала порядка k:

$$N_k = 10N_{k-1} - 24N_{k-2} + 5 + 5\sum_{i=1}^{k-3} N_i .$$

Размер дисков, покрывающих ядра звезд на каждом шаге будет равен:

$$\varepsilon_k = \tau^{-2(k-1)}.$$

Тогда оценка фрактальной размерности k-го предфрактала ${}^{d}0w(2w)_k$:

$$d_H(k) = \frac{\ln N_{k-1}}{2(k-1)\ln\tau}.$$

Здесь число элементов – ядер звезд равно числу вершин звезд на предыдущем шаге: N_{k-1}.

У фрактала ${}^{d}0w(4w)$ лепестки звезд не пересекаются и не касаются друг друга, поэтому $N_k = 10^k$ и $\varepsilon_k = \tau^{-4(k-1)}$.

$$d_H = \frac{(k-1)\ln 10}{4(k-1)\ln\tau} = \frac{\ln 10}{4\ln\tau} \approx 1.196.$$

В ядре предфрактала ${}^{d}0w3w$ (рис. 3) звезды касаются лепестками, поэтому число точек уменьшается на 5 единиц. Общая рекуррентная формула:

$$N_k = 10N_{k-1} - 5N_{k-2}.$$

Фрактальная размерность:

$$d_H(k) = \frac{\ln N_{k-1}}{3(k-1)\ln\tau}.$$

Фрактал ${}^{d}0w(3w4w)$: $N_1 = 10, N_2 = 10N_1 - 5, N_3 = 10N_2$. Рекуррентные формулы отличаются для четных и нечетных шагов. При четном k:

$$N_k = 10N_{k-1} - 5N_{k-2}.$$

При нечетном k:

$$N_k = 10N_{k-1}.$$

Оценка фрактальной размерности Хаусдорфа-Безиковича для нечетного k:

$$d_H(k) = \frac{\ln N_{k-1}}{3.5(k-1)\ln\tau}.$$

Фрактал ${}^{d}0w(2w3w)$: если принять $N_{-2} = N_{-1} = 0, N_0 = 1, N_1 = 10$, то визуальный анализ полученных предфракталов позволяет записать для четного k:

$$N_k = 10N_{k-1} - 24N_{k-2} - 5N_{k-3} - 5N_{k-4}.$$

Число точек предфрактала при нечетном k:

$$N_k = 10N_{k-1} - 5N_{k-2} - 5N_{k-3}.$$

Оценка фрактальной размерности для нечетного шага k:

$$d_H(k) = \frac{\ln N_{k-1}}{2.5(k-1)\ln\tau}.$$

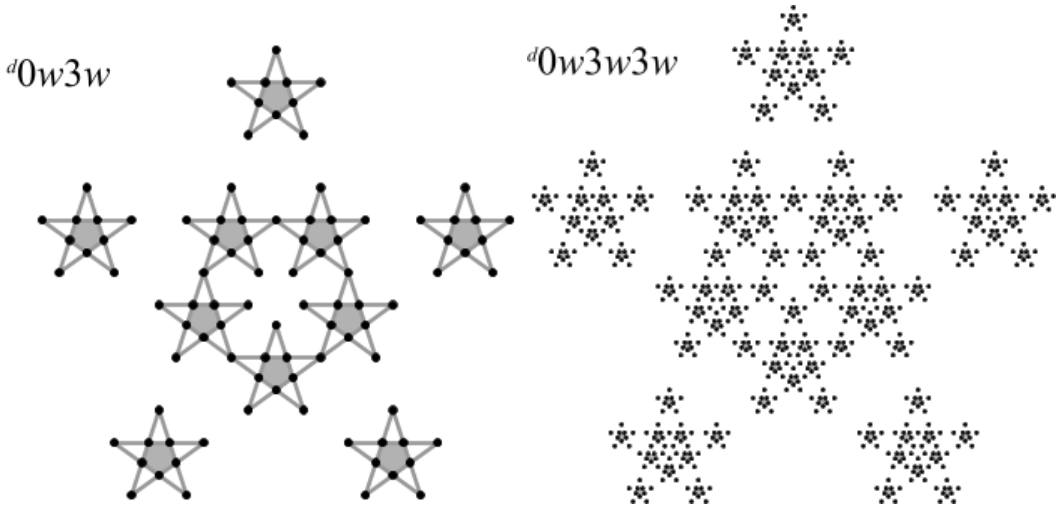


Рис. 3. Фрактал d0w(3w). Показаны предфракталы d0w3w, d0w3w3w

Начальные шаги построения фрактала ${}^{d}0w(2w3w)$ показаны на рис. 4.

Проведены расчеты вплоть до 200000 шага. Для расчета использовалась арифметика с увеличивающимся количеством значащих цифр (variable-precision arithmetic программного пакета MATLAB), чтобы не накапливались ошибки при итерациях. Число значащих цифр выбиралось равным числу шагов. Результаты расчетов приведены в таблице.

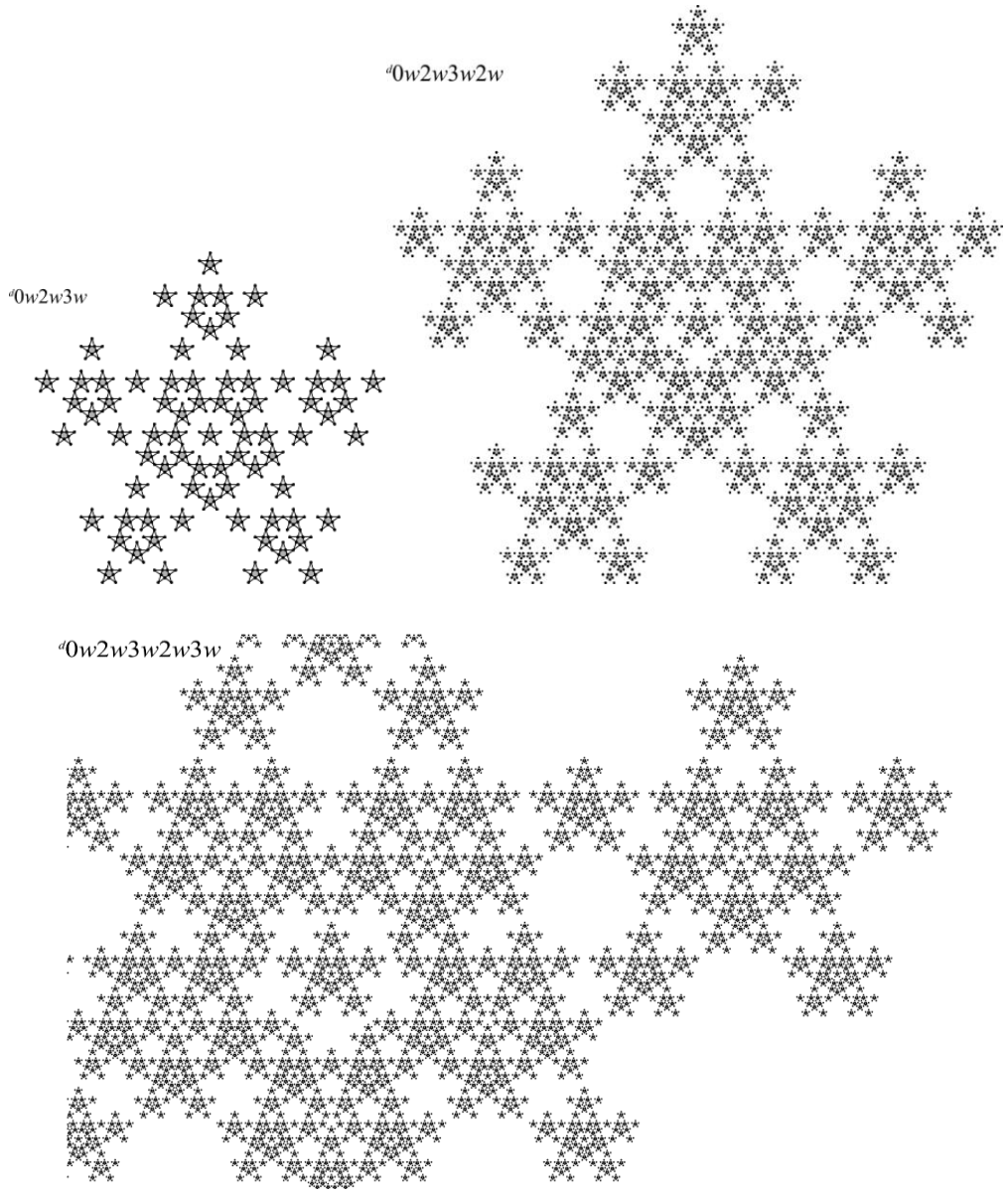


Рис. 4. Фрактал d0w(2w3w). Показаны предфракталы d0w2w3w, d0w2w3w2w, часть предфрактала d0w2w3w2w3w

Таблица

Оценка размерности Хаусдорфа-Безиковича фракталов из пятиконечных звезд d0w(2w), d0w(3w), d0w(4w), d0w(2w3w), d0w(3w4w), d0w(4w3w)

Тип фрактала	Размерность	Комментарии
d0w(2w)	1.92691	200 000 итераций
d0w(3w)	1.55743	200 000 итераций
d0w(4w)	1.19624	точное значение $\frac{\ln 10}{4}\ln\tau$
d0w(2w3w)	1.75172	200 000 итераций
d0w(3w4w)	1.35191	200 000 итераций
d0w(4w3w)	1.35191	методика совпадает с предыдущей

При больших значениях шага итерации, все оценки (кроме d0w(4w)) характеризуются убывающими последовательностями. С большой вероятностью приведенные значения с точностью до 4 знака после десятичной точки характеризуют размерность приведенных фракталов.

Высокое значение размерности Хаусдорфа фрактала $^{d}0w(2w)$ говорит о плотном заполнении плоскости вершинами звезд, что характерно для самопересекающихся фракталов. В то же время не самопересекающиеся фракталы d0w(4w) имеют размерность, приближающуюся к размерности линии.

Библиографический список

1. Penrose, R. Pentaplexity: A Class of Nonperiodic Tilings of the Plane / R. Penrose // Eureka. 1978. 39. Pp. 16–22.

2. de Bruijn, N.G. Algebraic theory of Penrose's non-periodic tilings of the plane, I, II / N.G. de Bruijn // Indagationes mathematicae.– 1981.– V. 43 (1), P. 39 – 66.

3. Polyakov, A.A. Presentation of Penrose tiling as set of overlapping pentagonal stars / A.A. Polyakov // Journal of Physics: Conference Series. Vol. 98. 2008, 012025.

4. 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.

5. Polyakov, A.A. Fractal structures of regular pentagonal stars in Penrose tiling / A.A. Polyakov // Russian Metallurgy (Metally). 2012. I. 8, Pp. 719–722.

6. Мандельброт, Б. Фрактальная геометрия природы / Б. Мандельброт // М.: Институт компьютерных исследований. – 2002. – 656 с.

7. Поляков, А.А. Инфляционный и дефляционный подходы к описанию фрактала из пятиконечных звезд / А.А. Поляков // Наука ЮУрГУ. Секции естественных наук: материалы 66-й науч. конф. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2014. – С. 247–253.

К содержанию

УДК 669.112.227.1:538.915

AB-INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСТВОРЕНИЯ УГЛЕРОДА В РЕШЁТКЕ ОЦК-ЖЕЛЕЗА

Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев

В программном пакете WIEN2k проведено первопринципное моделирование равновесной структуры и свойств ОЦК-железа. Произведено вычисление энергий растворения атомов углерода в ОЦК-железе. Показано, что при растворении углерода в ОЦК-железе происходит гибридизация орбиталей и изменение электронной структуры. Данный эффект меняет магнитный момент на ближайших атомах железа на 0,5 μ_B.

Ключевые слова: первопринципное моделирование, железо, примеси углерода, WIEN2k.

Сплавы на основе железа, несмотря на развитие производства других металлов, пластмасс, керамики, композитов, остаются основными конструкционными материалами. Исключительным достоинством чёрных металлов является, прежде всего, их дешевизна, а также универсальность – при помощи небольших добавок можно резко изменить свойства их сплавов. Углеродистая сталь - это наиболее распространённый материал, используемый в настоящее время. Углерод, растворённый в стали, повышает её прочность в несколько раз. Для описания процесса выплавки стали важно вычислить энергию растворения атомов углерода в решётке железа, а также понять физические процессы, происходящие при его растворении. Данные вопросы для ГЦК-железа были рассмотрены нами ранее [1–4], поэтому в данной работе будет рассмотрена только ОЦК-фаза железа.

Экспериментальные методы позволяют вычислить геометрические характеристики (параметр решётки и т.д.) и энергию растворения углерода в ОЦК-железе. Но энергию растворения они способны определить в очень большом интервале от 0,6 до 1,1 эВ [5–9]. К тому же экспериментальные методы не позволяют сделать вывод о том, как меняется магнитная структура решётки после растворения углерода. Уточнить эту энергию и сделать вывод о изменении магнитной структуры, возможно методами компьютерного моделирования.

Компьютерное моделирование растворения углерода в ОЦК-железе рассматривалось в работах [5, 10–13], однако не было сделано заключения о том, почему при растворении атома углерода с нулевым магнитным моментом, происходит столь сильное изменение магнитного момента на атомах железа [11]. К тому же расчёт энергии растворения углерода был проведён псевдопотенциальными методами, которые не учитывают сжатие остовных оболочек при растворении углерода.

В данной работе расчёты проводились из первых принципов методом LAPW [14], с учетом обобщенного градиентного приближения PBE-GGA в программном пакете WIEN2k [15], обеспечивающим высокую точность расчета полной энергии при минимальном количестве подгоночных параметров. Это наиболее точные методы используемые в рамках теории функционала плотности. Для расчётов использовался мощный вычислительный комплекс Торнадо [16].

В данной работе проводилась объёмная оптимизация и атомно-силовая релаксация сил. ОЦК-железо моделировалось в суперячейке состоящей из54 атомов железа, с параметрами моделирования оптимизированными в работах [17–19]. Они составили: N_k=3*3*3 точки; K_{max} =5 а.е.$^{-1}$; R_{mt}(Fe)=2,0 а.е.; R_{mt}(C)=1,2 а.е.

Для определения энергии растворения углерода относительно фазы графита использовалась формула:

$$\Delta H = E(Fe_{54}C) - E(Fe_{54}) - E(C) \quad (1)$$

где E(Fe_{54}C) – энергии отрелаксированной суперячейки, состоящей из 54 атомов железа и одного атома углерода, находящегося в октапоре, E(Fe_{32}) – энергия суперячейки состоящей из 54 атомов железа, а E(C) – энергия одного атома углерода в решётке графита. Параметры структуры графита были взяты из работы Джианг [12] (a=2,462 Å , c=6,656 Å, α=90°, β=90°, γ=120°).

Для аттестации точности наших расчетов, проведено их сравнение с данными, полученных в работах других авторов. В таблице 1 приведены значения равновесных параметров решётки и магнитных моментов для ОЦК-железа, полученных в нашей работе, с данными других работ.

Таблица 1

Значения параметр решётки и магнитного момента для чистого ОЦК-железа

	Метод	Параметр решётки, Å	Магнитный момент, μ_B
	Эксп.	2,86±0,01 [20]	2,22 [21]
[12]	Псевдопот.	2,83	2,20
[17–18]	Полнопот.	2,84	2,17–2,2
Данная работа	Полнопот.	2,835	2,26

Из таблицы видно, что вычисленное нами значение равновесного параметра решётки не отличается от значений полученных в работах других авторов, а также экспериментальных значений. Значения магнитного момента получилось немного больше экспериментального. Это объясняется тем, что GGA завышает значение магнитного момента.

При растворении углерод увеличивает параметр решётки до 2,85 Å, изменяет положения ближайших атомов железа (табл. 2) и изменяет магнитную структуру атомов железа (табл. 3).

Таблица 2

Значения относительного изменения расположения атомов железа, находящихся в первом и втором окружениях от атома углерода

Работа	Метод	Первая сфера, %	Вторая сфера, %
[11]	Псевдопот.	23,8	-1,9
[12]	Псевдопот.	24,3	-1,8
[5]	Эксп.	38	-2,6
Данная работа	Полнопот.	24	-2,2

Таблица 3

Значения магнитных моментов атомов железа находящихся в первых трёх координационных сферах от атома углерода

Номер координационной сферы	1	2	3
[11], μ_B	1,72	2,29	2,5
Данная работа, μ_B	1,73	2,25	2,43

Из анализа таблиц 2 и 3 видно, что наши значения совпали с данными, полученными ранее, и удовлетворительно согласуются с экспериментальными результатами. Получено, что углерод существенно расталкивает атомы железа в первой координационной сфере (относительное удлинение 24 %), и в то же время, приближает к себе атомы железа второй координационной сферы (на 2,2 %). Третью координационную сферу из атомов железа, атом углерода расталкивает лишь на 0,4 %. Влияние внедренного атома С на последующие координационные сферы монотонно уменьшается по мере увеличения номера сферы и стремится к нулю. Совпадение наших результатов с данными работ других авторов, свидетельствует об адекватности используемой нами методики моделирования.

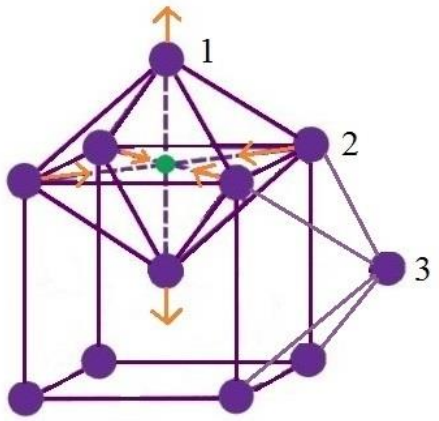


Рис. 1. ОЦК-железо с углеродом: фиолетовым обозначены атомы железа, зелёным выделен атом углерода. Цифрами обозначены координационные сферы от атома углерода. Стрелочками обозначены движения атомов железа при растворении углерода

Как следует из данных таблицы 3, при растворении углерод меняет магнитную структуру всей суперячейки и в особенности атомов железа находящихся в первой и второй координационных сферах У атомов железа, находящихся в первой координационной сфере атома углерода, наблюдается уменьшение магнитного момента до 1,73 μ_B, во второй незначительное уменьшение до 2,25 μ_B, и в третьей происходит увеличение магнитного

момента до 2,43 μ_B. Несмотря на уменьшение магнитного момента атомов железа в первых двух координационных сферах, средний магнитный момент на атом железа в суперячейке увеличивается до 2,3 μ_B. Столь сильное влияние примеси углерода, которая не обладает заметным магнитным моментом, на магнитные свойства матрицы железа требует объяснения. Единственным механизмом такого эффекта, помимо магнетизма, может служить изменение локальной электронной структуры железа, возникающей вследствие гибридизации.

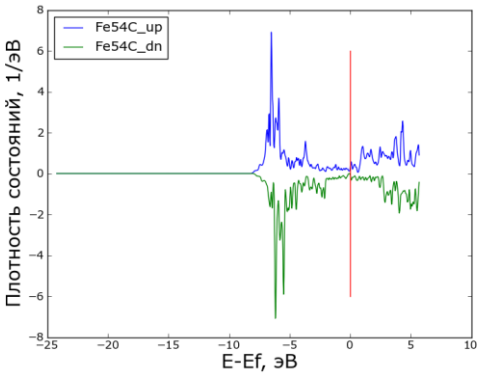


Рис. 2. Графики плотности состояний атома углерода растворённого в решётку ОЦК-железа

Сравнение рассчитанных нами полных и парциальных электронных плотностей на атомах железа первой и второй координационной сферы вблизи растворенного атома углерода с данными для чистого железа приведены в таблице 4 и на рис. 2–4.

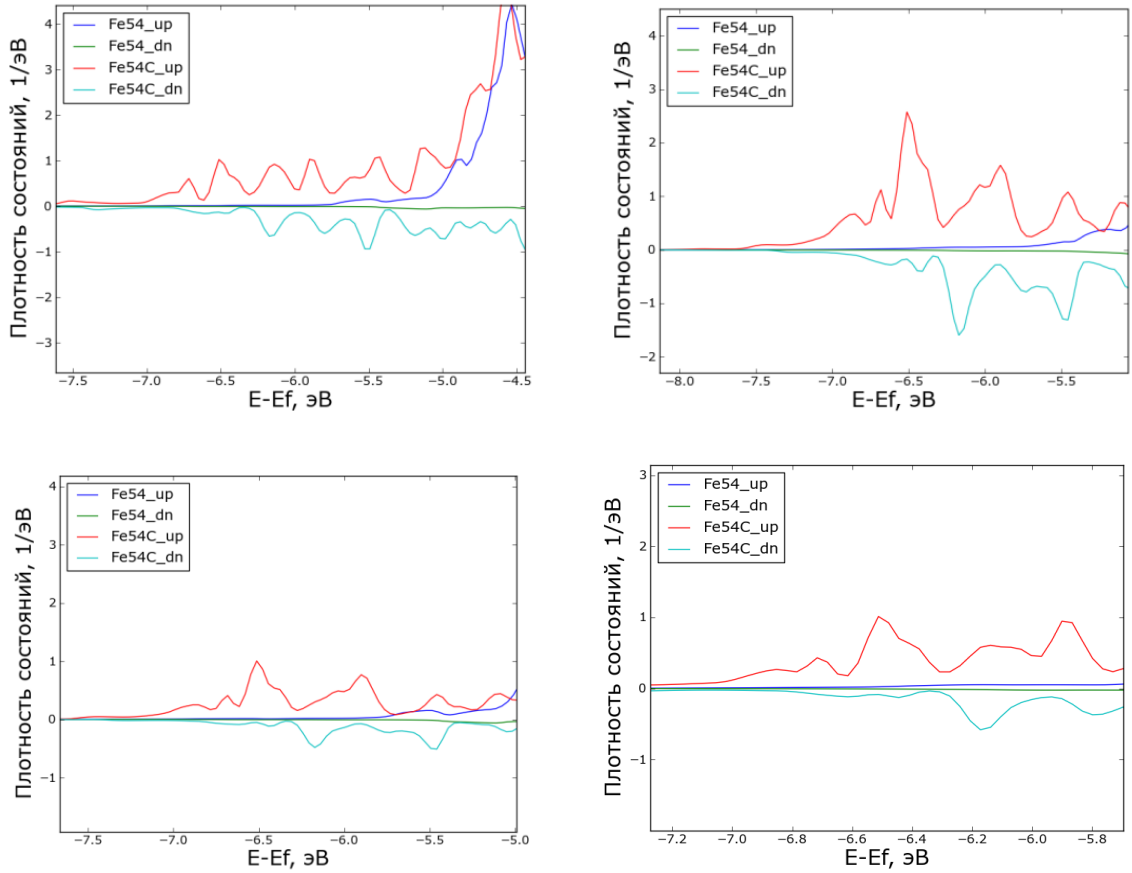


Рис. 3. Графики электронной плотности d-состояний атомов железа. Вверху плотность на атоме железа в первой координационной сфере от атома углерода, внизу во второй. Слева электронная плотность d-e_g состояний, справа d-t_{2g}

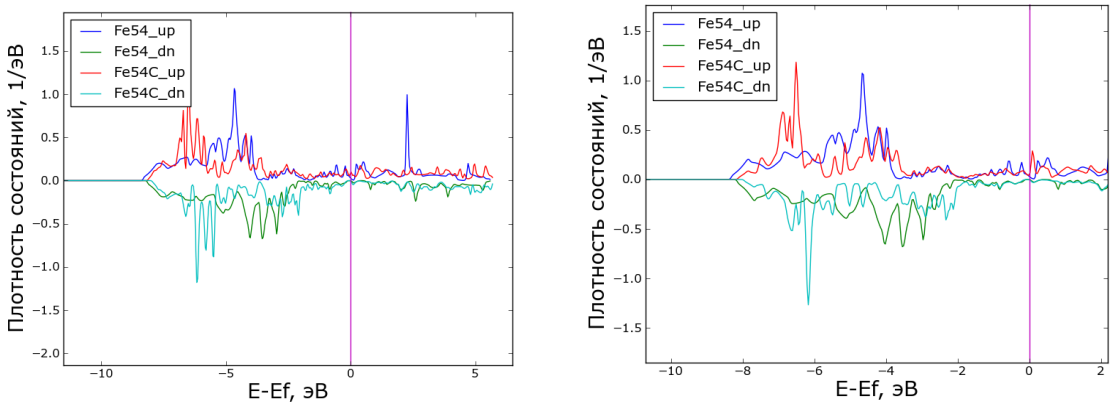


Рис. 4. Графики электронной плотности s-состояний для атомов железа: слева в первой координационной сфере от атома углерода, справа во второй

Таблица 4

Значения электронной плотности для s, p, d, d-e_g и d-t_{2g} подуровней в атомах железа находящихся в первой и второй координационных сферах от атома углерода

	Первое окружение				Второе окружение			
Спин электронов	Вверх		Вниз		Вверх		Вниз	
Суперя-чейка	Fe54	Fe54C	Fe54	Fe54C	Fe54	Fe54C	Fe54	Fe54C
s	1,15	1,13	1,17	1,13	1,15	1,11	1,17	1,11
p	3,08	3,11	3,1	3,13	3,08	3,08	3,1	3,1
d	3,98	3,75	1,7	2,0	3,98	3,98	1,7	1,72
d-e_g	1,68	1,51	0,46	0,72	1,68	1,66	0,46	0,49
d-t_{2g}	2,3	2,24	1,24	1,29	2,3	2,33	1,24	1,23

Из анализа рис. 2–4 и таблицы 4 видно, что атом углерода, растворенный в железе, создает пик плотности электронных состояний в области 5–7 эВ ниже уровня Ферми. Из рис. 2–4 видно появление таких же пиков на орбиталях соседних атомов железа, что четко указывает на наличие существенной s-p и p-d гибридизации орбиталей углерода с орбиталями железа. Наиболее сильная гибридизация орбиталей происходит у p-орбиталей углерода с d-орбиталями e_g-типа атомов железа в первой координационной сфере. Однако, из-за того, что ОЦК-фаза железа является ферромагнитной, электронная плотность состояний для электронов со спином вверх смещена в сторону низких энергий относительно плотности состояний для электронов со спином вниз. В результате этого, гибридизация спиновых подполос с p-состояниями атома углерода, оказывается различной. Такое различие в гибридизации и приводит к изменению магнитных моментов ближайших атомов железа. В результате гибридизации электронная плотность со спином

вверх сместилась к атому углерода, как к более электроотрицательному элементу. Возрастание электронной плотности со спином вниз произошло также из-за гибридизации. Железо потеряло электронную плотность со спином вверх, а углерод со спином вниз. Однако, это не единственная причина возрастания электронной плотности. Второй причиной является создание избыточной электронной плотности со спином вниз на углероде.

Сравнение значения энергии растворения углерода в ОЦК-железе полученного в нашей работе со значениями полученными другими авторами приведено в таблице 5.

Таблица 5

Энергия растворения углерода в ОЦК-железе

Работа	Метод	Энергия растворения, эВ
[12–13]	Псевдопот.	0,7–0,74
[5–9]	Эксп.	0,6–1,1
Данная работа	Полнопот.	0,92±0,02

Из таблицы 5 видно, что данные по энергии растворения очень сильно различаются. Вычисленное нами значение энергии растворения углерода в ОЦК-железе лежит в середине интервала энергий растворения вычисленных экспериментально, что свидетельствует о более высокой точности проведенного моделирования.

Заключение

1. При растворении углерод увеличивает параметр решётки с 2, 835 Å до 2,85 Å и расталкивает атомы железа в первой координационной сфере на 24 %, притягивает атомы железа во-второй координационной сфере на 2,2 %. Третье окружение отталкивается на 0,4 % и по мере увеличения координационной сферы отталкивание устремляется к нулю.

2. При растворении углерода у атомов железа в первой координационной сфере наблюдается уменьшение магнитного момента до 1,73 μ_B, во-второй незначительное уменьшение до 2,25 μ_B, и в третьей происходит увеличение магнитного момента до 2,43 μ_B. Несмотря на уменьшение магнитного момента атомов железа в первых двух координационных сферах, средний магнитный момент на атом железа в суперячейке увеличивается до 2,3 μ_B.

3. У углерода наблюдается пик электронной плотности на промежутке на 5–7 эВ ниже уровня Ферми.

4. В результате растворения углерода происходит s-p и p-d гибридизации орбиталей углерода с орбиталями железа. Наиболее сильная гибридизация орбиталей произошла у p-орбиталей углерода с d-e_g орбиталями атома железа в первой координационной сфере. В результате этой гибридизации произошло изменение электронной структуры, что и явилось причиной изменения магнитных моментов на атомах железа.

5. Энергия растворения углерода в ОЦК-железе равняется 0,92 эВ.

Библиографический список

1. 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.

2. Ридный, Я.М. Ab-initio моделирование энергии растворения атома углерода в парамагнитном ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 3. – С. 86–91.

3. Ридный, Я.М. Расчёт из первых принципов энергий взаимодействия между атомами углерода в антиферромагнитном двухслойном ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 4. – С. 53–58.

4. Ридный, Я.М. Примеси углерода в парамагнитном ГЦК-железе: ab-initio моделирование энергетических параметров / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2015. – Т. 7, № 2. – С. 56–63.

5. Okamoto. H. The C-Fe (Carbon-Iron) System / H. Okamoto // Journal of Phase Equilibria. 1992. Vol. 13, № 5. Pp. 543–565.

6. Могутнов, Б.М. Термодинамика сплавов железа / Б.М. Могутнов, И.А. Томилин, Л.А. Шварцман. – М.: Металлургия, 1984. – 206 с.

7. Shumilov, M. Solubility of carbon in ferrite / M. Shumilov, A. Kozak, L. Yakushechkina, K. Sokolov // The Physics of Metals and Metallography. 1973. Vol. 47. Pp. 2169–2178.

8. Hasebe, M. Effect of Magnetic Transition on Solubility of Carbon in bcc Fe and fcc Co-Ni Alloys / M. Hasebe, H. Ohtani, T. Nishizawa // Metallurgical Transactions A. 1985. Iss. 5. Vol. 16A. Pp. 913–921.

9. Schlesinger, M.E. Application of the quasi-subsubregular solution model: The iron-carbon system / M.E. Schlesinger // Metallurgical Transactions A. 1990. Iss. 1. Vol. 21. Pp. 447–453.

10. 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.

11. Domain, C. Ab initio study of foreign interstitial atom (C, N) interactions with intrinsic point defects in α-Fe / C. Domain, C.S. Becquart, J. Foct // Physical Review B. 2004. Vol. 69. P. 144112.

12. 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.

13. 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.

14. Cottenier, S. Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction / S. Cottenier, 2004. – URL: http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks // DFT_and_LAPW-2_cottenier.pdf.

15. Schwarz, K. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material science / K. Schwarz, P. Blaha, G.K.H. Madsen // Computer Physics Communications. 2002. Vol. 147. Pp. 71–76.

16. URL: http://supercomputer.susu.ac.ru/computers/tornado.

17. Урсаева, А.В. Выбор оптимальных параметров для построения максимально точной модели ОЦК-железа / А.В. Урсаева, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2010. – Вып. 2. – № 9(185). – С. 97–101.

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. P. 3839.

19. Ракитин, М.С. Изменение электронной структуры α-железа, содержащего внедренные атомы водорода / М.С. Ракитин, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2010. – Вып. 14. – № 13(189). – С. 67–71.

20. Acet, M. High-temperature moment-volume instability and anti-Invar of a-Fe / M. Acet, H. Zahres, E. F. Wassermann, W. Pepperhoff // Physical Review B. 1994. Vol. 49. Pp. 6012–6017.

21. Kittel, C. Introduction to Solid State Physics, 7th ed. / C. Kittel. – New york, publishing house John Wiley & Sons, 1996.

К содержанию

УДК 538.9:004.9 + 546.72

НОВЫЙ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ РАСЧЕТА СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА С ПОМОЩЬЮ ПЕРВОПРИНЦИПНОГО КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.Н. Соболев, И.В. Булдашев

В работе предлагается новый нормосохраняющий псевдопотенциал для описания электронов основы атомов железа. Показано, что результаты, полученные с его помощью, находятся ближе к результатам полноэлектронных методов, чем у аналогов.

Ключевые слова: псевдопотенциал, ОЦК-железо, первопринципное компьютерное моделирование, элементарная ячейка, собственная функция, алгоритм градиентного спуска.

Введение

Компьютерное моделирование «из первых принципов» в последние десятилетия переходит из разряда диковинок в инструментарий практикующих материаловедов. Постоянно увеличивающиеся вычислительные мощности, отсутствие необходимости в постановке дорогостоящих экспериментов, а также точность результатов, получаемых с помощью ab initio методов, делают проведение подобного моделирования необходимым шагом при разработке новых материалов. С использованием ab initio методов исследовались системы в различном агрегатном состоянии[1–3], различной размерности[4,5], в широком диапазоне термодинамических условий [6]. Однако, столь широкое использование этих методов приводит к появлению вопроса об определении погрешностей, возникающих при их применении.

Методы моделирования «из первых принципов» основываются на решении уравнения Шредингера для системы частиц. Среди всех подобных методов выделяются методы, основанные на теории функционала электронной плотности [7], которая предлагает искать решение уравнения Шредингера в виде одночастичной волновой функции, зависящей от функционала локальной электронной плотности. Эта волновая функция может быть разложена как линейная комбинация функций, составляющих некоторый базис, и представлена как вектор, состоящий из коэффициентов такого разложения. В качестве базисного набора функций удобно использовать атомные орбитали (с центрами на отдельных атомах), либо набор плоских волн. Такое описание электронной волновой функции, однако, весьма неудобно, если она концентрируется близко к ядру атома (т.н. «электроны основы»), – в этом случае возникают большие градиенты электронной плотности, которые можно описать таким разложением волновой функции только в случае существенного увеличения размеров базиса. Для таких электронов обычно используется т.н. эффективный потенциал, или псевдопотенциал, который замещает в уравнении Шредингера обычно в нем присутствующее кулоновское отталкивание электронов основы.

Вследствие векторного представления волновой функции теория функционала электронной плотности оказалась удобной для алгоритмизации и описания в виде программного кода. К настоящему моменту создано большое количество программных пакетов и комплексов, реализующих ТФП, самыми известными среди которых являются Wien2k [8], VASP [9], SIESTA [10], Quantum Espresso [11] и др. Эти пакеты отличаются друг от друга используемым базисным набором и способом получения псевдопотенциала для электронов основы – в то время, как Wien2K решает уравнение Шредингера для всех электронов, VASP использует ультрамягкие псевдопотенциалы Вандербильта [12], а SIESTA – нормосохраняющие псевдопотенциалы Трулье и Мартинса [13].

Необходимым условием для анализа погрешностей является повторяемость результатов – различные программные реализации одного и того же формализма (основанного на ТФП) должны выдавать одинаковые предсказания при одинаковых условиях. Недавно К. Лежер с коллегами [14] разработали метод, позволяющий последовательно на основе большого набора тестовых расчетов, содержащего большинство кристаллов химических элементов в основном состоянии, определить дельта-фактор – число, описывающее разницу в предсказаниях различных методов. Данный метод был применен к большому числу различных программных пакетов, реализующих ТФП, но подавляющее большинство этих методов использовали в качестве базисного набора плоские волны. В данной работе нами будет определен дельта-фактор для программного пакета SIESTA, использующего в качестве базиса атомные орбитали, и будет предложен способ создать нормосохраняющий псевдопотенциал, минимизирующий дельта-фактор по сравнению с де-факто стандартными в теории твердого тела программными пакетами VASP и Wien2K.

Методы

Программный пакет SIESTA реализует самосогласованный метод решения уравнения Шредингера, основанный на теории функционала электронной плотности. Используемый в методе базисный набор включает в себя линейную комбинацию атомных орбиталей, причем каждой атомной орбитали может соответствовать одна либо несколько базисных функций. Вычислительная сложность этого метода масштабируется линейно с ростом числа частиц, что позволяет моделировать с его помощью системы, состоящие из 10^2–10^3 атомов. Вследствие этого, он может быть применен к большому количеству разнообразных систем, среди которых жидкие и твердые металлы, нанотрубки, металлические стекла и биомолекулы (см. обзор [15]).

Стандартные нормосохраняющие псевдопотенциалы Трулье и Мартинса, используемые в методе (радиально симметричная функция $V_l(r)$, в зависимости от углового момента l), переводятся в полностью нелокальную форму, предложенную Клейнманом и Байлендером [16]:

$$\hat{V}_l^{PS} = V_{local}(r) + \hat{V}^{KB}.$$

Здесь $\hat{V}^{KB}$ получаются из собственных функций полулокального псевдопотенциала с использованием схемы ортогонализации, предложенной Блохлем [17], а V_{local} может в принципе быть произвольной функцией. Единственное условие, налагаемое на нее, заключается в том, что она должна быть равна полноэлектронному потенциалу за радиусом обрезания псевдопотенциала r_{core}. Таким образом, псевдопотенциал оказывается зависим только от электронной конфигурации атома и от радиуса обрезания, который выбирается отдельно для каждого значения l. Изменяя эти параметры, можно добиться совпадения равновесной атомной конфигурации для выбранного вещества с экспериментом либо полноволновыми расчетами, и такое совпадение будет критерием правильности выбора псевдопотенциала. Это было проделано для атома железа Изгуердо с коллегами [18], которые получили псевдопотенциал для следующей электронной конфигурации: $4s^1 4p^0 3d^7 4f^0$, причем радиусы обрезания для каждого значения l были взяты равными 2Å. Такой выбор параметров позволил получить равновесный параметр решетки, равный 2,91Å (экспериментальный параметр решетки равен 2,86Å; равновесный параметр, полученный из полноэлектронных расчетов, оказался равным 2,82Å).

Результаты

Для проверки точности программного пакета SIESTA нами были рассчитаны равновесные параметры и упругие модули 50 элементов из таблицы Менделеева в своих основных состояниях, а затем произведено сравнение полученных данных с результатами полноэлектронных расчетов по методике, предложенной в [14]. Псевдопотенциалы для расчетов были взяты из базы данных [19]. Результаты сравнения показаны на рис. 1.

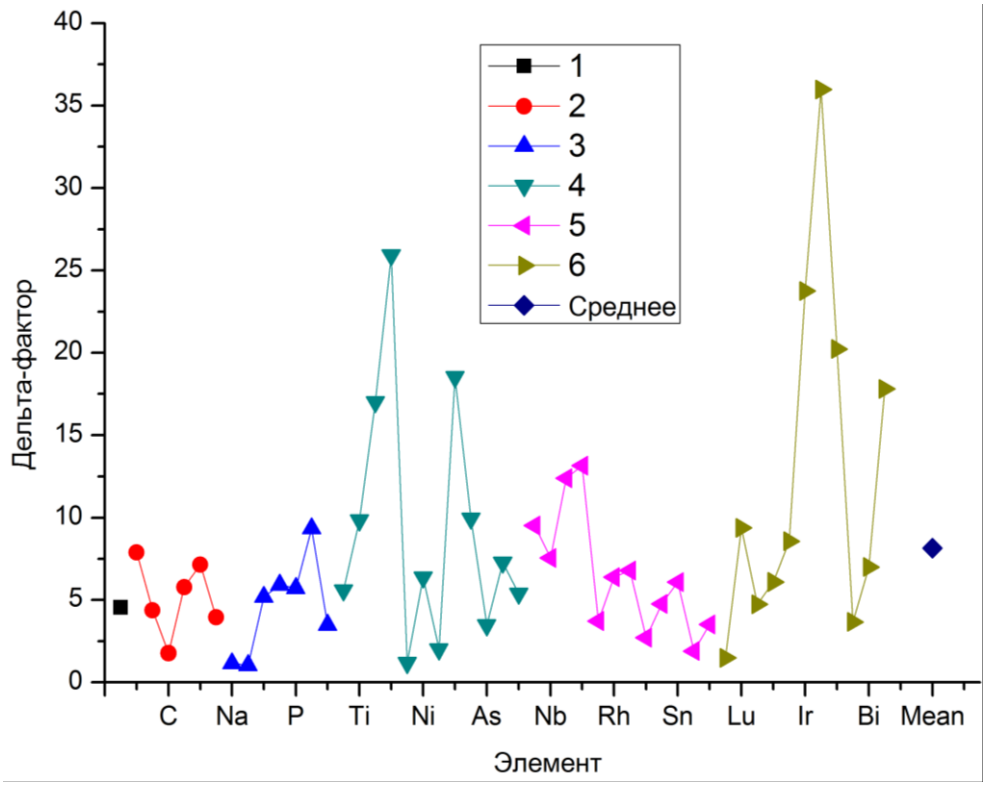


Рис. 1. Дельта-фактор для пакета SIESTA в сравнении
с полноэлектронными расчетами, по методике из [14].
Разными цветами обозначены элементы различных периодов (см. легенду)

Из рисунка видно, что разница между результатами наших расчетов и полноэлектронными методами увеличивается с ростом номера периода. Кроме этого, дельта-фактор является наибольшим для переходных металлов (3d, 5d) и уменьшается по мере заполнения электронных оболочек. Наибольший дельта-фактор имеет расчет для платины, второй по величине – для железа.

Для уменьшения дельта-фактора нами была написана программа, реализующая для него алгоритм градиентного спуска. Она была протестирована на атоме железа, и нами был найден псевдопотенциал, уменьшающий дельта-фактор вдвое. Он рассчитан для валентной электронной конфигурации железа $4s^2 4p^0 3d^6 4f^0$ (электронная конфигурация железа в основном состоянии имеет именно такой вид), причем радиусы обрезания для s, d и f-орбиталей (l = 0, 2, 3 соответственно) равны 2,0Å, а радиус обрезания для p-орбитали (l = 1) равен 2,2Å. При такой конфигурации псевдопотенциала равновесный параметр решетки оказывается равным 2,86Å, что практически совпадает с экспериментальным значением (см. рис. 2).

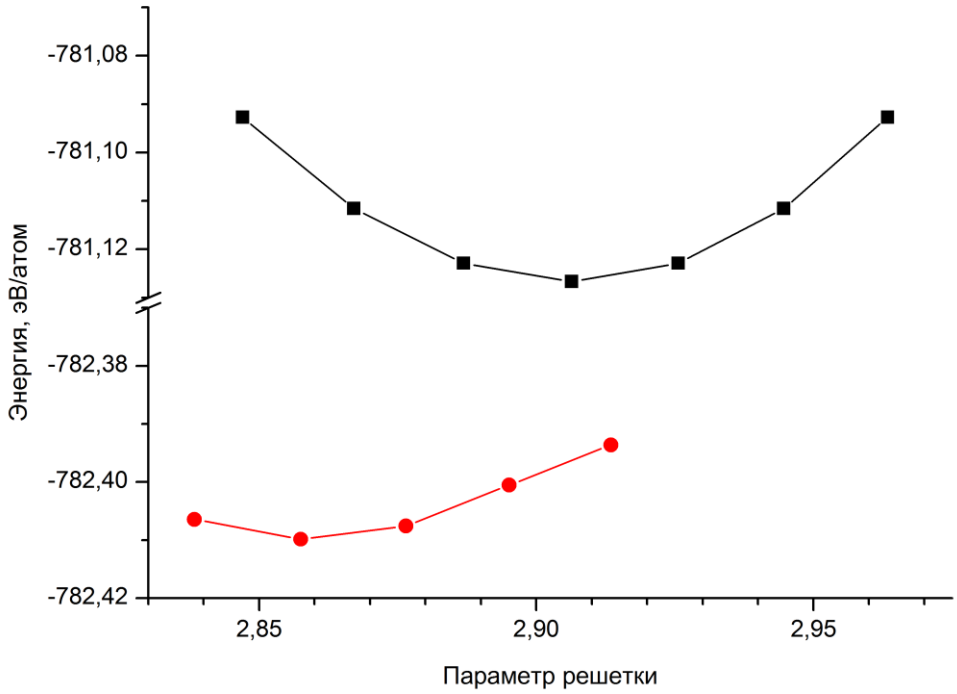


Рис. 2. Равновесный параметр решетки, построенный для разных псевдопотенциалов. Черные квадраты – потенциал, предложенный в [18], красные круги – эта работа

Выводы

Таким образом, предложенный нами нормосохраняющий псевдопотенциал с высокой точностью воспроизводит равновесный параметр для ОЦК железа, полученный экспериментально. Кроме того, созданный нами набор программ позволяет быстро получить псевдопотенциалы для расчета свойств любых элементов с заданной степенью точности в сравнении с полноэлектронными расчетами.

Благодарности

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект РФФИ № 14-03-00618).

Библиографический список

1. Herper H., Hoffmann E., Entel P. Ab initio full-potential study of the structural and magnetic phase stability of iron // Phys. Rev. B. 1999. V. 60, № 6. Pp. 3839–3848.

2. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // Phys. Rev. B. APS, 1993. V. 47, № 1. P. 558.

3. Ganesh P., Widom M. Ab initio simulations of geometrical frustration in supercooled liquid Fe and Fe-based metallic glass // Phys. Rev. B. American Physical Society, 2008. V. 77, № 1. Pp. 1–10.

4. Weissmann M. etc. Theoretical study of iron-filled carbon nanotubes // Phys. Rev. B. 2006. V. 73, № 12. Pp. 1–8.

5. Christ K., Sadeghpour H. Energy dispersion in graphene and carbon nanotubes and molecular encapsulation in nanotubes // Phys. Rev. B. 2007. V. 75, № 19. Pp. 1–7.

6. Alfè D., Kresse G., Gillan M. Structure and dynamics of liquid iron under Earth's core conditions // Phys. Rev. B. 2000. V. 61, № 1. Pp. 132–142.

7. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. APS, 1964. V. 136, № 3B. P. B864.

8. Schwarz K., Blaha P., Madsen G.K.H. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences // Comput. Phys. Commun. 2002. V. 147, № 1–2. Pp. 71–76.

9. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54, № 16. Pp. 11169–11186.

10. Soler J.M.J.M. etc. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation // J. Phys. Condens. Matter. IOP Publishing, 2002. V. 14, № 11. Pp. 2745–2779.

11. Giannozzi P. etc. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // J. Phys. Condens. Matter. 2009. V. 21, № 39. P. 395502.

12. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism // Phys. Rev. B. 1990. V. 41, № 11. Pp. 7892–7895.

13. Troullier N., Martins J.L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations // Phys. Rev. B. 1991. V. 43, № 3. Pp. 1993–2006.

14. Lejaeghere K. и др. Error Estimates for Solid-State Density-Functional Theory Predictions: An Overview by Means of the Ground-State Elemental Crystals // Crit. Rev. Solid State Mater. Sci. 2014. V. 39, № 1. Pp. 1–24.

15. Ordejon P. Linear Scaling ab initio Calculations in Nanoscale Materials with SIESTA // Computer Simulation of Materials at Atomic Level / под ред. Deák P., Frauenheim T., Pederson M.R. Weinheim, FRG: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2000. V. 335. Pp. 335–356.

16. Bylander D., Kleinman L., Lee S. Self-consistent calculations of the energy bands and bonding properties of B12C3 // Phys. Rev. B. 1990. V. 42, № 2. Pp. 1394–1403.

17. Blöchl P.E. Generalized separable potentials for electronic-structure calculations // Phys. Rev. B. 1990. V. 41, № 8. Pp. 5414–5416.

18. Izquierdo J. etc Systematic ab initio study of the electronic and magnetic properties of different pure and mixed iron systems // Phys. Rev. B. 2000. V. 61, № 20. Pp. 13639–13646.

19. SIESTA pseudopotential database [Электронный ресурс]. – URL: http://departments.icmab.es/leem/siesta/Databases/Pseudopotentials/periodictable-intro.html.

К содержанию

УДК 544.723.22

АДСОРБЦИЯ АТОМОВ LI И F НА УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ С ДВОЙНОЙ ВАКАНСИЕЙ

С.А. Созыкин, В.П. Бескачко, Г.П. Вяткин

Моделированием из первых принципов исследуется адсорбция атомов лития и фтора на углеродных нанотрубках с дефектами структуры типа двойной вакансии (2V-дефект). Рассмотрено строение дефектных трубок в основном состоянии, оценена роль эффектов, связанных с конечными размерами модели. В окрестности дефекта для адсорбированных атомов определены локальные положения равновесия и оценены энергетические параметры адсорбции. Показано, что для атома лития наиболее выгодно расположение над центром углеродного 8-кольца, образованного 2V-дефектом, а для атома фтора – над атомом углерода в сочленении этого кольца с соседним 5-кольцом.

Ключевые слова: углеродные нанотрубки, моделирование, адсорбция, литий, фтор.

Углеродные наноматериалы, в частности углеродные нанотрубки (УНТ), обладают большим потенциалом практического применения [1]. Как известно, структуру идеальной однослойной УНТ можно представить как свернутый в цилиндр графен (рис. 1) [2]. В нанотрубках, получаемых на практике, обычно имеются дефекты изомеризации Стоуна-Велса, одиночные вакансии, двойные вакансии, примеси внедрения и прочие несовершенства [3], существенно влияющие на свойства нанотрубок. Ранее нами были изучены механические и электрические свойства бездефектных УНТ, а также закономерности структурообразования их эндо- и экзоэдральных комплексов [5–13] с различными атомами. В настоящей работе мы рассматриваем влияние структурных дефектов (двойной вакансии (2V-дефекта)) на адсорбцию атомов лития и фтора. Эти атомы были выбраны потому, что их комплексы с УНТ интересны для практического применения: совершенствования литий-ионных батарей и разработки технологии функционализации нанотрубок, соответственно. Кроме того, они представляют две противоположные по химическим свойствам группы элементов, щелочные металлы и галогены. Первые в соединениях с УНТ являются донорами электронов, а вторые – их акцепторами.

Из литературных источников известно, что при адсорбции на УНТ литий располагается над центрами шестиугольников каркаса трубки, а фтор – над атомами углерода. Двойная вакансия существует в двух вариантах, различающихся расположением удаляемых атомов. Поясним это на примере кресловидных нанотрубок. Первая реализация (n) получается при удалении двух атомов, образующих связь, перпендикулярную оси трубки (атомы 1 и 2 на рис. 1), а вторая реализация (t) – при удалении двух атомов со связью под углом 30^0 к этой оси (атомы 2 и 3 на рис. 1).

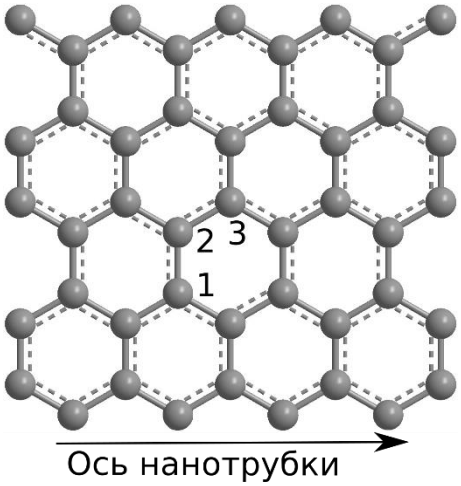


Рис. 1. Фрагмент развертки поверхности нанотрубки.
Стрелкой отмечено направление оси
кресловидной нанотрубки (например, (7,7))

Моделирование проводилось с использованием метода функционала электронной плотности, реализованного в квантово-механическом пакете SIESTA [14]. Указанный метод является более простым в использовании и более распространенным, чем альтернативные подходы моделирования свойств нанообъектов [15–20]. Оптимизация геометрии осуществлялась по методу сопряженных градиентов. Выбирался обменно-корреляционный функционал Каперлея-Алдера (приближение локальной плотности) и базисный набор DZP. Все расчеты проводились на кластере Торнадо ЮУрГУ.

Структура 2V-дефекта

На первом этапе необходимо определить структуру дефектов в отсутствие адсорбированных атомов. Поскольку в пакете SIESTA используются периодические граничные условия, строение каркаса вблизи дефекта может зависеть от размера модели в направлении оси нанотрубки. Для выявления этого размерного эффекта мы определили равновесные конфигурации УНТ с 2V-дефектом для моделей со 110, 166 и 222 атомами углерода в расчетной ячейке, имеющих осевую длину 1; 1,5 и 2 нм, соответственно.

Равновесные конфигурации дефекта *n* типа визуально мало отличаются для моделей разного размера. На рис. 2 приведена конфигурация модели из 222 атомов углерода. Видно, что после удаления двух атомов в каркасе трубки образуется 8-угольник (8-кольцо), сочлененное с двумя 5-кольцами и шестью 6-кольцами. Форма поперечного сечения трубки при этом изменяется незначительно.

Несколько иначе обстоит дело для дефектов *t* типа. Равновесные конфигурации моделей из 110, 166 и 222 атомов углерода, содержащих такие дефекты, изображены на рис. 3. Видно, что дефект и в этом случае представляет 8-кольцо с тем же самым составом окружающих его 5- и 6-колец.

Однако в поперечном сечении трубка искажается намного сильнее, чем в *n*-случае. Если для количественной оценки искажений посчитать отношение ε полуосей эллипса, лучше всего описывающего форму поперечного сечения УНТ, то оказывается что оно равно 0,892 и 0,964 для моделей из 110 и 166 атомов углерода, соответственно, но увеличивается всего лишь до 0,968 при переходе к модели из 222 атомов.

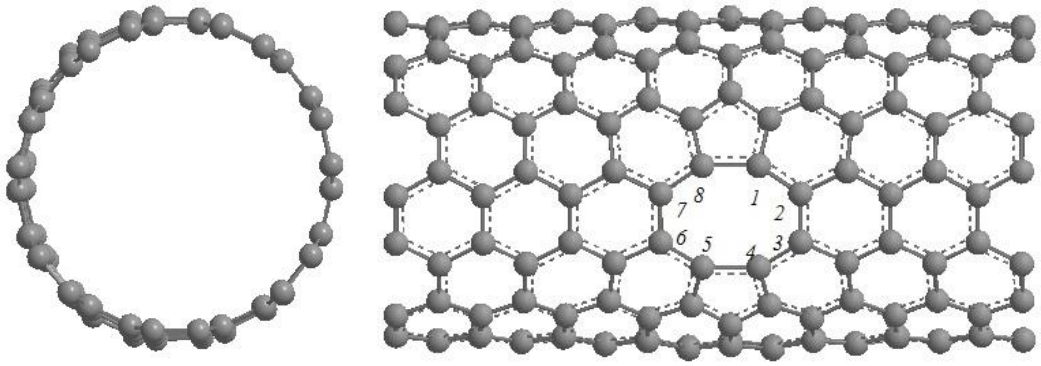


Рис. 2. Равновесные конфигурации УНТ (7,7) с дефектом *n*-типа для случая элементарной ячейки из 222 атомов углерода

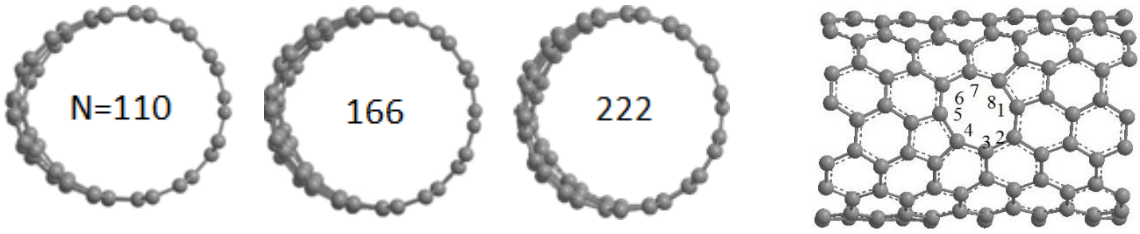


Рис. 3. Поперечные сечения УНТ (7,7) с дефектом *t* типа для моделей с разным числом атомов *N*. Строение 2V-дефекта в модели с *N*=166

В таблице 1 приведены длины связей C-C вблизи дефектов *n* и *t* типа. В целом можно сказать, что длины связей закономерно уменьшаются при увеличении длины моделируемого фрагмента УНТ. При переходе от модели из 110 к 166 атомов углерода было замечено следующее. Если в качестве интегральной меры изменения связей при переходе от модели одного размера к другому посчитать сумму Δl_{Σ} модулей разностей соответственных длин связи, то для дефектов *n*- и *t*-типов она оказывается равной 0,0312 и 0,0029 нм соответственно. То есть, несмотря на значительно большее искажение формы поперечного сечения, эта мера для дефектов *t*-типа в 10 раз меньше, чем для дефектов *n* типа. Это говорит о том, что для обоих типов дефектов модель из 110 атомов углерода оказывается недостаточно длинной, хотя и по разным причинам. Дальнейшее увеличение размера модели от 166 до 222 атомов показало, что для обоих типов дефектов все длины связи стали короче. При этом величина Δl_{Σ} уменьшилась от 0,0312 до 0,0183 нм для дефекта *n* типа и увеличилась от 0,0029 до 0,0106 нм для дефектов *t* типа.

Таким образом, учитывая, что при последнем увеличении размера модели степень эллиптичности ε сечения трубки почти не изменяется, а изменение Δl_{Σ} находится в разумных пределах (не на порядки), то следует предположить, что модель УНТ из 166 атомов углерода была бы достаточно велика для моделирования изолированного 2V-дефекта в УНТ (7,7).

Таблица 1

Длины C-C связей вблизи 2V-дефектов

C-C	*n* тип			*t* тип		
	110	166	222	110	166	222
1-2	1,549	1,500 (0,049)	1,468 (0,032)	1,430	1,425 (0,005)	1,412 (0,013)
2-3	1,503	1,458 (0,045)	1,448 (0,010)	1,466	1,466 (0,000)	1,451 (0,015)
3-4	1,548	1,499 (0,049)	1,470 (0,029)	1,461	1,453 (0,008)	1,437 (0,016)
4-5	1,683	1,670 (0,013)	1,648 (0,022)	1,517	1,518 (0,001)	1,510 (0,008)
5-6	1,548	1,499 (0,049)	1,470 (0,029)	1,429	1,424 (0,005)	1,412 (0,012)
6-7	1,503	1,458 (0,045)	1,448 (0,010)	1,466	1,466 (0,000)	1,450 (0,016)
7-8	1,548	1,499 (0,049)	1,468 (0,031)	1,461	1,453 (0,008)	1,437 (0,016)
8-1	1,683	1,670 (0,013)	1,650 (0,020)	1,517	1,519 (0,002)	1,509 (0,010)

Номера атомов соответствуют рис. 2 для дефектов *n* типа и рис. 3 для дефектов *t* типа. В скобках указано изменение длины связи по сравнению с более коротким фрагментом нанотрубки, Å.

Положения адсорбированных атомов

Хотя модель из 110 атомов углерода недостаточно длинна для количественного изучения геометрии трубки в окрестности изолированных 2V-дефектов, она вполне пригодна для качественного ее описания. Кроме того, эта модель требует для расчета значительно меньше времени и позволяет поэтому рассмотреть значительно больше сценариев для адсорбции примесных атомов на трубку. Наконец, не очевидно, что она будет сильно уступать большим моделям в оценке энергетических параметров адсорбции. Во всяком случае, с ее помощью можно попытаться наметить наиболее интересные закономерности в строении и свойствах комплексов с участием дефектных УНТ, которые затем можно уточнить на больших моделях. Как бы то ни было, все следующие ниже результаты относятся к фрагментам из 110 атомов углерода.

На рисунке 5 показана плоская развертка трубки (7,7) в окрестности 2V-дефектов *n*- и *t*-типов. Ось нанотрубки направлена вдоль оси Y. Занумерованные символы указывают геометрически неэквивалентные локально равновесные положения атомов лития. Одно из таких положений (имеющее номер 0) находится над гексагоном, расположенным диаметрально противоположно дефекту и на рисунке не показано. Из рисунка видно, что и в присутствии дефектов литий предпочитает располагаться над центрами многоугольников углеродного каркаса. Теперь, однако, эти положения энергетически неравноценны. Для обоих типов дефектов наиболее выгодно расположение

лития над центром наибольшего отверстия в стенке нанотрубки (положение 1). Выигрыш в энергии для этой конфигурации для обоих типов дефектов по сравнению с адсорбцией атома лития на противоположной стороне нанотрубки (напротив дефекта) оказался равен 0,9 эВ. В таблице 2 приведены энергии комплексов с данным расположением лития по отношению к таковой с его расположением в центре дефекта (в положении 1). Заметим, что проигрыш в энергии адсорбции в первом окружении *n*-дефекта (положения 2 и 3) заметно больше, чем во втором окружении (положение 4).

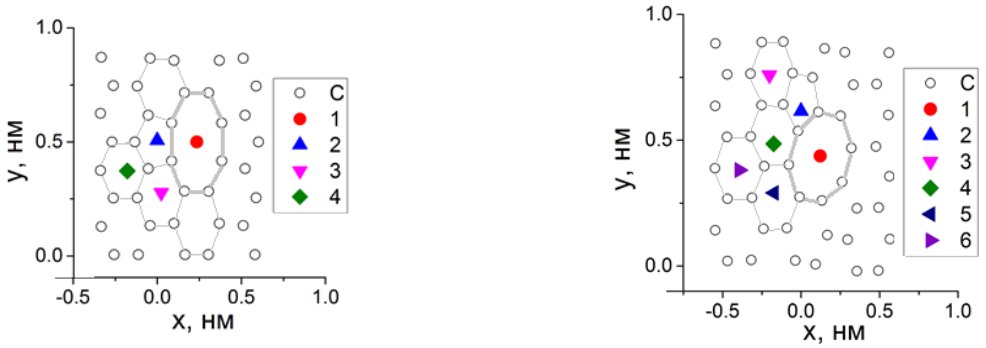


Рис. 5. Локально равновесные положения лития вблизи 2V-дефекта на трубке (7,7). Слева – дефект *n*-типа, справа – дефект *t*-типа

При адсорбции фтора на обоих типах дефектов наиболее выгодными оказались расположения над атомами углерода, находящимися в точках сочленения колец из 8 и 5 атомов углерода (см. рис. 6 и табл. 2 для фтора). В случае *n*-дефекта атомы фтора располагаются почти точно над атомами углерода, а в случае *t*-дефекта заметно их некоторое смещение из этого положения. Выигрыш в энергии в положении 1 по сравнению с положением 0 примерно такой же, как и для атомов лития, примерно 0,9 эВ. Интересно, что различные расположения фтора над атомами 8-кольца для *t*-дефекта существенно неэквивалентны энергетически (сравните энергии в положениях 0 и 4). Кроме того, в положении 5 (второе окружение этого дефекта) проигрыш в энергии почти такой же, как и для положения 0 (бездефектная нанотрубка).

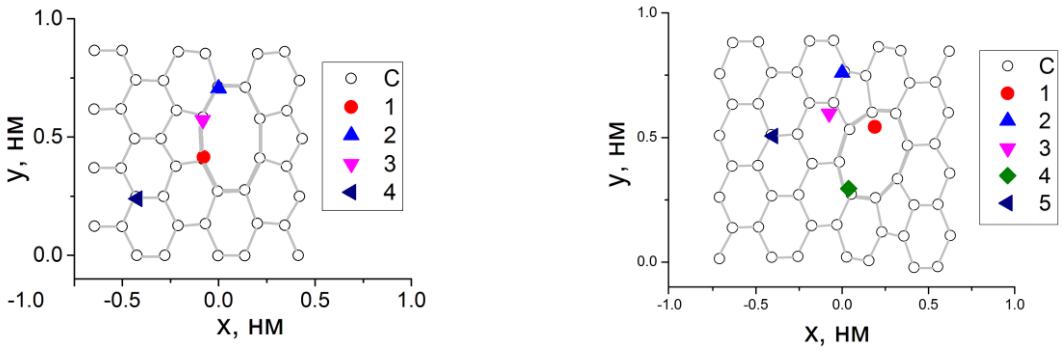


Рис. 6. Локально равновесные положения фтора вблизи 2V-дефекта на трубке (7,7). Слева – дефект *n*-типа, справа – дефект *t*-типа

Таблица 2

Энергия комплекса в зависимости от расположения лития в окрестности 2V-дефекта

Положение, N	$\Delta E_i = E_i - E_1$, эВ			
	литий		фтор	
	n- дефект	*t*-дефект	*n*- дефект	*t*-дефект
0	0,9	0,9	0,93	0,89
1	0	0	0	0
2	0,5	0,17	0,37	0,30
3	0,9	0,48	0	0,53
4	0,28	0,40	1,07	0,68
5	0,63	0,64		0,87
6		0,90		

Выводы

Приведенные выше результаты позволяют утверждать, что:

1. В любом случае (лития или фтора) адсорбция атомов в окрестности 2V-дефекта энергетически более выгодна, чем адсорбция на бездефектной области трубки.

2. В целом закономерности в расположении адсорбционных центров (локальных положений равновесия атомов адсорбата) остаются теми же, что и при адсорбции на идеальной трубке: атомы лития располагаются над центрами углеродных 5-, 6- и 8-колец, а атомы фтора – над атомами углерода.

3. Наиболее выгодными энергетически являются положения атома лития над центром 8-кольца, а атома фтора – над атомом углерода, находящимся в точке сочленения 8- и 5-колец.

4. При моделировании трубки (7,7) размерные эффекты становятся несущественными, если длина моделируемого фрагмента не менее 1,5 нм (168 атомов углерода).

Библиографический список

1. Елецкий, А.В. Наноуглеродные материалы. Физико-химические и эксплуатационные свойства, методы синтеза, энергетические применения / А.В. Елецкий, В.Ю. Зицерман, Г.А. Кобзев // Теплофизика высоких температур. – 2015. – Т. 53. – Вып. 1. – С. 117–140.

2. Елецкий, А.В. Углеродные нанотрубки / А.В. Елецкий // Успехи физических наук. – 1997. – Т. 167. – С. 945–972.

3. Charlier, J.C. Defects in carbon nanotubes / J.C. Charlier // Accounts of Chemical Research. 2002. V. 35. I. 12. Pp. 1063–1069.

4. Глухова, О.Е. Углеродные нанотрубки с дефектами как элементы электронных устройств / О.Е. Глухова, Н.И. Синицын, Г.В. Торгашов, О.А. Терентьев, З.И. Буянова // Электромагнитные волны и электронные системы. – 2007. – Т. 12. – № 10. – С. 57–60.

5. 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.

6. 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.

7. 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.

8. 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.

9. 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. – С. 930–938.

10. 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.

11. 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.

12. 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.

13. Созыкин, С.А. Эндоэдральные комплексы углеродных нанотрубок с литием при конечных температурах / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6. – С. 63–67.

14. 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.

15. 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.

16. 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.

17. Филиппова, Е.Р. Теоретическое исследование структурных элементов одностенной золотой нанотрубки хиральности (5,3) в модели Хаббарда / Е.Р. Филиппова, Миронов Г.И. // Физика низких температур. – 2011. – Т. 37. – № 6. – С. 644–650.

18. 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.

19. 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.

20. 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.

К содержанию

УДК 539.2 + 669.784 + 669.112.227.34

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ПРОЦЕССА УПОРЯДОЧЕНИЯ АТОМОВ УГЛЕРОДА В ОЦК-FE

П.В. Чирков, А.А. Мирзоев

Критически рассмотрена теория упорядочения атомов углерода в решетке кристалла мартенсита, заключенного в упругую матрицу, развитая А. Хачатуряном в 1971 г. и широко используемая в литературе. Показано, что никаких «хвостов» параметра упорядочения при концентрации углерода ниже критической (0,55 масс.%) не появляется. При комнатной температуре при достижении критической концентрации происходит скачкообразное образование 75 % тетрагонального мартенсита. За последнее десятилетие методами компьютерного моделирования проведены новые расчеты энергии деформационного взаимодействия λ_0, согласно которым это значение находится в интервале 6–11 эВ/атом, вместо значения 2,73 эВ/атом, предложенного Хачатуряном. Это коренным образом меняет оценку критической концентрации углерода при комнатной температуре. Она оказывается близкой к значению 0,2 масс.%, которую указал еще Г.В. Курдюмов. Рассмотрены причины аномалии тетрагональности в интервале 0,2–0,6 масс. С.

Ключевые слова: мартенсит, упорядочение углерода, метод молекулярной динамики, потенциал погруженного атома.

Введение

Результаты компьютерного моделирования [1–3] эффектов возникновения тетрагональности мартенсита в закаленных углеродистых сталях однозначно подтвердили правильность теории Зинера-Хачатуряна [4–6], которая в частности, позволяет рассчитать для произвольной концентрации углерода $c = n_c/N$ (n_c и N – количество атомов углерода и железа в решетке) критическую температуру T_c, а для произвольной температуры – критическую концентрацию c_c упорядочения атомов углерода в подрешетке, критической температуры:

$$T_{crit} = 0.36\frac{c\lambda_0}{k},\ c_{crit} = \frac{kT}{0.36\lambda_0}, \quad (1)$$

где λ_0 – параметр деформационного взаимодействия атомов углерода, T – абсолютная температура, k – постоянная Больцмана.

Рассчитанное Хачатуряном значение λ_0 определяет для комнатной температуры критическую концентрацию $c_c = 0,0257 = 0,55$ масс. %. Это означает, что тетрагональный мартенсит должен наблюдаться при концентрации углерода, превышающей 0,55 масс. %. В действительности при концентрации от 0,25 масс.% и выше на дифрактограммах наблюдаются размытые максимумы, которые, согласно статистическому анализу Штремеля [7], можно интерпретировать как дифракцию на смеси кубического и тетрагонального мартенсита. Чтобы дать теоретическую основу причин появления тетрагональности при более низком содержании углерода, А. Хачатурян предложил [5, 6] модернизированный вариант теории упорядочения атомов углерода, основанный на следующих допущениях: 1) перестройка атомных решеток ГЦК→ОЦТ происходит по схеме Бейна, а тогда все атомы углерода из октаэдрических пор аустенита попадают в одну z-подрешетку мартенсита, которая таким образом приобретает максимально возможную при данной концентрации углерода степень тетрагональности *c/a*, а параметр порядка:

$$\eta = \left(3n_C^z - n_C\right)\Big/\left(2n_C\right), \quad (2)$$

где n_c^z – количество атомов углерода в z-подрешетке, равен единице;

2) если равновесный параметр не равен единице, то начинаются процессы перехода атомов углерода из z-подрешетки в подрешетки *x* и *y*.

Этот процесс будет сопровождаться уменьшением размеров уже возникших кристаллов в направлении оси *z*, и возрастанием в направлениях *x* и *y*. Но поскольку такое изменение размеров происходит в уже сформированной структуре, то оно вызовет упругое сопротивление со стороны окружающих кристаллов, описываемое полем упругих напряжений, энергию которого Хачатурян оценил выражением $0.5N\lambda_1 c^2(1-\eta)^2$, где λ_1 - параметр упругой энергии, равный, 0,33 эВ/атом. С учетом данного вклада выражение для свободной энергии системы растворенных атомов углерода в рамках теории Зинера-Хачатуряна было записано [6] в виде:

$$F(c,\eta) = F\left(c,0\right) - \frac{1}{3}Nc^2\lambda_0\eta^2 + \frac{1}{2}Nc^2\lambda_1(1-\eta)^2 + \\ + \frac{kTNc}{3}\left[2\left(1-\eta\right)\ln\left(1-\eta\right) + \left(1-2\eta\right)\ln\left(1-2\eta\right)\right], \quad (3)$$

где *F(c,0)* - свободная энергия разупорядоченного состояния. Требование минимума свободной энергии $\left(\partial F\big/\partial\eta\right)_T = 0$ приводит к уравнению:

$$\frac{m+(1-m)\eta}{\ln\left[(1+2\eta)/(1-\eta)\right]}=\frac{kT}{\lambda_0 c}, \qquad (4)$$

определяющему температурную зависимость равновесной степени порядка η. Здесь:

$$m=\frac{3\lambda_1}{2\lambda_0}. \qquad (5)$$

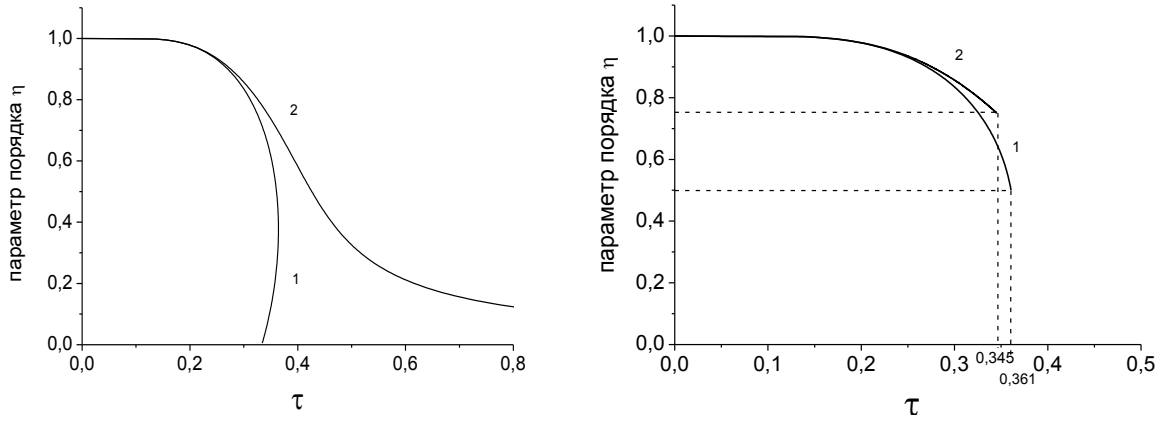


Рис. 1а,б. Зависимость параметра порядка η от безразмерной температуры и концентрации $\tau = kT/\lambda_0 c$ без учета устойчивости тетрагнональной фазы(а) и с ее учетом (б): 1 – для свободного кристалла мартенсита (m=0); 2 – для кристалла, заключенного в матрицу (m=0,1813)

Формула (4) является слегка преобразованным выражением (10) из работы [6]. При *m=0* она определяет зависимость *η(T)* в исходной теории Зинера-Хачатуряна.

На рис. 1 представлена результаты численных расчетов зависимости η(T) для свободного кристалла (*m=0*) мартенсита стали 40 (c=0,0257), и заключенного в матрицу (*m≠0*), без учета устойчивости тетрагональной фазы (а) и с ее учетом (б). Для расчетов принято $\lambda_1 = 0{,}33$ эВ/атом, $\lambda_0 = 2{,}73$ эВ/атом, m=0,1813. Эффектов многозначности функции (4), о которых сообщал Хачатурян [6], обнаружено не было.

Как видно из рисунка 1а, возникновение напряжений, на первый взгляд, действительно приводит к появлению «хвоста» у степени порядка η для температур, превышающих $T_{c.}$ для свободного кристалла, и к исчезновению самой критической температуры. Однако очевидным недостатком рассматриваемой теории является отсутствие анализа устойчивости упорядоченной фазы. Настоящая статья посвящена именно этой проблеме.

Устойчивость упорядоченной структуры

Использование условия производит отбор из широкого класса зависимостей *η(T)* той, при которой функция *F(c,η(T))* принимает минимальные значения по сравнению с остальными, неравновесными зависимостями *η(T)*.

Однако это автоматически не гарантирует, что для упорядоченного состояния функция *F(c,η(T))* имеет во всем интервале температур значения меньшие, чем для неупорядоченного состояния. Поэтому постараемся определить область значений *η*, для которых:

$$F\left(c,\eta\right)-F\left(c,0\right)\le 0, \tag{6}$$

т.е. область значений, где распределение углерода и появление тетрагональности в теории Хачатуряна, учитывающей эффект напряжений, становится устойчивым. Используя выражение (3), преобразуем неравенство (6) к виду:

$$\frac{F(c,\eta)-F\left(c,0\right)}{\frac{1}{3}Nc^2\lambda_0}=-\eta^2+m(1-\eta)^2+ \\ +\frac{kT}{\lambda_0 c}\left[2\ln\left(1-\eta\right)+\ln\left(1+2\eta\right)+2\eta\ln\frac{1+2\eta}{1-\eta}\right]\le 0, \tag{7}$$

и учтем, что для равновесного значения параметра порядка, согласно(4), отношение $kT/\lambda_0 c$ может быть выражено через *η*. Рассматривая в (7) случай равенства, приходим к уравнению:

$$\frac{F(c,\eta)-F\left(c,0\right)}{\frac{1}{3}Nc^2\lambda_0}=\eta^2+m(1-\eta^2)+ \\ +\frac{m+(1-m)\eta}{\ln\frac{1+2\eta}{1-\eta}}\ln\left[\left(1-\eta\right)^2\left(1+2\eta\right)\right]=0, \tag{8}$$

которое позволяет найти граничное значение параметра порядка, определяющее температуру упорядочения. Это трансцендентное уравнение, корень которого зависит только от величины *m*. Численное решение данного уравнения позволило построить зависимость величины корня уравнения(8) от значения параметра *m*, которая приведена на рис. 2.

Подставляя найденное для данного *m* значение η_0 в формулу (4), получаем зависимость критического значения *τ* от *m*, которая представлена на рис. 3. Примем, согласно данным Хачатуряна, что *m*=0,1813. Тогда численный расчет корня уравнения (8) дает значение η_0=0,75, а для критической температуры, согласно(4), имеем:

$$\frac{kT}{\lambda_0 c}=0.345, \tag{9}$$

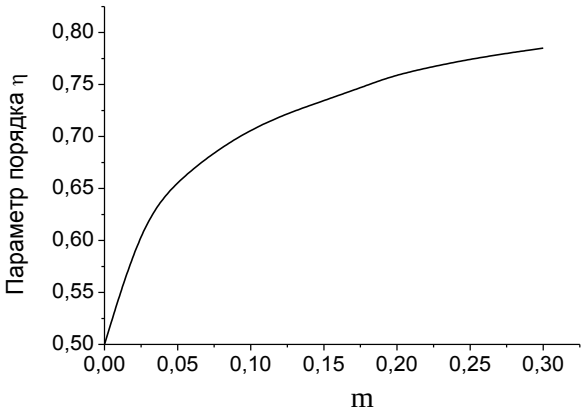


Рис. 2. Зависимость граничного значения параметра порядка η_0 , при котором свободная энергия упорядоченного состояния атомов углерода оказывается ниже, чем для неупорядоченного состояния, от величины параметра $m=(3\lambda_1)/(2\lambda_0)$

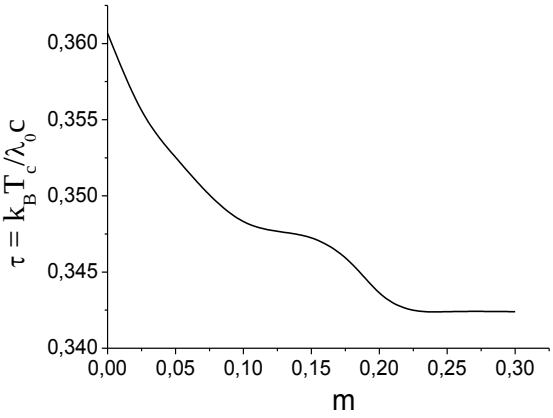


Рис. 3. Зависимость критического значения обобщенной температуры и концентрации от параметра m

Следовательно, в условиях, когда нагретый образец закаленной стали, состоящий из множества кристаллов мартенсита, охлаждается из области неупорядоченного состояния, при температуре:

$$T_{crit} = 0.345\frac{\lambda_0 c}{k}, \qquad (10)$$

произойдет скачкообразное возникновение упорядоченного расположения атомов углерода в решетке мартенсита со степенью порядка η_0=0,75. При дальнейшем охлаждении будет наблюдаться плавное возрастание η до единицы. При последующем нагреве плавное снижение η сменится скачкообразным падением до нуля при $T=T_c$ (рис. 1б). Таким образом, мы видим, что никакие «хвосты» параметра порядка выше точки T_c существовать не должны. Для свободного кристалла мартенсита, когда m=0, значение корня уравнения (8) η_0=0,5, а численный коэффициент в формуле (10) равен 0,361, что установил еще сам Хачатурян [5]. Следовательно, учет эффекта упругой энергии приводит к уменьшению величины данного коэффициента, т.е. к понижению начальной температуры упорядочения. Однако, как видно из рис. 3, это понижение довольно слабое, так что можно принять, что упорядочение атомов углерода в свободном кристалле мартенсита и кристалле, находящемся внутри упругой матрицы, происходит практически одинаково. Таким образом, требуется новое объяснение характера концентрационной зависимости тетрагональности мартенсита, в особенности для интервала концентрации от 0,2 до 0,6 масс. % С. Прежде всего отметим, что за прошедшее десятилетие энергия деформационного взаимодействия λ_0 была рассчитана методами компьютерного моделирования, в том числе первопринципного, в ряде работ [1, 8–11]. Полученные результаты 5,57 [1], 10,7 [8],

6,38 [9], 8,66 [10], 9,5 эВ/атом [11], существенно отличаются от данных расчета Хачатуряна (2,73 эВ/атом). Опираясь на новые, уточненные значения λ_0, можно определить на основе выражения (1), что критическая концентрация углерода, разделяющая области кубического и тетрагонального мартенсита, находится в пределах 0,15–0,27 масс. %. Г.В.Курдюмов [12] считал, что эта величина чуть больше 0,2 масс. %. Следовательно, в рассматриваемом интервале концентраций также должен образовываться однородный мартенсит со степенью тетрагональности, подчиняющейся той же самой зависимости от концентрации, что и высокоуглеродистый мартенсит:

$$\frac{c}{a} = 1 + 0.45 p_C, \qquad (11)$$

где p_C – концентрация углерода в массовых %.

Эксперименты по сверхбыстрой закалке стали [13, 14] полностью подтверждают это заключение. Однако в условиях обычных скоростей охлаждения порядка 10–100 К/с ситуация несколько иная. Мартенсит образуется при температурах 200–400 С, поэтому в процессе замедленного охлаждения до комнатной температуры в нем происходят процессы отпуска (двухфазный распад), приводящие к появлению как бы двух структур- кубической и тетрагональной. Другие возможные причины аномалий тетрагональности рассмотрены в [13].

Выводы

1. Учет упругой энергии, возникающей при перераспределении атомов углерода между подрешетками в кристалле мартенсита, заключенном в упругую матрицу, оказывает слабое влияние на критическую температуру или концентрацию упорядочения. «Хвосты» параметра упорядочения, вопреки мнению А. Хачатуряна, при $T>T_c$ не возникают.

2. Следует признать, что важнейшая для анализа энергетики мартенситного превращения величина энергии деформационного взаимодействия атомов углерода λ_0 оценена А.Хачатуряном неточно. Ее значение, по данным последних работ, составляет 6–10 эВ/атом, соответственно, критическая концентрация углерода при комнатной температуре лежит в районе 0,2 масс. %, что полностью изменяет объяснение причин аномального поведения тетрагональности в интервале концентраций 0,2–0,6 масс. % С.

Библиографический список

1. Chirkov, P.V. Investigation of the process of martensite tetrahedral distortion formation by molrcular dynamics / P.V. Chirkov, A.A. Mirzoev, D.A. Mirzaev // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2014. – Т. 14. - № 2. – С. 54–58.

2. 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.

3. Верховых, А.В. *Ab Initio* моделирование энергии формирования границы Ʒзерна в ОЦК-железе / А.В. Верховых, А.А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5. – № 1. – С. 76–81.

4. Zener, C. Kinetics of the decomposition of austenite / C. Zener // Trans. AIME. 1946. V. 167. Pp. 550–595.

5. Хачатурян, А.Г. Углерод в мартенсите стали. Несовершенство кристаллического строения и мартенситные превращения / А.Г. Хачатурян. – М.: Изд-во Наука, 1972. – 238 с.

6. Хачатурян, А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов / А.Г. Хачатурян. – М.: Изд-во Наука, 1974. – 334 с.

7. Штремель, М.А. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов углеродистого мартенсита / М.А. Штремель, Л.М. Капуткина // ФММ. – 1971. – Т. 32. – № 5. – С. 991–997.

8. Udyansky, A. Interplay between long-range elastic and short-range chemical interactions in Fe-C martensite formation / A. Udyansky, J. von Pezold, V.N. Bugaev, M. Friak and J. Neugebauer // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. Iss. 12. P. 224112.

9. 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. P. 184112.

10. Fan, Zh. Lattice-parameter variation with carbon content of martensite. II. Long-wavelength theory of the cubic-to-tetragonal transition / Zh. Fan, L. Xiao, Zh. Jinxiu, Zh. Mingxing, K. Mokuang, K. Zhenqi // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. № 14. Pp. 9979–9987.

11. Ruban, A.V. Self-trapping of carbon atoms in α'-Fe during the martensitic transformation a qualitative picture from ab-initio calculations / A.V. Ruban // Phys. Rev. B. 2014. V. 90. P. 144106.

12. Курдюмов, Г.В. Явления закалки и отпуска стали / Г.В. Курдюмов. – М.: Изд-во Металлургиздат, 1960. – 64 с.

13. Счастливцев, В.М. Структура термически обработанной стали / В.М. Счастливцев, Д.А. Мирзаев, И.Л. Яковлева. – М.: Изд-во Металлургия, 1994. – 288 с.

14. Cadeville, M.C. Structural, electronic and magnetic properties of spalt-quenched FeC_x alloys (x<0.05) / M.C. Cadeville, J.M. Freidt, C. Lerner // J. Phys. F: Metal Phys. 1977. V. 7. № 1. Pp. 123–137.

К содержанию

УДК 533.583.2 + 536.2

ШИРОКОДИАПАЗОННЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ЭФФЕКТИВНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ИЗ СФЕРИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ В ГАЗЕ

А.П. Яловец

Описан метод расчета эффективного коэффициента теплопроводности порошковых материалов со сферическими частицами с размерами более 1μm в газовой атмосфере в широком диапазоне температур и давлений. Учтены структурный фактор порошковой среды, адсорбция газа на поверхности твердых сфер, температурные зависимости коэффициентов теплопроводности компонентов порошковой среды Результаты расчетов эффективной теплопроводности хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: порошковые материалы, эффективная теплопроводность, сферические частицы, адсорбция.

Современные методы расчета формирования температурных полей в гетерогенных средах основаны на применении эффективных коэффициентов теплопроводности (ЭКТ), которые характеризуют среду на масштабах, много больших характерных макроскопических размеров неоднородностей. Порошковые материалы являются многофазной гетерогенной средой, представляющей собой распределенные в газовой фазе твердые частицы, содержание которых характеризуется их объемной долей. В зависимости от объемной доли твердые частицы могут быть изолированы друг от друга газовой средой (газовзвеси), либо находятся в контакте между собой (свободно насыпанные порошки). В настоящее время интерес к гетерогенным материалам со структурой свободно насыпанного порошка обусловлен, прежде всего, развитием технологий селективного лазерного спекания [1] и создания покрытий с помощью электроннолучевых методов [2].

Результаты экспериментальных исследований теплопроводящих свойств порошковых сред в газовой атмосфере представлены зависимостями ЭКТ от давления и температуры среды, размеров частиц и их объемной доли [3–7]. Эксперименты свидетельствуют, что ЭКТ увеличивается с увеличением давления газа и стремится при высоких давлениях к насыщению.

Исчерпывающий обзор методов описания эффективной теплопроводности гетерогенных сред приведен в [8]. Из него следует, что все модели эффективной теплопроводности гетерогенных сред можно разбить на два класса. К первому классу отнесем бесструктурные модели, которые содержат только данные об теплопроводящих свойствах каждой компоненты гетерогенной среды и её объемной доле, но не содержат никакой информации о структуре такой среды, то есть о размерах частиц и их взаимном расположении [9, 10]. Ко второму классу будут относиться структурные модели,

которые учитывают и размеры частиц, и их взаимное расположение [4, 5, 7, 8]. Именно на основе этих моделей возможно наиболее строгое описание теплопроводящих свойств гетерогенных сред.

Для теоретических исследований процессов селективного лазерного спекания или создания покрытий с помощью электроннолучевых методов необходимым является разработка методов описания ЭКТ порошковой среды на различных этапах ее обработки, то есть в широком диапазоне температур и давлений. Отметим, что по мере нагрева порошковых материалов происходит частичное или полное плавление материала сфер, что приводит к изменению структуры среды.

Сказанное позволяет сделать вывод, что разработка методов расчета ЭКТ порошковых материалов с учетом всего спектра физических процессов, определяющих теплопроводящие свойства рассматриваемой среды, требует дальнейшего развития.

В данной работе описан метод расчета ЭКТ порошкового материала (сферических твердотельных частиц в газовой атмосфере) в широком диапазоне давлений и температур.

Рассмотрим общую идею реализации данной модели. Для свободно насыпанных порошков характерные значения объемной доли конденсированной фазы $\alpha \geq 0.5$ [1–9]. Сравнение таких значений упаковки порошковой среды с предельными значениями плотноупакованных сфер в систему с кубической симметрией (α=0.52), или в объемно-центрированную кубическую (ОЦК) структуру (α=0.68), или в гранецентрированную кубическую (ГЦК) (α=0.74) позволяет утверждать, что в свободно насыпанных порошках формируются регулярные структуры с плотными упаковками. Поэтому в общем случае можно задать структурный фактор порошковой среды как композицию различных типов систем (кубической, ОЦК и ГЦК) в соотношениях, обеспечивающих заданную объемную долю конденсированной фазы. Рассмотрение порошковой среды как системы с определенной симметрией является общепринятым [5, 7, 8].

Описывающий явление теплопроводности закон Фурье аналогичен закону Ома, записанному в дифференциальной форме. Это обстоятельство позволяет строить схемы тепловых цепей подобно схемам электрических цепей и рассчитывать тепловые сопротивления или тепловые проводимости по тем же правилам, что и при расчете электрических сопротивлений или проводимостей. Этот подход был реализован, например, в [5]. Таким образом, построение метода расчета ЭКТ порошковых материалов сводится к решению задачи о вычислении теплового сопротивления элементарной ячейки по её эквивалентной тепловой цепи. Затем находится композиция различных типов систем, обеспечивающих заданную объемную долю конденсированной фазы, и производится вычисление эффективной теплопроводности, усредненной по найденной реализации.

Полагаем, что теплопроводящие свойства порошковых сред изотропны и могут быть описаны на основе рассмотрения композиции систем с кубической, ОЦК и ГЦК симметрией. Параметрами ячейки являются постоянная ячейки a и радиус сфер R, из которых построена ячейка.

Вычисление ЭКТ порошковых материалов применительно к задачам лазерного или электронного спекания порошков необходимо рассмотрение теплопроводящих свойств газа при давлениях, не превышающих нескольких тысяч Торр. В этом случае газ можно считать идеальным. В порошковых материалах с плотной упаковкой сферических частиц толщина газового зазора по мере приближения к точке соприкосновения сфер стремится к нулю, что требует учета зависимости коэффициента теплопроводности от соотношения длины свободного пробега молекул и толщины зазора. В [8] предложена аппроксимационная формула для расчета коэффициента теплообмена через газовый зазор, которая дает точные свободномолекулярные и кондуктивные пределы, а также хорошо описывает переходные режимы.

Найдем тепловое сопротивление кубической ячейки в направлении [100]. Для этого достаточно рассмотреть элемент кубической решетки, заключенный в объеме IJKLI'J'K'L' (рис. 1a). Данный элемент представляет собой куб с ребром, равным постоянной кубической решетки a, и включает две полусферы, погруженные в газовую среду. Эквивалентная тепловая схема данного структурного элемента представлена рис. 1b. Из рис. 1c следует, что тепловые сопротивления $\Re_1$ двух полусфер (1) и заключенного в объеме между полусферами газа $\Re_0$ описываются выражениями:

$$a)\ 1/\Re_1 = \pi\kappa_1 R; \qquad b)\ \frac{1}{\Re_0} = \frac{\pi}{2}\int_{a-2R}^{a}\frac{\kappa_0(l)(a-l)\,dl}{l}. \qquad (1)$$

С учетом явной зависимости $\kappa_0(l)$ [10], интеграл (1) вычисляется аналитически.

Тепловое сопротивление остальной части газа рассматриваемого структурного элемента имеет вид:

$$1/\Re_0' = \kappa_0(a)\,a\left(1-\pi R^2/a^2\right). \qquad (2)$$

Вычисляя полное тепловое сопротивление $\Re_c$ данного структурного элемента кубической решетки с учетом эквивалентной тепловой схемы, приведенной на рис. 1б, выражений (1) и (2), найдем ЭКТ среды κ_c:

$$\kappa_c = 1/\Re_c a, \qquad \text{где } 1/\Re_c = 1/\left(\Re_0+\Re_1\right)+1/\Re_0'. \qquad (3)$$

Тепловое сопротивление ОЦК ячейки находится аналогично предыдущему случаю. От него данную структуру отличает только наличие сферы в центре ячейки. Выделим элемент ОЦК ячейки, такой же, как на рис. 1a.

Данный элемент представляет собой куб с ребром, равным постоянной ячейки a, включает две полусферы А, четыре сегмента сфер В, которые находятся в центрах ОЦК ячейки. Тепловое сопротивление ОЦК ячейки определяется двумя входящими в данный структурный элемент полусфер А, которое вычисляется по формуле (1а), тепловым сопротивлением газа в промежутке А – А, не содержащем сегменты В, тепловым сопротивлением остальной (не перекрытой сферами А и В) части газа рассматриваемого структурного элемента и тепловым сопротивлением входящего в данный структурный элемент четырех сегментов сфер В и газа, заключенного в перекрытом сферами А и В объеме.

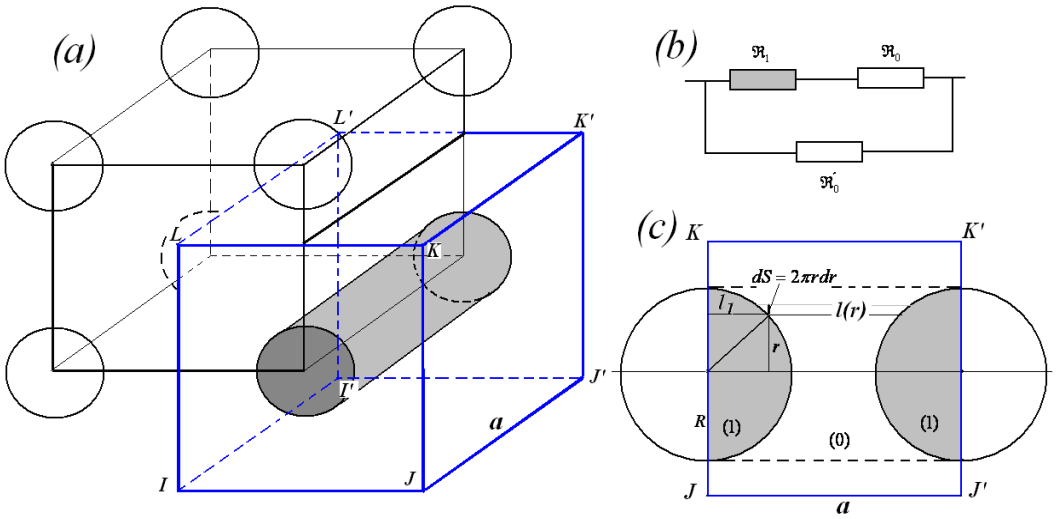


Рис. 1. Элемент кубической решетки

Структурный элемент ГЦК ячейки представляет собой куб с ребром, равным постоянной кубической решетки a, включает две полусферы А, четыре сегмента сфер В и восемь сегментов сфер С. Отметим, что сферы В и С находятся в центрах граней ГЦК ячейки.

В случае плотной упаковки порошковых материалов реализация заданной объемной доли конденсированной фазы может быть получена путем аддитивного (без взаимного проникновения) смешивания различных элементарных ячеек. В общем случае ЭКТ порошкового материала, представленного как композиция упаковок с различным типом ячеек, можно представить в виде $\kappa_{eff} = \sum_i \gamma_i \kappa_{eff}^i$, где κ_{eff}^i, γ_i – соответственно, ЭКТ среды, задаваемой i-тым типом ячейки, и доля поверхности этого типа ячейки в сечении порошковой среды. Определить γ_i по заданной объемной доле α можно из выражений $V = \sum_i V_i N_i;$ $\alpha = \sum_i \alpha_i V_i N_i \Big/ \sum_i V_i N_i.$, где N_i – количество ячеек i-того типа в объеме порошковой среды V, V_i, α_i – объем ячейки и объемная доля конденсированной фазы в ячейке i-того типа. Принимая

во внимание, что средняя площадь поверхности, приходящейся на ячейку i-того типа в единице площади порошковой среды: $S_i = (n_i V_i)^{2/3}$, где $n_i = N_i / V$ – концентрация ячеек i-того типа, получим оценку приходящейся на ячейки i-того типа поверхностной доли: $\gamma_i = S_i \Big/ \sum_k S_k$.

Поскольку основной вклад в теплопроводность порошковых материалов дает область вблизи контакта между частицами, полагаем, что ЭКТ будет зависеть от состояния поверхности твердотельных частиц. Наиболее существенным фактором, определяющим состояние и свойства твердотельной поверхности, является адсорбция.

Подробный анализ закономерностей физической адсорбции приведен в монографии [11]. Для учета влияния адсорбированного слоя на теплопроводящие свойства порошковой среды требуется задание зависимости толщины адсорбционной оболочки δ и её средней массовой плотности ρ_a от термодинамического состояния окружающего твердое тело газа. Для нахождения δ, ρ_a здесь применяется эмпирический подход, аналогичный уравнению изотермы адсорбции Фрейндлиха [11]:

$$\delta = \delta_m \left(P / P_m \right)^{\Delta}, \tag{4}$$

где δ_m – толщина монослоя, которая полагается равной диаметру адсорбированной молекулы, Δ – константа, P_m – параметр. Для описания зависимости параметра P_m от термодинамического состояния окружающего твердотельную поверхность газа примем во внимание качественную аналогию между процессами адсорбции газа на поверхности твердого тела и конденсации пара на поверхности жидкости. Следуя этой аналогии, положим, что параметр P_m определяет скорость адсорбции так же, как давление насыщенных паров определяет скорость конденсации пара. Тогда для параметра P_m применим ряд известных для насыщенного пара соотношений. Зависимость параметра P_m от кривизны поверхности твердого тела выразим формулой Лапласа:

$$P_m(T,R) = P_m^0(T) - 2\sigma(T)/R; \qquad P_m / \rho_a = P_m^0 / \rho_a^0,$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения твердой фазы в газе, $P_m^0(T)$ – параметр, характеризующий адсорбцию на плоской поверхности твердого тела при температуре T, ρ_a^0, ρ_a – соответственно средние плотности адсорбированного газа на плоской и искривленной поверхностях. Температурную зависимость параметра $P_m^0(T)$ представим также как температурную зависимость насыщенных паров. Здесь мы исключаем из рассмотрения частицы с $R < 1$ μm, для которых размерный эффект [12] существенен.

Величина 2δ определяет минимальное расстояние между поверхностями частиц в случае их плотной упаковки. Для нахождения коэффициента теплопроводности адсорбционной оболочки применим выражение $\kappa_0(l)$, в котором к величине газового зазора l следует добавить эквивалентную толщину адсорбированного слоя $l_a = \rho_a \delta / \rho$.

В работе [4] приводятся экспериментальные данные ЭКТ, полученных для упакованных слоев урановых сфер в различных газовых средах при комнатной температуре. Измерения проводились для упаковок с различными диаметрами сфер.

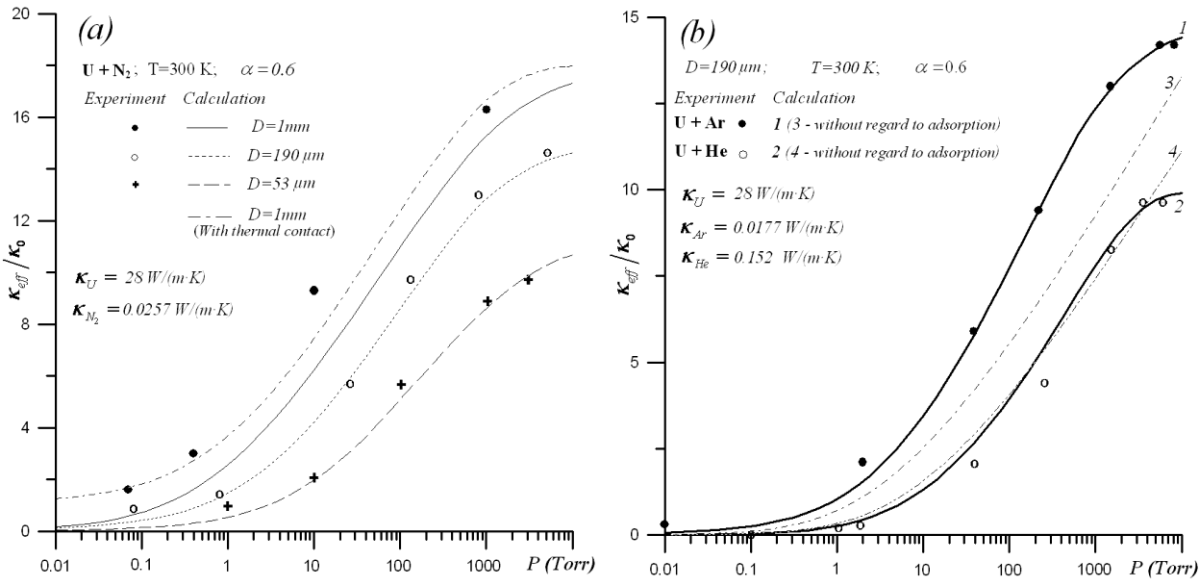


Рис. 2. Зависимость ЭКТ, выраженного в единицах теплопроводности газа, для упакованных слоев урановых сферических частиц в газе от давления. Параметры: a) P_m^0 =130 (KPa), ρ_a^0 =808(kg/m^3), Δ=0,5; b) He: P_m^0 =40 (KPa), ρ_a^0 =40(kg/m^3), Δ=0,9; Ar: P_m^0 =130 (KPa), ρ_a^0 =1200(kg/m^3), Δ=0,55. Маркеры – эксперимент [4]

Представленные на рис. 2 сравнения расчетных и экспериментальных данных демонстрируют удовлетворительное согласие. Наихудшее согласие наблюдается для сферических частиц большого (1mm) диаметра. У частиц с большим диаметром можно допустить наличие теплового контакта конечного размера, например из-за отклонения ее геометрии от сферической. В случае если радиус контакта составляет ~0,02 от радиуса частицы, получаем хорошее согласие результатов расчета и эксперимента.

Как следует из рис. 2b, пренебрежение адсорбцией, во-первых, приводит к монотонному росту эффективной теплопроводности при увеличении давления, что наблюдается в работах [13]. Во-вторых, расчет дает заниженное значение эффективной теплопроводности в сравнении с экспериментом.

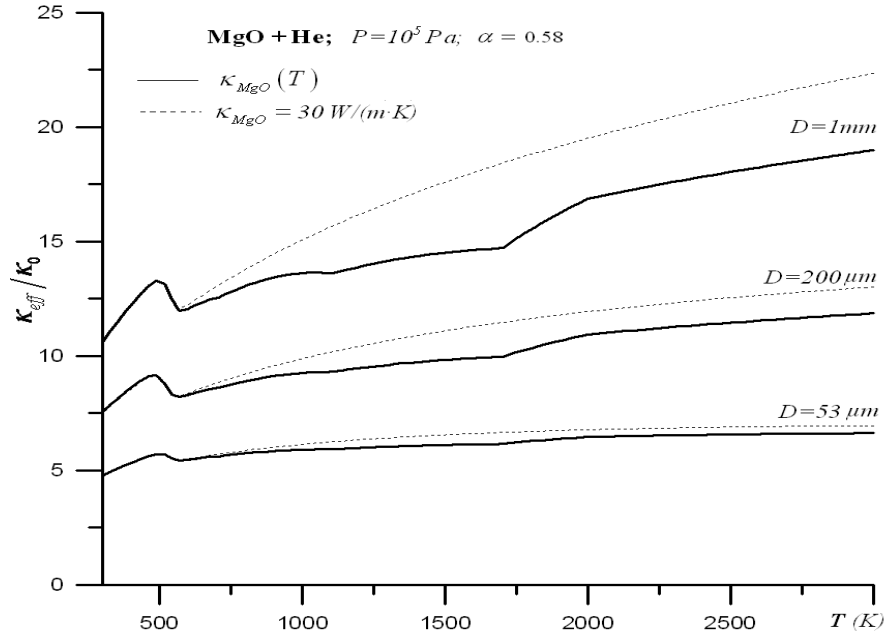


Рис. 3. Зависимость ЭКТ в единицах 0.152 W/(m·K) для упакованных слоев керамических сферических частиц различных размеров в гелии от температуры

На рис. 3 приведены температурные зависимости ЭКТ. Температурные зависимости теплопроводности твердотельной фазы порошковой среды находились из данных [14], температурные зависимости для газовой компоненты – по данным [15]. Из этого рисунка видно, что на начальном этапе нагрева теплопроводность начинает быстро возрастать, главным образом, из-за увеличения теплопроводности газовой атмосферы и адсорбционной оболочки. По мере нагревания среды адсорбционная оболочка разрушается, и дальнейшее поведение теплопроводности определяется температурными зависимостями теплопроводности компонентов среды. Теплопроводность газа с ростом температуры монотонно возрастает. Теплопроводность керамики весьма сложным образом зависит от температуры [14]. Для сравнения на рис. 3 приводятся температурные зависимости ЭКТ при постоянном значении коэффициента теплопроводности керамики.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 13-08-00037) и финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (научно-исследовательская работа ФГБОУ ВПО «ЮУрГУ» (НИУ), проводимая в рамках государственного задания № 1030 (№ 2014105-ГЗ).

Библиографический список

1. Шишковский, И.В. Лазерный синтез функционально-градиентных мезоструктур и объемных изделий / И.В. Шишковский. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2009. – 424 с.

2. Gnyusov, S.F. Structural phase states and heat aging of composite electron-beam clad coatings / S.F. Gnyusov, S.Yu.Tarasov // Surface & Coatings Technology. 2013. 232. Pp. 775–783.

3. Deissler, R.G. An investigation of the effective thermal conductivities of powders in various gases / R.G. Deissler, J.S. Boegli // Trans ASME. 1958. Vol.80. Pp. 1417–1425.

4. Swift, D.L. The thermal conductivity of spherical metal powders including the effect of an oxide coating / D.L. Swift // Int. J.Heat Mass Transfer. 1966. Vol. 9. Pp. 1061–1074.

5. Luikov, A.V. Thermal conductivity of porous systems / A.V. Luikov, A.G. Shashkov, L.L. Vasiliev, Yu.E. Fraiman // Int.J.Heat Mass Transfer. 1968. Vol.11. Pp. 117–140.

6. Hadley, G.R. Thermal conductivity of packed metal powders / G.R. Hadley // Int. J.Heat Mass Transfer. 1986. Vol.29. No.6. Pp. 909–920.

7. Shonnard, D.R. The effective thermal conductivity for a pointcontact porous medium: an experimental study / D.R. Shonnard, S. Whitaker // Inl. J. Hear Mass Transfer. 1989. Vol. 32. No.3. Pp. 503–512.

8. Гусаров, А.В. Эффективная теплопроводность свободно насыпанных и слабоспеченных порошков. I. Модель / А.В. Гусаров, Е.П. Ковалев // ФХОМ. – 2009. – № 1.– С. 70–82.

9. Bruggeman, D.A. Berechnung verschiedener physikalischer konstanten von heterogenen substanzen / D.A. Bruggeman // Ann.Phys. 1935. Vol.24. Pp. 636–679.

10. Landauer, R. The electrical resistance of binary metallic mixtures / R. Landauer // Journal of Applied Physics. 1952. V. 23. Pp. 779–784.

11. Карнаухов, А.П. Адсорбция. Текстура дисперсных и пористых материалов / А.П. Карнаухов. – Новосибирск: Наука. Сиб. предприятие РАН, 1999. – 470 с.

12. Оно, С. Молекулярная теория поверхностного натяжения / С. Оно, С. Кондо. – М.: Изд-во иностр. лит., 1963. – С. 42–45.

13. Гусаров, А.В. Эффективная теплопроводность свободно насыпанных и слабоспеченных порошков. II. Анализ экспериментальных фактов / А.В. Гусаров, Е.П. Ковалев // ФХОМ. – 2009. – № 2. – С. 66–71.

14. Физические величины: Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мелихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.

15. Варгафтик, Н.Б. Справочник по теплопроводности жидкостей и газов / Н.Б. Варгафтик, А.П. Филиппов, А.А. Тарзиманов, Е.Е. Тоцкий. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 352 с.

К содержанию

УДК 538.911+ 538.913

ВЫРОЖДЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ПОГРУЖЕННОГО АТОМА НА ПРИМЕРЕ ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ ЖЕЛЕЗА

В.А. Старухин, А.А. Мирзоев

Ранее была показана неоднозначность воспроизведения эффективного парного потенциала по структуре жидкости. В настоящей работе показывается неоднозначность получения потенциала погруженного атома относительно воспроизведения структуры жидкости. Для этого получена серия потенциалов погруженного атома, воспроизводящих с высокой точностью одну и ту же кривую радиального распределения атомов железа при температуре 1833 К.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, молекулярная динамика, эффективный парный потенциал, потенциал погруженного атома, неупорядоченные системы, структура жидкости.

Введение

Для математического моделирования различных веществ, в случае если необходимый размер модели составляет от нескольких сотен атомов или частиц и более, используются два основных метода: метод Монте-Карло (МК) и метод молекулярной динамики (МД). Оба метода предполагают использование эффективных потенциалов, которые представляют собой некоторые функции, определяющие энергию взаимодействия между частицами в зависимости от их взаимного расположения, а в простейшем случае эффективного парного потенциала (ЭПП) – только от расстояния между двумя конкретными атомами.

Задача воспроизведения ЭПП по структуре образца является одной из фундаментальных задач в физике конденсированного состояния, и на сегодняшний день существует большое количество методик ее решения с использованием методов математического моделирования [1]. Причиной такого положения является взаимно-однозначная связь между ЭПП и парной корреляционной функцией (ПКФ). ПКФ представляет собой функцию, равную отношению атомной плотности в сферическом слое на определенном расстоянии от центрального атома к средней плотности во всем образце. Хендерсоном [2] была показана единственность решения задачи по воспроизведению ЭПП, который бы соответствовал заданной ПКФ. Существование такого решения было доказано в работах Чайесов [3]. Однако на практике оказалось, что в зависимости от затравочного потенциала и от других различных параметров расчета можно получать множество потенциалов, существенно отличающихся друг от друга, но которые приводят к почти идентичным ПКФ. При этом не ясен был механизм получения того или иного потенциала, что позволило бы построить методику системного получения потенциала с заданными свойствами. Поэтому добиться принципа единственности решения данной задачи оказалось очень сложно.

Существенным продвижением в решении этой проблемы стало появление работы Д.К. Белащенко [4], в которой он нашел причину такого псевдовырождения ЭПП. Благодаря этому появилась возможность системно получать серию ЭПП для заданной ПКФ, связанных между собой аналитически. Эту методику он назвал гибридизацией ЭПП [4]. В настоящей работе на первом этапе был выполнен расчет серии гибридных ЭПП для жидкого железа по ПКФ с помощью модифицированной нами методики Д.К. Белащенко [5]. В результате вся серия ЭПП была оптимизирована по атомной плотности для данной фазовой точки в NPT-ансамбле (канонический ансамбль, при котором рассматривается система, состоящая из фиксированного числа частиц, при заданном давлении и температуре).

ЭПП является достаточно грубым приближением для описания взаимодействия частиц в веществе. Для моделирования в широком интервале температур или давлений, когда структура системы изменяется значительно, либо в случае моделирования различных локальных особенностей структуры как, например, различных дефектов кристаллической решетки, поверхностей, границ зерен и других случаев, используются более реалистичные эффективные потенциалы. Для моделирования металлов часто используется модель погруженного атома [6]. В настоящей работе гибридные ЭПП использовались для построения на их основе потенциалов погруженного атома (ППА). В итоге был получен ряд ППА, которые также с высокой точностью воспроизводят целевую ПКФ жидкого железа. Кроме этого, ППА были подогнаны таким образом, чтобы воспроизводить также набор основных параметров кристаллического железа.

Получение ППА на основе ЭПП

Идея ППА принадлежит Доу и Баскесу [6]. Потенциальная энергия системы в случае модели ППА складывается из двух составляющих: суммарной энергии парного взаимодействия между всеми парами атомов и суммарной энергии погружения каждого из атомов. Энергия парного взаимодействия определяется ЭПП, а энергия погружения – дополнительной функцией, которая в свою очередь зависит от локальной электронной плотности в точке нахождения определенного атома. Электронная плотность в каждой точке пространства определяется как сумма электронных плотностей от каждого из атомов системы. Для описания электронной плотности отдельного атома вводится еще одна функция, которая одинакова для всех атомов одного сорта. То есть для однокомпонентной системы, как чистое железо, в ППА задается только одна функция электронной плотности. Энергия погружения также в общем случае задается по одной для каждого сорта атомов в системе. В однокомпонентных системах используется, как правило, одна такая функция, за исключением экзотических случаев. Потенциальная энергия системы в модели ППА может быть записана так:

$$U = \frac{1}{2}\sum_{i,j\neq i}^{N}\varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{N}F(\rho_i), \quad (1)$$

$$\rho_i = \sum_{j\neq i}^{N}\psi(r_{ij}). \quad (2)$$

Здесь $\varphi(r)$ – ЭПП, $F(\rho)$ – энергия погружения (ЭП) отдельного атома, $\psi(r_{ij})$ – эффективная электронная плотность отдельного атома (ЭЭП), r_{ij} – расстояние между двумя отдельными атомами, ρ_i – суммарная электронная плотность в точке нахождения -го атома (ЭПА), N – количество атомов в системе.

Модель ППА часто используется именно для металлов, поскольку хорошо согласуется с классическим представлением о металлической связи, согласно которому металл можно представить как совокупность положительно заряженных ионов, представляющих собой ядра атомов с внутренними электронными оболочками, и электронным газом, образованным свободными электронами. Поэтому $\varphi(r)$ можно представлять как кулоновское взаимодействие между ионами, а $F(\rho)$ – как энергию взаимодействия отдельного иона с электронным газом.

Метод получения ППА на основе ЭПП, полученного по ПКФ, принадлежит также Д.К. Белащенко [7]. Согласно его выкладкам ППА можно представить в виде ЭПП, соответствующего средней ЭПА для определенной фазовой точки (т.е. при определенных температуре и давлении), следующим образом:

$$\varphi_{EAM}(r) \approx \varphi(r) + \frac{2\psi(r)\left(dF\left(\langle\rho\rangle\right)\right)}{d\rho}. \quad (3)$$

Здесь $\varphi_{EAM}(r)$ – ППА в форме ЭПП; $\varphi(r)$ – ЭПП, являющийся частью ППА в формуле (5); $\psi(r)$ – ЭЭП; $\frac{dF(\langle\rho\rangle)}{d\rho}$ – производная ЭП, взятая при необходимой средней ЭПА; $\langle\rho\rangle$ – средняя ЭПА. Из [7] следует, что качество такого представления зависит от ширины распределения ЭПА по атомам, то есть чем уже распределение, тем выражение (3) выполняется точнее, и наоборот. В любом случае адекватность приближения (3) можно оценить по результатам проверочных вычислений с полученным ППА. Суть метода Белащенко состоит в том, чтобы взять в качестве $\varphi(r)$ в выражении (1) ЭПП, полученный по ПКФ. В этом случае ППА будет также воспроизводить целевую ПКФ при условии, что производная ЭП в выражении (3) для данной фазовой точки будет равна нулю или иметь достаточно низкое значение. Сам автор метода для достижения этого условия выбирал форму ЭП таким

образом, чтобы ее производная для средней ЭПА заведомо была равна нулю. Оставшиеся функции ЭЭП и ЭП подбираются эмпирически по определенному набору известных параметров моделируемой системы.

В настоящей работе мы немного изменили схему Белащенко. Основное отличие состоит в способе получения ЭП. Для этого мы используем универсальное выражение для энергии связи при абсолютном нуле температуры (УЭС) [8], которое описывает энергию кристалла при абсолютном нуле в зависимости от параметра решетки или объема. УЭС при этом включает в себя два эмпирических параметра системы: равновесный параметр решетки (положение минимума УЭС) и энергию сублимации (значение УЭС в точке минимума). Кроме этого, вторая производная в точке минимума УЭС пропорциональна модулю объемного сжатия при абсолютном нуле температуры.

Схема получения ППА в этом случае выглядит следующим образом. ЭПП мы получаем по известной ПКФ методом, описанным в работе [7]. ЭЭП выбирается в виде спадающей экспоненты:

$$\psi(r) = ae^{(-br)}. \quad (4)$$

Здесь a и b – подгоночные параметры потенциала. Однако в силу инвариантности ППА [12] параметр a не является независимым и выполняет функцию нормировочного множителя для ЭЭП. В данном случае подразумевается следующая пара инвариантных преобразований:

$$\psi'(r) = k\psi(r), \quad (5)$$

$$F'(\rho) = F\left(\frac{\rho}{k}\right), \quad (6)$$

где штрихованные символы – преобразованные функции, k – произвольное число. Для нормировки ППА необходимо выбрать произвольное фиксированное значение средней ЭПА (ρ), которое будет соответствовать выбранной фазовой точке. Чаще всего в качестве такого числа выбирают единицу. Среднюю ЭПА для жидкости можно рассчитать по известной ПКФ [10]:

$$(\rho) = 4\pi n \int_0^\infty \psi(r) g(r) r^2 dr, \quad (7)$$

где n – атомная плотность системы, $g(r)$ – ПКФ. Отсюда, если подставить (4) в (7) и взять $(\rho) = 1$, значение параметра a рассчитывается так:

$$a = \left[4\pi n \int_0^\infty e^{(-br)} g(r) r^2 dr\right]^{-1}. \quad (8)$$

Параметр b мы подбирали по расчетной атомной плотности n_c. В выражении (8) и (7) n – целевая атомная плотность, соответствующая целевой ПКФ, подбор b основывался на достижении согласия между n_c и n.

Для получения ЭП рассчитывается энергия связи кристалла при абсолютном нуле температуры с использованием только парной части ППА $\varphi(r)$ в зависимости от параметра решетки $U_{pair}(a)$. Зная УЭС $U_0(a)$ для данного металла, ЭП в зависимости от параметра решетки $F(a)$ можно рассчитать так (см. 1):

$$F(a) = U_0(a) - U_{pair}(a). \quad (9)$$

Остается только преобразовать полученную функцию, так чтобы она зависела от ЭПА ρ . Для этого необходимо рассчитать зависимость $\rho = \rho(a)$, тогда $F(\rho) = F(a(\rho))$.

Расчет ППА для железа

Целью данной работы было получить серию ППА, воспроизводящих целевую структуру жидкого металла. В качестве объекта моделирования было выбрано железо, как один из наиболее распространенных в техническом плане металлов, являющийся основой для различных сталей. ПКФ жидкого железа при температуре 1833 К взяли из данных *ab initio* МД, выполненных в работе [9]. На основе данной ПКФ выполнили расчет серии ЭПП согласно методике, описанной в работе [5]. На рис. 1, 2 приведены графики полученных ЭПП и соответствующих модельных ПКФ в сравнении с целевой кривой.

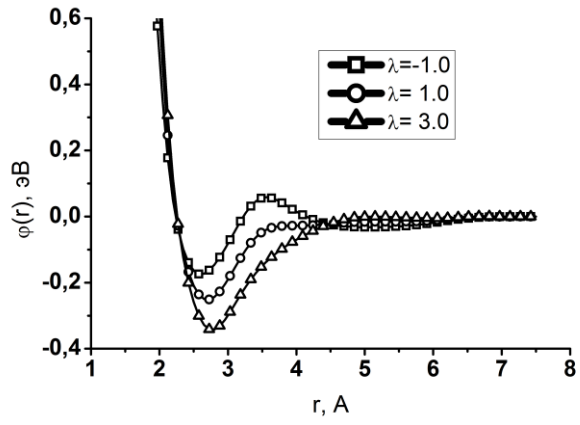


Рис. 1. Серия ЭПП для жидкого железа при $T = 1833$ K. Параметр λ – определяет серию ЭПП

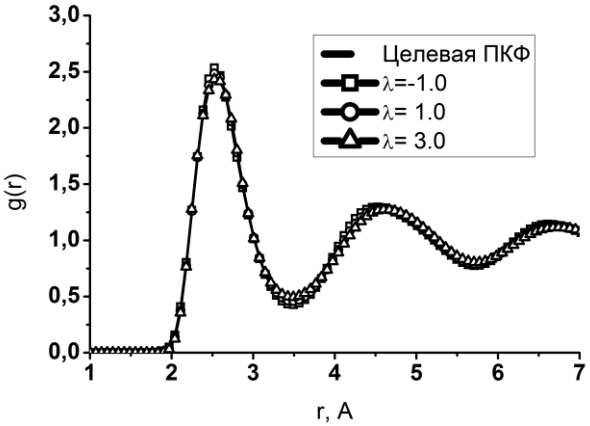


Рис. 2. Модельные ПКФ жидкого железа при $T = 1833$ K, полученные в NPT-ансамбле с помощью различных потенциалов (рис. 1), в сравнении с целевой кривой [9]

Следующим шагом был расчет ППА на основе полученной серии ЭПП. Расчет выполнялся по описанной выше методике. В качестве $\varphi(r)$ брали один из ЭПП, полученных по ПКФ, не внося никаких изменений. После

этого для нескольких значений параметра b ЭЭП (4) выполняли расчет ЭП и производили моделирование железа при $T = 183$ К в NPT-ансамбле с нулевым давлением в баростате, для определения расчетной атомной плотности. В табл. 1 приводятся значения расчетных атомных плотностей n_c в зависимости от выбранного параметра b, для потенциала с параметром $\lambda = 1{,}0$. Экспериментальное значение атомной плотности жидкого железа при температуре 183 К равно $0{,}0756$ Å^{-3} [10]. Из таблицы видно, что наиболее близким является значение . Таким образом определялся параметр b для каждого из потенциалов, получаемой гибридной серии ППА.

Таблица 1

Поиск параметра b по расчетной атомной плотности n_c для потенциала с параметром $\lambda = 1{,}0$

Параметр b, Å^{-1}	Расчетная атомная плотность n_c, Å^{-3}
1,00	0,0769
1,50	0,0763
2,00	0,0757
2,03	0,0756
2,06	0,0755
2,50	0,0750

На рис. 3, 4 приведены графики полученных ЭЭП и ЭП для различных значений параметра λ, соответствующих гибридной серии ППА. Серия ЭПП приведена на рис. 1, эти функции не изменялись. На рис. 5 приведены графики модельных ПКФ, полученных с ППА, в сравнении с целевой кривой из работы [9]. Сравнивая рис. 2 и 5, становится очевидно, что переход от модели парного потенциала к модели ППА не повлиял существенно на характер вырождения по структуре модели. Для количественного сопоставления вырождения ЭПП и ППА на рис. 6 приводится зависимость невязки между целевой и модельными ПКФ от параметра λ. Видно, что зависимость имеет тот же характер с одним минимумом, который остался на том же месте, хотя само значение в случае ППА оказалось даже ниже, чем при ЭПП.

В табл. 2 приводятся основные параметры модели ОЦК (объемно-центрированная кубическая решетка) железа при абсолютном нуле температуры с потенциалом $\lambda = 1{,}0$, в сравнении с экспериментальными или *ab initio* данными. Из таблицы видно, что наиболее оптимальный по невязке (см. рис. 6) ППА достаточно хорошо воспроизводит ОЦК железо при абсолютном нуле.

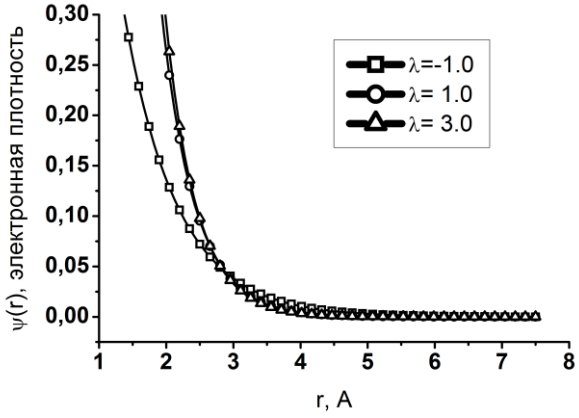


Рис. 3. ЭЭП ППА для различных значений параметра λ

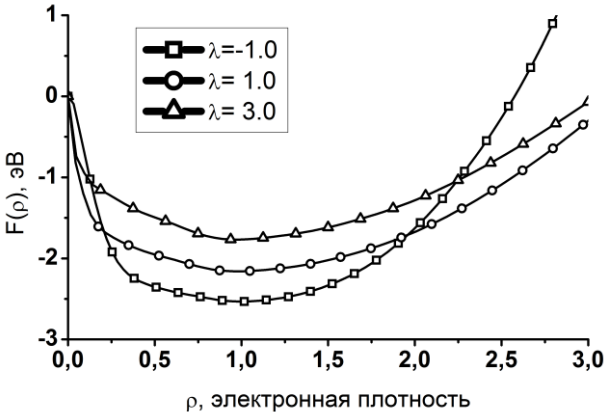


Рис. 4. ЭП ППА для различных значений параметра λ

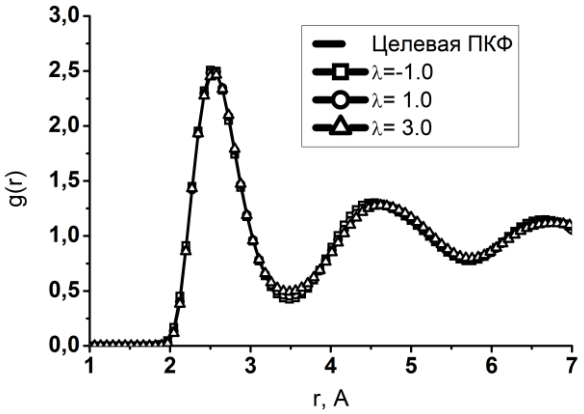


Рис. 5. Модельные ПКФ, полученные в NPT-ансамбле с помощью ППА, соответствующих различным значениям параметра λ, в сравнении с целевой кривой [9]

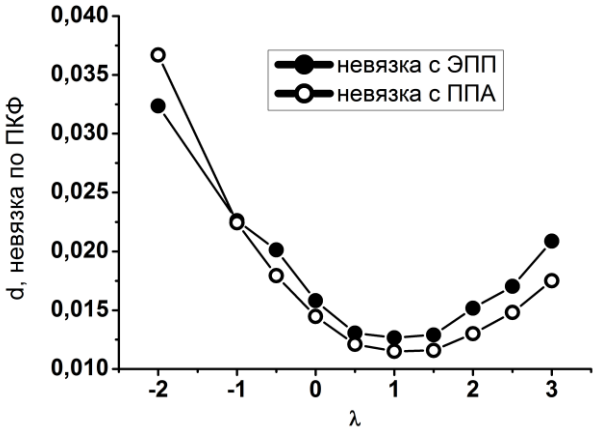


Рис. 6. Невязка по ПКФ между целевой и модельными кривыми, соответствующими ЭПП и ППА для различных значений параметра λ

Таблица 2

Расчетные характеристики ОЦК железа при $T = 0$ К с ППА $\lambda = 1{,}0$

Параметр ОЦК железа, $T = 0$ К	Эксперимент/ *ab initio* [11]	ППА $\lambda = 1{,}0$
a_0, Å (равновесный параметр решетки)	2,8665	2,8671
E_0, эВ/атом (энергия связи)	-4,28	-4,28
C_{11}, ГПа (модуль упругости)	242	252,7
C_{12}, ГПа (модуль упругости)	146,5	161,3
C_{44}, ГПа (модуль упругости)	112	110,9
E_v, эВ (энергия образования вакансии)	2,00	1,63
E_{vm}, эВ (энергия миграции вакансии)	0,66	0,45
$E_s(100)$, эВ/Å^2 (энергия образования поверхности)	0,136	0,153

Заключение

Результатом работы стала серия гибридных ППА, воспроизводящих с высокой точностью одну и ту же структуру жидкого железа при $T = 183$з К. Кроме этого, полученные ППА неплохо воспроизводят кристаллическое железо. Таким образом, было показано вырождение ППА по ПКФ, подобно тому, которое было продемонстрировано в работах [6, 7] для ЭПП.

Библиографический список

1. Toth, G. Interactions from diffraction data: historical and comprehensive overview of simulation assisted methods / G. Toth // J. Phys.: Condens. Matter. 2007. V. 19. Pp. 1–18.

2. Henderson, R.L. A uniqueness theorem for fluid pair correlation functions / R.L. Henderson // Phys. Lett. A. 1974. V. 49. Pp. 197–198.

3. Chayes, J.T. On the validity of the inverse conjecture in classical density functional theory / J.T. Chayes, L. Chayes // J. Stat. Physics. 1984. V. 36. Pp. 471–488.

4. Belashchenko, D.K. Families of Intermolecular Potentials Corresponding to Identical Structure of Noncrystalline Substances in the Method of Molecular Dynamics/ D.K. Belashchenko // Russian J. Phys. Chem. 2004. V. 78. № 9. Pp. 1621–1628.

5. Starukhin, V.A. Application of the Schommers Method for Constructing a Hybrid Pair Potential / V.A Starukhin, D.K. Belashchenko, A.A. Mirzoev, A.G.Vorontsov // Russian Mettalurgy (Metally). V. 2012. № 8. Pp. 705–712.

6. Daw, M.S. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M.S. Daw, M.I. Baskes // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. № 12. Pp. 6443–6453.

7. Belashchenko, D.K. Embedded Atom Model for Liquid Metals: Liquid Iron / D.K. Belashchenko // Russian J. Phys. Chem. 2006. V. 80. № 5. Pp. 758–768.

8. Rose, J.H. Universal features of the equation of states of metals / J.H. Rose, J.R. Smith, F. Guinea, J. Ferrante // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. № 6. Pp. 2963–2969.

9. Соболев, А.Н. Структура и свойства жидкого железа: первопринципное компьютерное моделирование / А.Н. Соболев, А.А. Мирзоев // Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы. – 2009. – С. 1–4.

10. Waseda, Y. The structure of Non-crystalline Materials. Liquids and Amorphous Solids / Y. Waseda. – New York: McGraw-Hill, 1980. – 325 p.

11. Chamati, H. / Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe(100) / H. Chamati, N.I. Papanicolaou, Y. Mishin, D.A. Papaconstantopoulos // Surface Scince. 2006. V. 600. Pp. 1793–1803.

К содержанию

УДК 517.972.5 + 62-251 + 621.438

РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ОЦЕНКА СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ ВЫСОКООБОРОТНОГО РОТОРА МИКРОГАЗОТУРБИННОЙ УСТАНОВКИ

П.А. Тараненко, Н.С. Пирогова

Статья посвящена анализу собственных частот и форм ротора микрогазотурбинной установки. Такая оценка получена расчетом – методом конечных элементов – и экспериментальным путем с применением LMS технологии модального анализа, используемой в пакете LMS Test. Lab (Siemens PLM Software). Проведено исследование собственных частот ротора при различных жесткостях опор. Даны рекомендации по конструкции ротора, позволяющие увести его собственные частоты из недопустимой области.

Ключевые слова: микрогазотурбинная установка; собственная частота; собственная форма; метод конечных элементов.

Микрогазотурбинная энергоустановка (МГТУ) предназначена для выработки и децентрализованного снабжения внешних потребителей электрической энергией с номинальной мощностью 100 кВт и тепловой мощностью 200 кВт.

Микрогазотурбинные установки малой мощности используют на промышленных предприятиях, в медицинских учреждениях, жилищных коттеджных поселках, на магистральных газопроводах, нефтепроводах, газораспределительных станциях; в энергодефицитных районах Крайнего Севера, Сибири, Дальнего Востока; для резервирования линий электропередач, питающих ответственных потребителей энергии, для восполнение дефицита электроэнергии, вызванного стихийными бедствиями и другими чрезвычайными ситуациями; в качестве мобильных источников электрической и тепловой энергии для нужд МЧС.

Наиболее ответственной частью МГТУ является ротор, рабочая частота которого составляет 65 000 об/мин. Он состоит из ротора турбокомпрессора (ТК) и ротора стартер-генератора (СГ), соединенных упругой связью (рис. 1). Одним из требований, предъявляемых к высокооборотному ротору, является исключение попадания его собственных частот в диапазон ±30 % от рабочей частоты вращения (45 500–84 500 об/мин).

Таким образом, возникает задача разработки ротора, обладающего собственными частотами, которые не попадают в запретную область, оговоренную выше. Аналогичной проблеме посвящены работы [1, 2].

Решение задачи выполнено в несколько этапов.

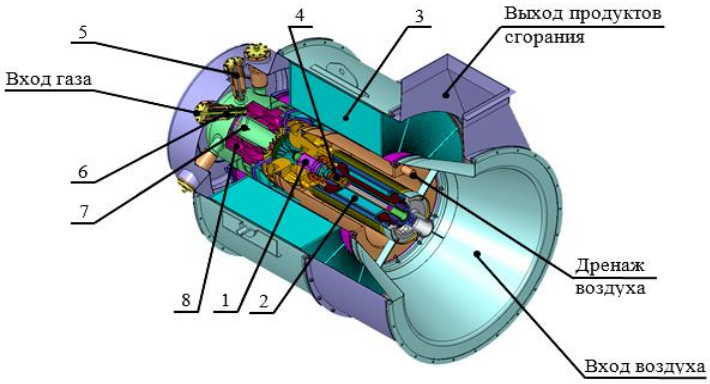
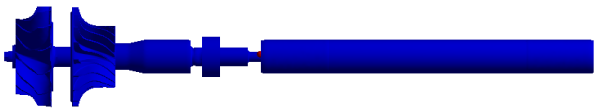
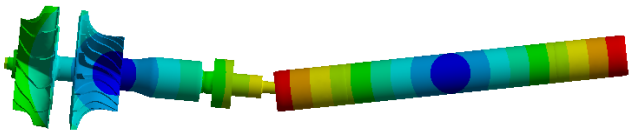
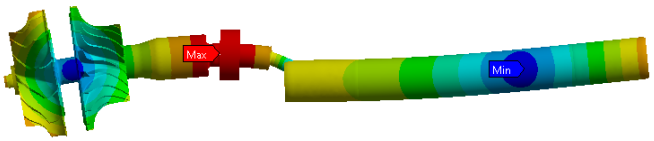
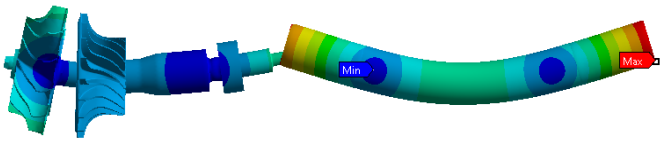
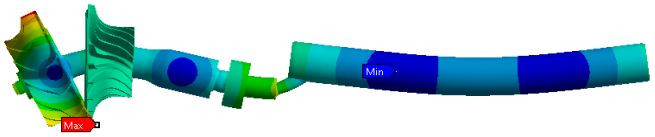


Рис. 1. Основные элементы МГТУ: 1 – турбокомпрессор;
2 – стартер-генератор высокооборотный; 3 – рекуператор кольцевой;
4 – упругий торсион; 5 – свеча зажигания; 6 – инжектор;
7 – термопара; 8 – камера сгорания

Первый этап заключался в приближенной оценке собственных частот и форм ротора МГТУ методом конечных элементов (КЭ) в пакете Ansys Workbench. Предполагалось, что все элементы ротора абсолютно жестко связаны друг с другом. Ротор считался не закрепленным. Найдены собственные частоты изгибных колебаний ротора в диапазоне частот от 0 до 120000 об/мин (2000 Гц). Результаты расчета приведены в табл. 1.

Таблица 1

Результаты расчета собственных частот и форм ротора МГТУ
при его поперечных колебаниях

№ собственной формы	Форма колебаний на собственной частоте	Собственная частота
1–4		0 Гц (0 об/мин)
7		78,2 Гц (4692 об/мин)
8		86,6 Гц (5196 об/мин)
11		488,7 Гц (29 322 об/мин)
12		498,5 Гц (29 910 об/мин)
14		1165 Гц (69 900 об/мин)
17		1453 Гц (87 180 об/мин)
15		1302 Гц (78 120 об/мин)
16		1378 Гц (82 680 об/мин)

Первые шесть собственных частот соответствуют колебаниям ротора как твердого тела. Седьмой и восьмой частотам соответствуют колебания ротора турбокомпрессора и ротора стартер-генератора как абсолютно твердых тел, связанных упругим торсионом с малой изгибной жесткостью (первая изгибная форма всего ротора).

Второй изгибной форме ротора соответствуют 11 и 12 собственные частоты (колебания в двух взаимно перпендикулярных плоскостях). Третья изгибная собственная форма ротора соответствует частотам 1165 Гц и 1453 Гц. Эта форма определяется, в первую очередь, параметрами ротора стартер-генератора. Четвертая изгибная форма ротора соответствует частотам 1302 Гц и 1378 Гц. На этой форме преимущественно колеблется ротор турбокомпрессора.

На втором этапе собственные частоты роторов ТК и СГ оценены по отдельности. Основные элементы ротора ТК представлены на рис. 2. Конструкция ротора СГ изображена на рис. 3.

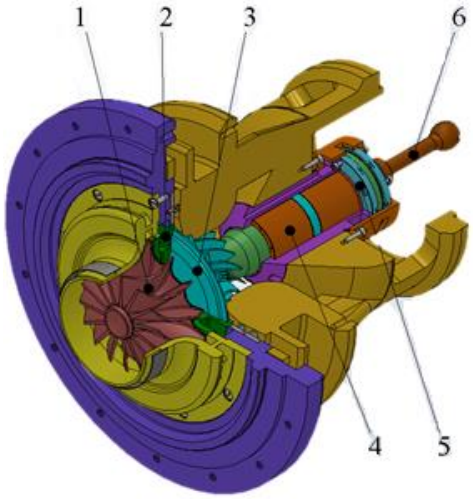


Рис. 2. Основные элементы ротора ТК: 1 – колесо центростремительной турбины; 2 – газовое уплотнение; 3 – колесо центробежного компрессора; 4 – радиальный газодинамический подшипник; 5 – торцевой газодинамический подшипник; 6 – торсион

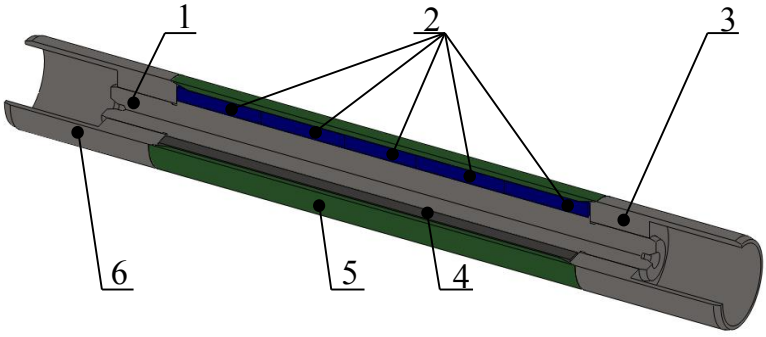
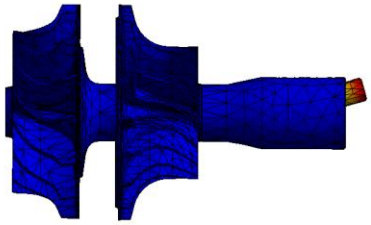
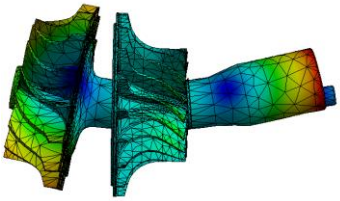


Рис. 3. Основные элементы ротора СГ: 1 – вал; 2 – магниты; 3, 6 – втулки; 4 – вставки (2 шт.); 5 – углелента

Оценка собственных частот роторов ТК и СГ выполнена методом КЭ. Значения частот и соответствующие им формы представлены в табл. 2 и 3.

Таблица 2

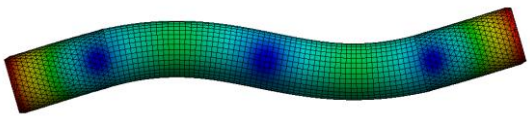
Результаты расчета собственных частот и изгибных форм ротора ТК

 870 Гц (52 200 об/мин) 873 Гц (52 380 об/мин)	 2228 Гц (133 680 об/мин) 2229 Гц (133 740 об/мин)

Первой изгибной частоте соответствуют колебания элемента ротора ТК. Эта форма не является опасной. Наибольший интерес представляет вторая форма изгибных колебаний ротора ТК (табл. 2). Однако соответствующая ей частота 133 680 об/мин расположена далеко за пределами диапазона 45 500–84 500 об/мин. Таким образом, ротор ТК обладает достаточно высокой изгибной жесткостью.

Таблица 3

Результаты расчета собственных частот и форм ротора СГ

Собственная форма	Собственная частота
	1023 Гц (61 380 об/мин)
	1024 Гц (61 440 об/мин)
	2437 Гц (146 220 об/мин)
	2438 Гц (146 280 об/мин)

Первая собственная частота, соответствующая изгибным колебаниям ротора СГ и найденная расчетным путем, составила 1023 Гц (табл. 3) и оказалась недопустимо близкой к рабочей частоте вращения.

На третьем этапе работы выполнена экспериментальная оценка собственных частоты и формы ротора СГ. В эксперименте ротор вывешивали на податливых тросах (рис. 4). Как показали предварительные эксперименты, частота колебаний ротора как твердого тела на упругой подвеске составила около 9,4 Гц (при первой частоте изгибных колебаний 672 Гц). Такая подвеска является податливой и практически не оказывает влияния на собственные частоты и формы ротора при его изгибных колебаниях. С целью определения частот и форм изгибных колебаний, на внешней поверхности ротора наклеены десять однокомпонентных акселерометров. Возбуж-

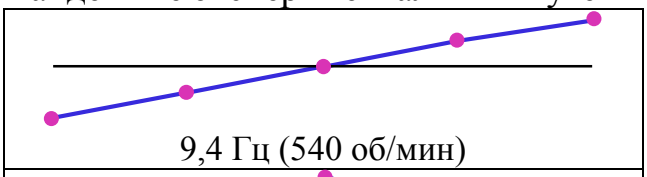
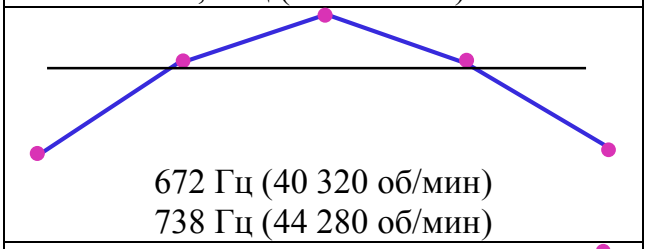
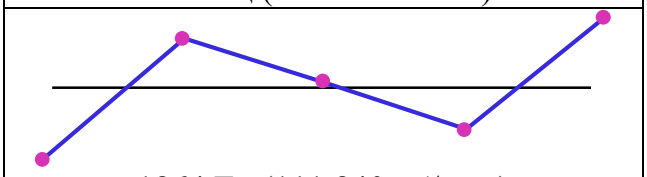
дение колебаний осуществлялось при помощи ударного молотка. Испытания проведены в модуле Impact Testing пакета LMS Test.Lab 13A с использованием технологии модального анализа [3]. Внешний вид установки показан на рис. 4. Результаты эксперимента представлены в табл. 4.

Рис. 4. Экспериментальная установка: 1 – однокомпонентные акселерометры (10шт.); 2 – податливые тросы (4 шт.)

В результате численного определения собственных частот и форм ротора СГ и экспериментальной проверки установлено, что результаты расчета отличаются от эксперимента на 30 %.

Таблица 4

Собственные частоты и формы изгибных колебаний ротора СГ, найденные экспериментальным путем

	9,4 Гц (540 об/мин)
	672 Гц (40 320 об/мин) 738 Гц (44 280 об/мин)
	1864 Гц (111 840 об/мин) 1989 Гц (119 340 об/мин)

Выдвинуто предположение о том, что одной из возможных причин такого недопустимого различия являются условия сопряжения магнитов и стального вала. Для подтверждения этой гипотезы выполнена серия расчетов методом КЭ при условии, что магниты абсолютно жестко прилегают только к углеленте, не соединены друг с другом и с валом. Результаты расчета представлены в табл. 5.

В изготовленной конструкции реальные условия сопряжения магнитов и вала находятся между двумя предельными случаями – когда магниты соединены с валом по всей цилиндрической поверхности, и когда магниты не связаны с валом, но жестко прилегают к углеленте. Таким образом, собственная частота изготовленного ротора стартер-генератора, полученная экспериментальным путем, является достоверной и составляет 672 Гц (40 320 об/мин) в вертикальной и 738 Гц

(44 280 об/мин) в горизонтальной плоскости. Результаты определения собственных частот и форм ротора стартер-генератора приведены в табл. 6.

По результатам анализа (табл. 6) принято решение построить эквивалентную модель ротора стартер-генератора, собственные частоты и формы которой будут близки к результатам эксперимента.

Такая модель построена по критериям равенства масс, длин и первых собственных частот изгибных колебаний. Результаты расчета собственных частот эквивалентного ротора приведены на рис. 5 и в табл. 7.

Таблица 5

Собственных частот и форм корректированной модели ротора СГ

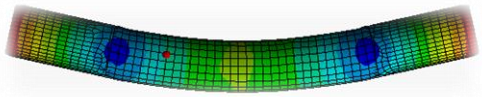
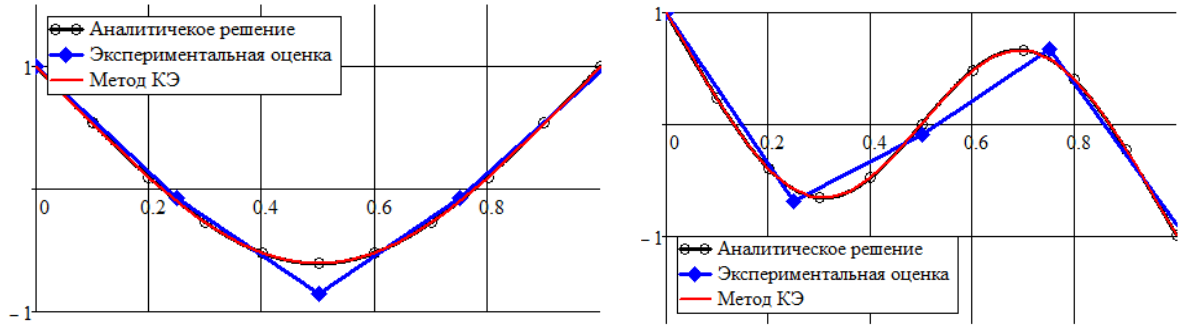
Форма колебаний на собственной частоте	Собственная частота
	612 Гц (36 720 об/мин) 631 Гц (37 860 об/мин)

Таблица 6

Первая собственная частота изгибных колебаний ротора стартер-генератора

Численное определение («жесткий контакт элементов ротора)	Экспериментальный модальный анализ	Уточненный расчет («мягкий» контакт элементов ротора)
1023 Гц	672 Гц	612 Гц
1024 Гц	738 Гц	631 Гц



а) б)

Рис. 5. Сравнение собственных форм ротора СГ, полученных аналитически, экспериментально и методом КЭ: а) – первая изгибная собственная форма; б) – вторая изгибная собственная форма

Таким образом, построена эквивалентная модель ротора СГ, у которой близки к эксперименту оказались не только первая, но и вторая собственные частоты и формы изгибных колебаний.

Таблица 7

Сравнение собственных частот эквивалентной модели ротора СГ

Собственная частота, Гц		
Эквивалентный ротор СГ	Эксперимент	Метод КЭ
738	738	727
2040	1989	1963

Следующий этап работы заключался в определении влияния жесткостей подшипниковых опор ротора МГТУ. С этой целью в КЭ пакете Ansys Mechanical APDL создана упрощенная балочная модель ротора (рис. 6) и выполнен расчет собственных частот ротора в широком диапазоне жесткостей опор.

Как показал расчет (рис. 7), при жесткостях опор меньших, чем 10^6 Н/м, упругие опоры практически не оказывают влияния на собственные частоты и формы ротора, т.е. его можно считать не закрепленным.

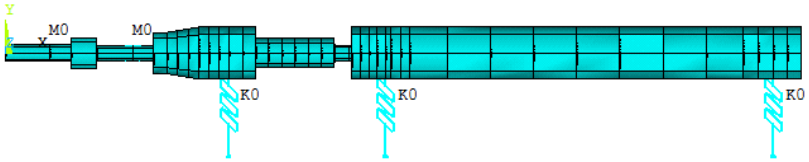


Рис. 6. Балочная модель ротора МГТУ

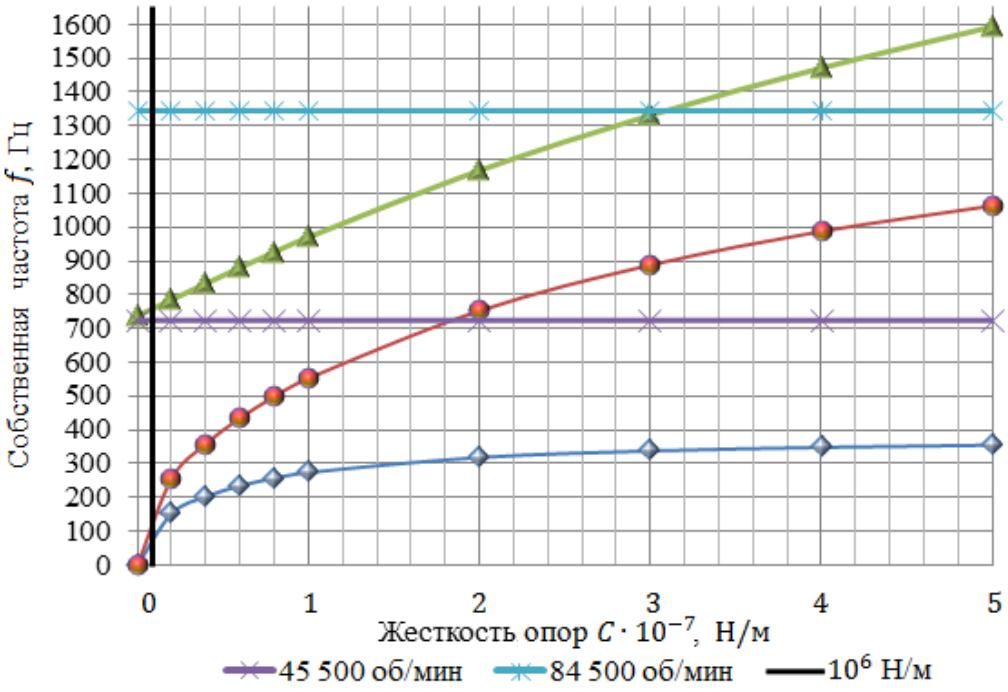


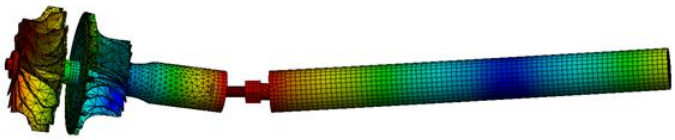
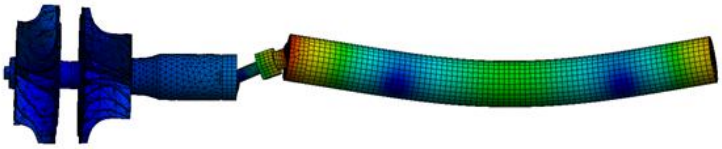
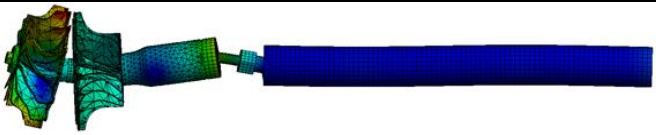
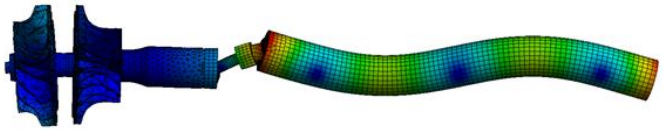
Рис. 7. Зависимость собственных частот ротора от жесткостей опор

На следующем этапе работы выполнен расчет собственных частот ротора МГТУ в условиях свободного вывешивания (что соответствует подшипниковым опорам с жесткостями меньшими, чем 10^6 Н/м), с учетом эквивалентной модели ротора СГ и при различных конструктивных исполнениях элемента связи между ротором стартер-генератора и ротора турбокомпрессора. Результаты расчета конструкции ротора МГТУ, собственные частоты которой расположены в допустимом диапазоне оборотов, приведены в таблице 8.

Таким образом, на основе расчетно-экспериментального подхода разработаны рекомендации для конструкции ротора МГТУ: жесткости подшипниковых опор не должны превышать 10^6 Н/м; ротор турбокомпрессора и ротор стартер-генератора должны быть связаны упругим элементом с малой изгибной жесткостью; найдено конструктивное исполнение такого элемента, при котором собственные частоты ротора оказываются вне диапазона ±30% от рабочей частоты вращения (45 500–84 500 об/мин).

Таблица 8

Собственные частоты и формы ротора МГТУ

Форма колебаний на собственной частоте	Собственная частота
 Первая изгибная форма ротора МГТУ	51,324 Гц (3079,44 об/мин) 52,158 Гц (3129,48 об/мин)
Вторая изгибная форма ротора МГТУ	307,56 Гц (18 453 об/мин) 308,87 Гц (18 532 об/мин)
 Третья изгибная форма ротора МГТУ	729,72 Гц (43 783 об/мин) 730,31 Гц (43 818 об/мин)
 Четвертая изгибная форма ротора МГТУ	1496,8 Гц (89 808 об/мин) 1497,7 Гц (89 862 об/мин)
 Пятая изгибная форма ротора МГТУ	1766,6 Гц (105 996 об/мин) 1766,9 Гц (106 014 об/мин)

Работа выполнялась при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках проекта «Создание производства модельного ряда микротурбинных энергоустановок нового поколения» по договору № 02.G25.31.0078 от 23.05.2013 г.

Библиографический список

1. Lee, Y.-B. Rotordynamic performance measurement of an oil-free turbocompressor supported on gas foil bearings / Y.-B. Lee, S.-B. Cho, T.-Y. Kim, C.H. Kim, T.H. Kim // The 8th IFToMM International Conference on Rotor Dynamics (September 12–15, 2010, Korea). 2010. Pp. 420–426.
2. Kim, K.-S. Rotordynamic characteristics of 65kw micro turbine with compliant air foil bearings / K.-S. Kim, B.-C. Cho, M.-H. Kim // The 8th IFToMM International Conference on Rotor Dynamics (September 12–15, 2010, Korea). 2010. Pp. 799–803.
3. Хейлен, В. Модальный анализ: теория и испытания / В. Хейлен, С. Ламенс, П. Сас. – М.: Новатест, 2010. – 319 с.

К содержанию

УДК 534.1:625.46 + 625.46.001.2

МЕТОДИКА РАСЧЕТНОЙ ОЦЕНКИ ПЛАВНОСТИ ХОДА СОЧЛЕНЕННОГО ТРАМВАЙНОГО ВАГОНА НА РАННИХ СТАДИЯХ ПРОЕКТИРОВАНИЯ

П.А. Тараненко, Д.В. Телегин

Статья посвящена разработке методики оценки плавности хода нового сочлененного трамвайного вагона. Предлагаемая в статье методика разрабатывается на основе расчетного подхода – построения дискретной модели трамвайного вагона и применения современных средств имитационного моделирования (Siemens PLM Software – LMS Imagine.Lab). Разрабатываемая методика предназначена для оценки плавности хода на ранних стадиях проектирования.

Ключевые слова: трамвайный вагон; передаточная функция; плавность хода; виброкомфорт.

Введение

Современные тенденции развития транспорта диктуют новые стандарты качества перевозки пассажиров, в том числе и на городском электротранспорте.

В настоящее время одним из востребованных видов городского транспорта является трамвай. Он выполняет важную функцию и является неотъемлемой частью инфраструктуры города.

В крупных городах возникает проблема транспортной мобильности населения. Ее решением может стать появление скоростного низкопольного трамвая.

При разработке новых трамвайных вагонов необходимо обеспечить конкурентоспособность отечественной продукции на внутреннем и внешнем рынке по сравнению с современными иностранными аналогами, обеспечить энергоэффективность новых конструкций с одновременным обеспечением интенсивности и комфорта перевозок и оптимизацией массогабаритных параметров вагона. Этим требованием удается удовлетворить только в том случае, если новый трамвай, в первую очередь, будет обладать низким уровнем пола и модульной конструкцией. В этом случае создание нового низкопольного сочлененного трамвайного вагона оказывается экономически выгодным.

В рамках комплексного проекта по созданию высокотехнологичного производства теме «Создание высокотехнологичного производства модельного ряда инновационных энергосберегающих трамвайных вагонов модульной конструкции для развития городских пассажирских транспортных систем» разрабатывается модельный ряд трамвайных вагонов.

Новый трамвайный вагон должен удовлетворять «Нормам для расчета и проектирования механической части новых вагонов трамвая колеи 1524 мм» [1], ГОСТ 8802–78 [2], ГОСТ 27364–87 [3] и, в частности, нормативным требованиям по вибрации и плавности хода [1, 4, 5].

Кроме того, новый трамвайный вагон предлагается строить по модульному типу, получая варианты конструкций длиной от 25 до 36 м и составляющие от 3 до 5 секций. При таком разнообразии конструкций крайне необходимо еще на этапе разработки оценить динамические свойства не только базовой конструкции но и ее нескольких модификаций. Создание полностью низкопольных трамвайных вагонов в России пока еще находится на ранних стадиях развития. Соответственно остаются открытыми и вопросы динамической нагруженности низкопольных трамвайных вагонов. В таких условиях представляется весьма эффективным применение пакета имитационного моделирования Siemens LMS Imagine.Lab к построению дискретной модели трамвая, проведению на ее основе виртуальных ходовых испытаний, оценке плавности хода и решению задачи виброкомфорта.

На уровень динамической нагруженности трамвайного вагона оказывают влияние следующие факторы: неровности путей, упругодемпфирующие характеристики грунта; модель взаимодействия колесо-рельс; уровень загрузки пассажирами; величина скорости; режим движения (разгон, торможение, поворот). На наш взгляд, рациональным представляется оценка влияния на динамическую нагруженность трамвая каждого из этих факторов по отдельности. Поэтому здесь основное внимание уделено влиянию неровностей рельсового полотна.

Основные цели статьи:

1) разработать упрощенную дискретную модель трамвая с малым количеством степеней свободы;

2) разработать методику оценки влияния случайных неровностей рельсового полотна на вибронагруженность пассажиров и водителя трамвайного вагона при движении с постоянной скоростью.

Для оценки уровня вибронагруженности на ранних стадиях проектирования используется модель трамвая в виде сборки из абсолютно твердых тел. Существуют различные способы построения такой модели. Разработчики конечноэлементных пакетов, в частности Ansys, MSC, Siemens в настоящее время идут по пути создания междисциплинарных комплексов программ, которые охватывают статические, динамические, усталостные, гидродинамичекие и тепловые расчеты. Преимуществом такого подхода является возможность его использования на ранних стадиях проектирования, когда еще нет детально проработанной геометрической модели, а уже необходимо удовлетворить нормативным требованиям по вибронагруженности трамвайного вагона. Поэтому в статье в качестве расчетного программного обеспечения решено использовать пакет Siemens LMS Imagine.Lab.

1. Модель трамвайного вагона

На рис. 1 изображен сочлененный низкопольный трамвайный вагон. На рис. 2 – его динамическая модель, а на рис. 3 – динамическая модель трамвая, построенная в виде функциональной блок-схемы в пакете LMS Imagine.Lab (Siemens PLM Software).

2. Плавность хода

Согласно «Нормам для расчета и проектирования механической части новых вагонов трамвая колеи 1524 мм» [1] ходовые качества вагона оценивают по следующим допускаемым значениям:

– показателям плавности хода;

– коэффициентам вертикальной и горизонтальной динамики.

Показатель плавности хода определяют выражением [4, 5]

$$W_{cp} = \alpha_0 \cdot a_k^{0,3}, \quad (1)$$

где α_0 =4,346 – для вибрации, действующей в вертикальном направлении, α_0 =4,676 – для вибрации, действующей в горизонтальном поперечном направлении, a_k – среднее квадратическое значение (далее СКЗ) виброускорений, м/с^2.

Рис. 1. Сочлененный низкопольный трамвайный вагон

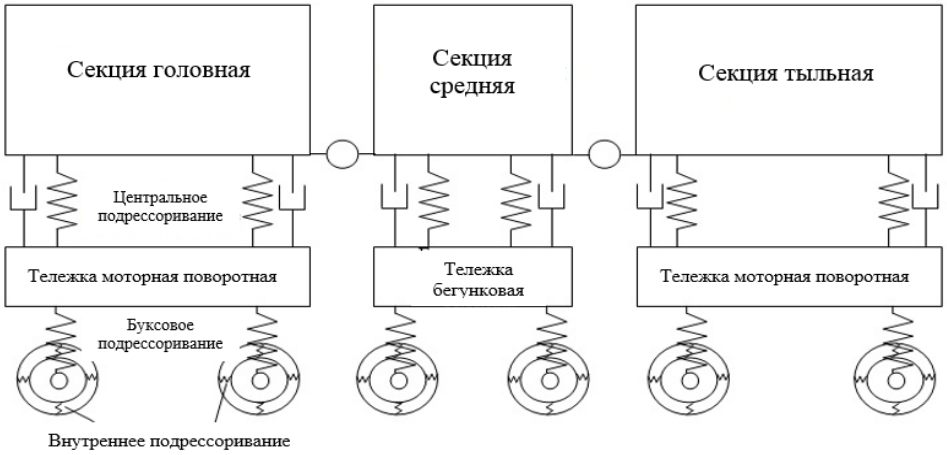


Рис. 2. Динамическая модель трамвая

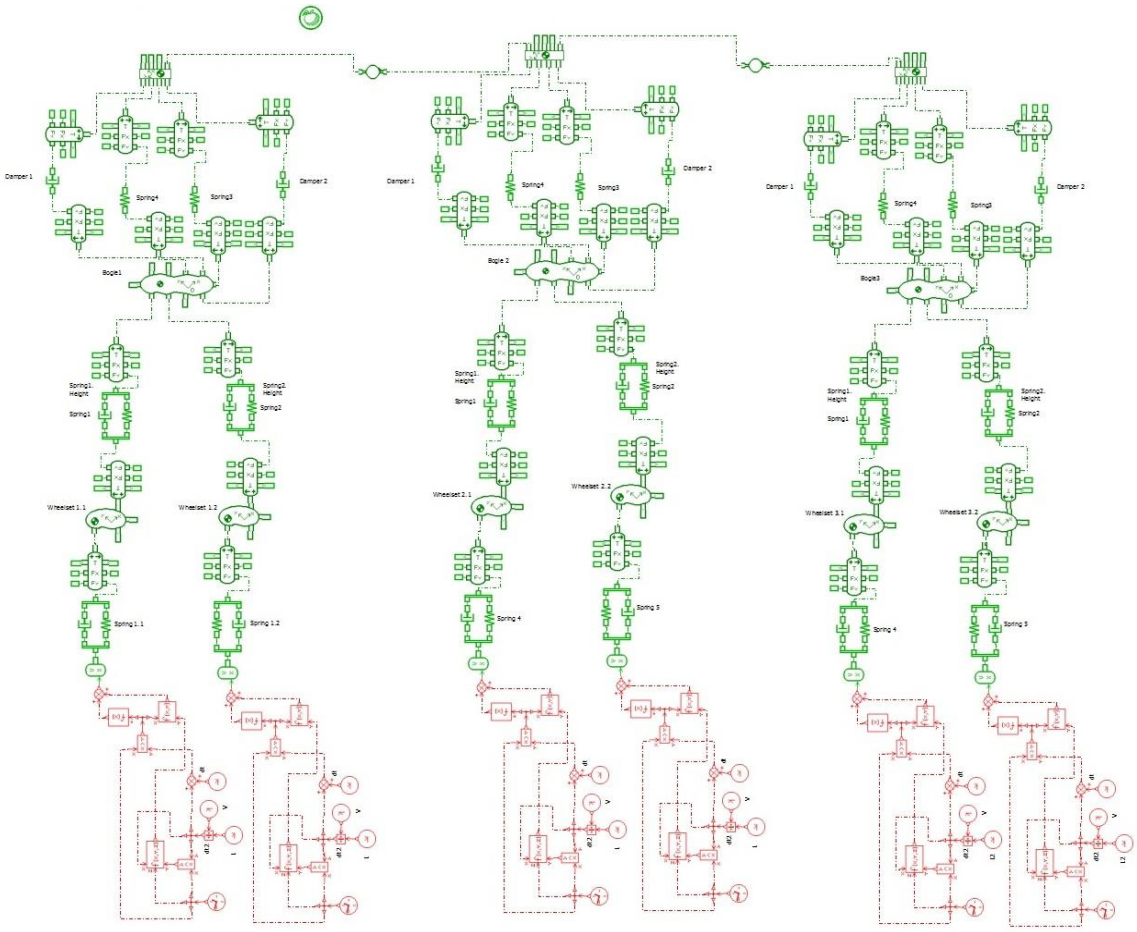


Рис. 3. Функциональная блок-схема трамвайного вагона

СКЗ виброускорений можно получить по формуле [4]:

$$a_к = \sqrt{2\int_{f_H}^{f_B} q_H^2(f) S_{\ddot{y}}(f) df}, м \cdot с^{-2}, \quad (2)$$

где f_H=0,5 Гц – значение нижней граничной частоты диапазона измерения показателя плавности хода;

f_B=20 Гц – значение верхней граничной частоты диапазона измерения показателя плавности хода;

S(f) – функция спектральной плотности виброускорений отклика;

$q_H(f)$ – значение нормированной АЧХ корректирующего фильтра определяется по формуле (3):

$$q_H(f) = 1{,}15 f \sqrt{\frac{1+0{,}1f^2}{(1+4{,}04f^2)((1-0{,}0364f^2)^2+0{,}045f^2)}}, \quad (3)$$

Спектральная функция виброускорений отклика [6]

$$S_{\ddot{y}}(\omega) = \omega^4 \cdot S_y(\omega). \quad (4)$$

Спектральная плотность виброперемещений отклика:

$$S_y(\omega) = |W_{y/h}(i\cdot\omega)|^2 \cdot S_h(\omega). \quad (5)$$

где $W_{y/h}(i\cdot\omega)$ – передаточная функция, $S_h(\omega)$ – функция спектральной плотности вынуждающего воздействия.

Измерять виброускорения необходимо в вертикальном и горизонтальном (поперечном) направлениях на полу кузова в зоне обоих пятников. При необходимости производится измерение виброускорений в других точках кузова вагона, например, на полу в середине кузова [4, 6.2]. Длина пути для трамваев должна составлять не менее 5 километров. Средние значения показателей плавности хода при движении вагона с номинальной массой пассажиров при любой скорости должны быть не более 3,5:

$$\begin{matrix} W_{cpB} \le 3{,}5 \\ W_{cpГ} \le 3{,}5 \end{matrix}. \quad (6)$$

3. Передаточные функции

Алгоритм получения передаточных функций рассмотрим на простейшей модели вагона (рис. 2). Были приняты следующие допущения:

– возмущения одинаковы для левого и правого рельсов;

– кузов секции вагона абсолютно жесткий.

Основной особенностью транспортных систем такого типа является то, что одну и туже неровность все колеса проходят с разницей во времени, определяемой расстоянием между колесами и скоростью движения вагона. Но несмотря на несколько осей, система все равно является системой с одним входом. На трамвайный вагон действуют одни и те же случайные неровности рельсового полотна, но сдвинутые по времени друг относительно друга.

Уравнения движения вагона:

$$\begin{cases} m\cdot\ddot{y} + k\cdot(2\cdot\dot{y} - \dot{h}_1 - \dot{h}_1) + C\cdot(2\cdot y - h_1 - h_2) = 0 \\ J\cdot\ddot{\varphi} + k\cdot l\cdot(2\cdot\dot{\varphi}\cdot l + \dot{h}_1 - \dot{h}_1) + C\cdot l\cdot(2\cdot\varphi\cdot l + h_1 - h_2) = 0 \end{cases}. \quad (7)$$

Воспользуемся операторным методом и заменим $d/dt = p$, $d^2/dt^2 = p^2$. Произведем замену p=i·ω, преобразуем систему и перенесем слагаемые, связанные с возбуждением в правую часть:

$$\begin{cases} y \cdot (-m \cdot \omega^2 + 2 \cdot k \cdot \mathrm{i} \cdot \omega + 2 \cdot C) = (k \cdot \mathrm{i} \cdot \omega + C) \cdot (h_1 + h_2) \\ \varphi \cdot (-J \cdot \omega^2 + 2 \cdot k \cdot \mathrm{i} \cdot \omega \cdot l^2 + 2 \cdot C \cdot l^2) = (k \cdot \mathrm{i} \cdot \omega + C) \cdot l \cdot (h_2 - h_1) \end{cases}.$$

Полученную систему алгебраических уравнений удобно представить в матричном виде.

$$(-[M] \cdot \omega^2 + [K] \cdot i \cdot \omega + [C]) \cdot \{q\} = \{P\}, \quad (8)$$

где *[M]* – матрица инерции, *[K]* – матрица демпфирования, *[C]* – матрица жесткости, *{q}* – вектор обобщенных координат, *{P}* – вектор вынуждающего воздействия.

Для данной системы:

$$[M] = \begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & J \end{pmatrix}, \; [K] = \begin{pmatrix} 2 \cdot k & 0 \\ 0 & 2 \cdot k \cdot l^2 \end{pmatrix}, \; [C] = \begin{pmatrix} 2 \cdot C & 0 \\ 0 & 2 \cdot C \cdot l^2 \end{pmatrix},$$

$$\{q\} = \begin{pmatrix} y \\ \varphi \end{pmatrix}, \; \{P\} = \begin{pmatrix} (k \cdot \mathrm{i} \cdot \omega + C) \cdot (h_1 + h_2) \\ (k \cdot \mathrm{i} \cdot \omega + C) \cdot l \cdot (h_2 - h_1) \end{pmatrix}.$$

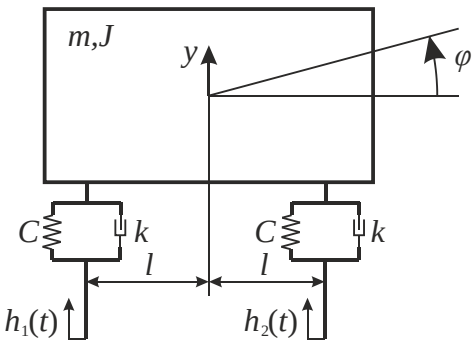


Рис. 4. Простейшая модель трамвайного вагона

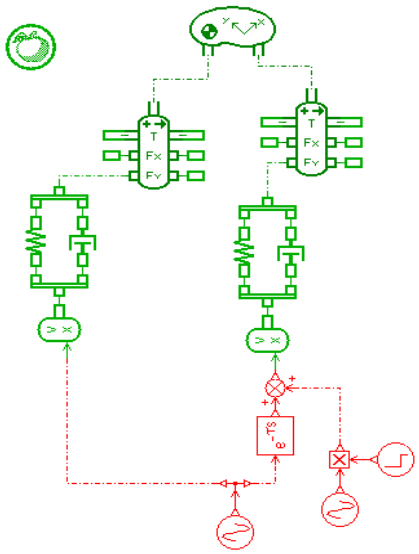


Рис. 5. Функциональная блок-схема простейшей модели трамвайного вагона в Siemens LMS Imagine.Lab

Чтобы реализовать запаздывание возмущений в системе, представим $h_2(t) = h_1(t) \cdot e^{-i \cdot \omega \cdot t_1}$ [7] . Тогда вектор *{P}* примет следующий вид:

$$\{P\} = \begin{pmatrix} (k \cdot i \cdot \omega + C) \cdot (1 + e^{-i \cdot \omega \cdot t_1}) \cdot h_1 \\ (k \cdot i \cdot \omega + C) \cdot l \cdot (e^{-i \cdot \omega \cdot t_1} - 1) \cdot h_1 \end{pmatrix} = \{P^*\} \cdot h_1. \quad (9)$$

Разрешим систему относительно y/h_1 и φ/h_1 и получим передаточные функции:

$$\{q\} = \begin{Bmatrix} y/h_1 \\ \varphi/h_1 \end{Bmatrix} = (-[M]\cdot\omega^2 + [K]\cdot i\cdot\omega + [C])^{-1}\cdot\{P^*\}. \quad (10)$$

Для представленной на Рис.2 системы передаточные функции получим аналогично.

4. Функция спектральной плотности возмущающего воздействия

Спектральную плотность возмущающего процесса можно определить с помощью следующего выражения [8]:

$$S_h(\omega) = \frac{S^2}{2\sqrt{\pi}}\sum_{i=1}^{n}\frac{a_i}{\alpha_i V}\left\{\exp\left[-\frac{(\omega-\alpha_i V)^2}{4\alpha_i^2 V^2}\right] + \exp\left[-\frac{(\omega+\alpha_i V)^2}{4\alpha_i^2}\right]\right\}, \quad (11)$$

где S^2 – дисперсия процесса; a_i – доля дисперсии i-той составляющей; ω_i – частота, соответствующая i-тому максимуму; α_i – половина ширины i-того максимума функции $S_h(\omega)$, замеренная при ординате, соответствующей половине высоты этого максимума; V – скорость движения экипажа.

Также спектральная плотность может определяться следующим выражением [9]:

$$S_{\ddot{h}}(\omega) = \frac{2{,}55\cdot\omega^2}{(\omega^4 - 98\cdot\omega^2 + 4400)}. \quad (12)$$

5. Алгоритм реализации методики

Таким образом в статье предложены два подхода к оценке плавности хода трамвайного вагона:

1) использование методов статистической динамики:

а) записывают дифференциальные уравнения движения трамвайного вагона в матричной форме;

б) прикладывают единичное гармоническое воздействие на первую колесную пару;

в) задают постоянную скорость движения;

г) определяют временной сдвиг между воздействиями на остальные колесные пары $t_j = L_j/V$;

д) формируют правую часть уравнений движения;

е) вычисляют передаточные функции;

ж) определяют спектральную плотность вынуждающего воздействия;

з) получают отклик системы с помощью выражения (2);

и) вычисляют плавность хода с помощью выражения (1);

к) сравнивают показатель плавности хода с нормативным значением (6).

2) использование имитационной модели трамвайного вагона:

а) в пакете LMS Imagine.Lab строят модель трамвайного вагона в виде функциональной блок-схемы;

б) по известной спектральной плотности входного процесса генерируют случайный сигнал (по алгоритмам, изложенным в [10]) – путь длиной не менее 5 км;

в) задают постоянную скорость движения трамвая;

г) полученную временную реализацию подают на каждую из 6 колесных пар со сдвигом по времени в зависимости от скорости движения;

д) получают временную реализацию по виброускорениям в характерных точках кузова;

е) по временной реализации получают среднее квадратическое значение виброускорений отклика;

ж) вычисляют плавность хода с помощью выражения (1);

з) сравнивают показатель плавности хода с нормативным значением (6).

Заключение

Предложена методика оценки плавности хода и алгоритм ее реализации. Ее применение позволяет произвести оценку динамических характеристик сочлененного низкопольного трамвая и внести необходимые коррективы в конструкцию на ранних этапах проектирования.

Работа выполнялась при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках проекта «Создание высокотехнологичного производства модельного ряда инновационных энергосберегающих трамвайных вагонов модульной конструкции для развития городских пассажирских транспортных систем» по договору № 02.G25.31.0108 от 14.08.2014 г.

Библиографический список

1. Нормы для расчета и проектирования механической части новых вагонов трамвая колеи 1524 мм. – М.: ВНИИВ, 1989. – 100 с.

2. ГОСТ 8802–78. Вагоны трамвайные пассажирские. Технические условия.

3. ГОСТ 27364–87. Вагоны трамвайные пассажирские. Общие технические требования.

4. ОСТ 24.050.16-85 Вагоны пассажирские. Методика определения плавности хода.

5. ОСТ 24.050.37-84 Вагоны грузовые и пассажирские. Методы испытаний на прочность и ходовые качества.

6. Светлицкий, В.А. Статистическая механика и теория надежности / В.А. Светлицкий. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. – 504 с.

7. Силаев, А.А. Спектральная теория подрессоривания транспортных машин / А.А. Силаев. – М.: Изд-во «Машиностроение», 1972. – 192 с.

8. Бозымбаев, Б. Анализ возмущений, действующих на экипаж со стороны пути / Б. Бозымбаев, А.Б. Амирханов // Промышленный транспорт Казахстана. – 2010. – № 4. – С. 21–24.

9. Белоцерковский, А.Б. Случайные колебания рам тележек вагонов метрополитена с учетом неровности пути / А.Б. Белоцерковский, В.А. Жовдак, О.В. Черных, Ю.А. Ярошок // Вестник НТУ «ХПИ»: Динаміка та міцність машин. – 2003. – № 12.

10. Быков, В.В. Цифровое моделирование в статистической радиотехнике / В.В. Быков. – М.: Изд-во «Советское радио», 1971. – 328 с.

К содержанию

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

УДК 553.611.9(73) + 543.5(73)

ХИМИЧЕСКИЙ И ТЕРМОГРАВИМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ БЕНТОНИТОВЫХ ГЛИН ГРЕЧЕСКОГО И ВАЙОМИНГСКОГО (США) МЕСТОРОЖДЕНИЙ

В.А. Смолко, Е.Г. Антошкина

Исследован химический состав и представлены термогравиметрические данные исследования бентонитовых глин греческого и вайомингского месторождений

Ключевые слова: бентонитовые глины, химический анализ, термогравиметрические исследования.

Введение

Бентонитовые глины имеют широкое применение в различных отраслях промышленности: в производстве строительных изделий, керамики, огнеупорных материалов, цемента, для буровых глинистых растворов, в литейном производстве, для очистки нефтепродуктов, в производстве минеральных красок и др.

Встречающиеся в природе бентонитовые глины различных генетических типов весьма разнообразны по химико-минералогическому составу и физическим свойствам.

Бентонитовые глины – тонкодисперсные образования, представляющие собой алюмосиликаты, состоящие на 80–90 % из хорошо окристаллизованного диотаэдрического монтмориллонита с примесью смешанослойных глинистых минералов и селадонит-глауконитовой слюды. В качестве парагенетических минералов характерны агат, халцедон, цеолиты, кристобалит, горный хрусталь, аметист, сульфидные минералы (галенит, халькопирит, сфалерит, пирит) [1].

К монтмориллонитам относятся разновидности, средний состав которых выражается следующей структурной формулой: $M_x^+Si_8[Al_{4-x}(Fe^{2+},Mg^{2+})]O_{20}(OH)_4 \cdot nH_2O$, где x изменяется в широких пределах от 0,1 до 0,6; M – межслоевые катионы типа Na, Ca, Mg.

Таким образом, характерная особенность монтмориллонитов состоит в том, что отрицательный заряд слоев сосредоточен в октаэдрах и обусловлен замещением части катионов Al^{3+} на двухвалентные катионы. Компенсация отрицательного заряда слоев производится катионами M (Na, Ca, Mg и т.п.), расположенными в межслоевых промежутках структуры (рис. 1).

Бентонитовые глины содержат, в среднем, (мас., %): SiO_2 – 56– 0; Al_2O_3 – 15–20; Fe_2O_3 – 4,5–9; Na_2O – 2,5, для них характерна высокая емкость обменного комплекса (от 63 до 112 моль на 100 г сухой пробы). По составу

обменных катионов бентониты подразделяются на щелочные, где основным компонентом обменного комплекса являются катионы натрия и щелочноземельные (кальциевые, магниевые, кальцие-магниевые, магние-кальциевые), где больше половины катионов принадлежат кальцию и магнию.

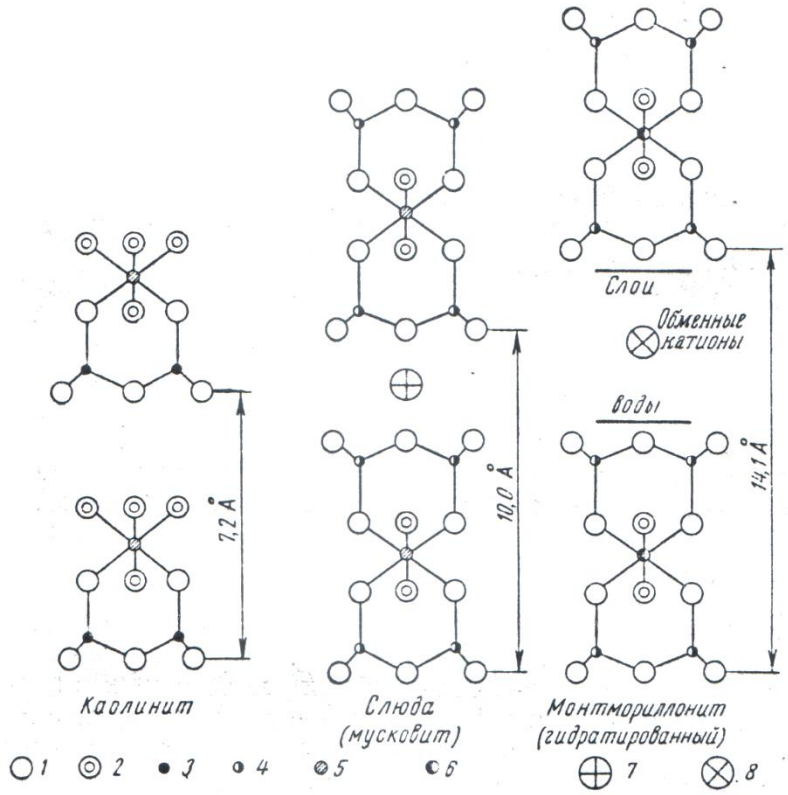


Рис. 1. Схематическое изображение мотива структуры ряда глинистых минералов: 1 – кислород; 2 – группа OH^-; 3 – кремний; 4 – Si замещен Al; 5 – алюминий; 6 – Al замещен Mg; 7 – калий; 8 – обменные катионы

Щелочные бентониты характеризуются высокой набухаемостью, коллоидальностью, пластичностью и максимально возможной для глин связующей способностью.

Щелочноземельные бентониты характеризуются меньшей гидрофильностью и связующей способностью и, как правило, уступают щелочным бентонитам.

Целью работы является исследование химического состава рассматриваемых бентонитов, определение размеров их структурных составляющих, удельной поверхности, проведение термогравиметрических исследований, установление температурных пределов использования исследуемых глин.

Методика проведения эксперимента. Предметом исследования является греческий бентонит и как мировой эталон вайомингский бентонит (США). Микрохиманализ и размеры частиц определялись на растровом

электронном микроскопе «JEOL» JSM-6460 LV, удельная поверхность устанавливалась на приборе «Sorbi» методом БЭТ, термогравиметрический анализ проводили на термоанализаторе Netzsch-449 F1.

Результаты и их обсуждения

Греческий бентонит относится к вулканогенно-осадочному генетическому типу. Удельная поверхность бентонита 23,85 $м^2/г$. Размеры частиц приведены на рис. 1. Микрохиманализ участков с поверхности отдельных частиц (рис. 2) представлен в табл. 1. Спектр № 1 – участок поверхности, который представляет собой частицу монтмориллонита, спектр № 2 – частицу модифицирующей добавки.

Таблица 1

Микрохиманализ поверхности частиц
хакасского модифицированного Na_2CO_3 бентонита

Спектр, номер	C	O	Na	Mg	Al	Si	P	K	Ca	Ti	Fe
1 (рис. 2а)	–	59,79	2,78	2,40	7,47	22,57	0,86	0,40	1,25	0,65	1,85
2 (рис. 2б)	5,92	60,60	1,32	1,07	3,66	24,89	–	0,13	1,14	0,17	1,10

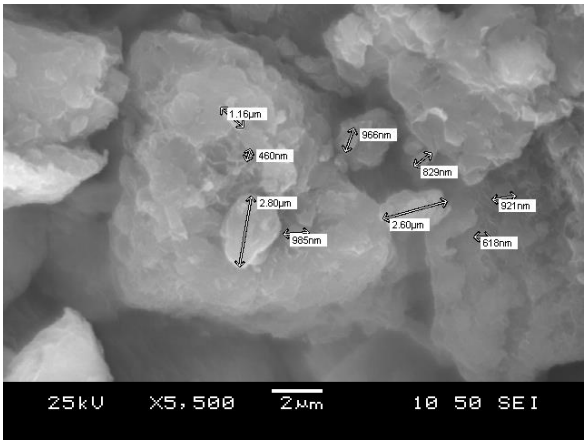
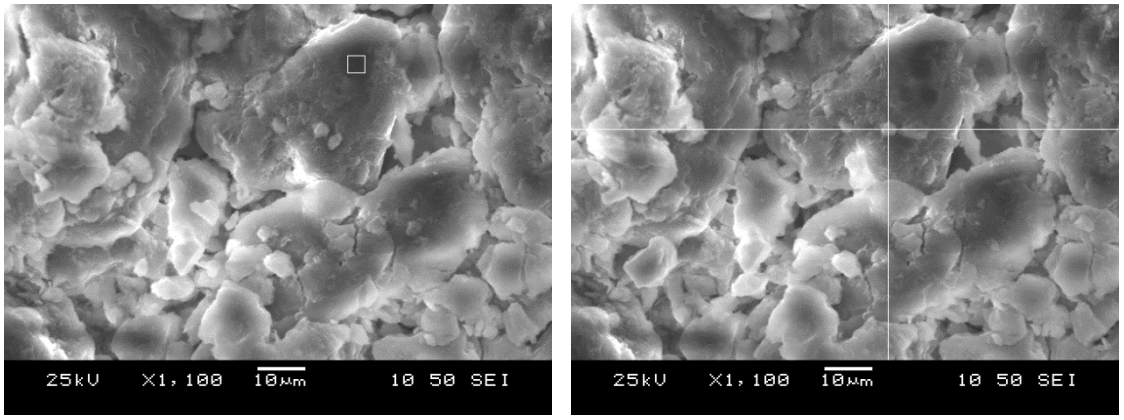


Рис. 1. Размеры частиц греческого бентонита



а б

Рис. 2. Поверхность греческого бентонита, подвергнутая микрохиманализу,
а – спектр № 1, б – спектр № 2

Термограмма данного бентонита представлена на рис. 3.

Первый эндотермический эффект наблюдается при температуре 373–453 К, связанный с выделением свободной и межпакетной воды. Второй эндотермический эффект выражен слабее, чем первый и наблюдается в интервале температур 933–1053 К и вызван потерей конституционной воды, а также диссоциацией карбонатов магния и кальция, которые присутствуют в данном бентоните в качестве модификатора. Декарбонизация карбонатов представляет собой топохимический процесс. В общем виде эндотермическая реакция декарбонизации описывается уравнением:

$$A_m \rightarrow B_m + C_r,$$

где A_m – $CaCO_3$, $MgCO_3$; B_m – CaO, MgO и C_r – CO_2.

Особенностью является образование из твердой фазы двух новых: твердой и газообразной. Плотность вновь возникающей твердой фазы значительно больше, чем исходной фазы. Вследствие этого объем образующейся новой твердой фазы значительно меньше исходной. Так, вместо 1 $см^3$ $CaCO_3$ ($MgCO_3$) образуется 0,455 $см^3$ CaO и 0,397 $см^3$ MgO. На температуру разложения карбонатов кальция и магния влияют размеры кристаллов исходного бентонита. Понижение температур разложения при увеличении степени дисперсности связано с известным явлением упругости пара с уменьшением радиуса частицы. Тепловой эффект декарбонизации карбоната кальция равен –173,5 кДж/моль. По экспериментальным данным [1], энергия активации процесса диссоциации $CaCO_3$ примерно равна теплоте диссоциации, то есть равна 171 кДж/моль. Температура разложения карбоната кальция – 1181 ± 6К. Карбонат магния разлагается при более низких температурах, чем карбонат кальция, примерно при 913 К.

В случае присутствия в глинистых минералах доломита $CaMg(CO_3)_2$ реакция диссоциации протекает в две стадии: первая – разложения карбоната магния, а вторая – диссоциация карбоната кальция.

Двухстадийность разложения доломита на оксиды обуславливается тем, что при некоторой температуре упругость диссоциации карбоната кальция еще низкая, и образование оксида кальция становится возможным лишь после завершения первой стадии и дальнейшего повышения температуры. На термограмме наибольшее количество выделившегося CO_2 наблюдается при температуре 993–1013 К и дальнейшее повышение температуры уже не приводит к значительному изменению массы. В целом масса образца в рассматриваемом интервале температур уменьшилась на 14,51 %, где 7,62–8 % составляет вода и выделившейся CO_2. Дальнейшее повышение температуры приводит к деструкции бентонита.

Вайомингский бентонит (Западное побережье США) является международным этанолом (стандартом) бентонита и относится к вулканогенно-осадочному генетическому типу. Удельная поверхность бентонита очень высо-

кая и равна 65,30 м^2/г. Размеры частиц приведены на рис. 4. Микрохимонализ отдельных участков с поверхности частиц (рис. 5) представлен в таблице 2.

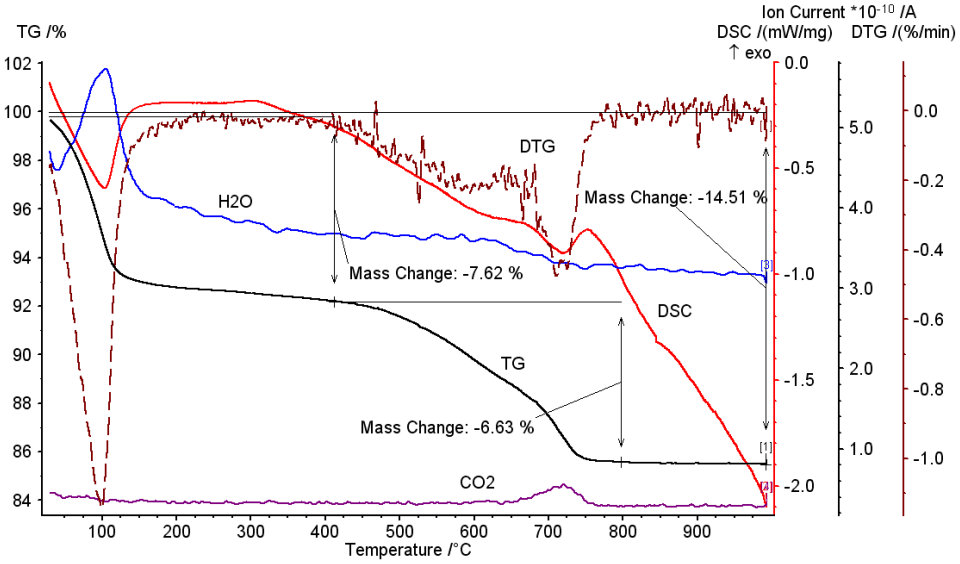


Рис. 3. Термограмма греческого бентонита

Таблица 2

Микрохиманализ с поверхности частиц вайомингского бентонита

Спектр, номер	C	O	Na	Mg	Al	Si	S	K	Ca	Fe
3 (рис. 5)	7,57	55,83	1,39	0,90	6,54	24,90	–	0,19	0,45	2,23
4 (рис. 5)	8,75	50,16	5,35	–	9,04	24,13	–	0,57	1,99	–

Результаты микрохиманализа указывают на присутствие в составе этого бентонита большого количества монтмориллонита, который достаточно однороден и в нем мало присутствует сера и фосфор.

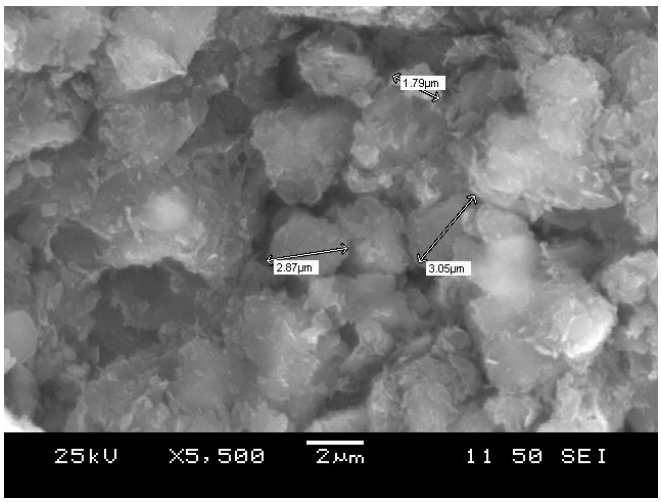
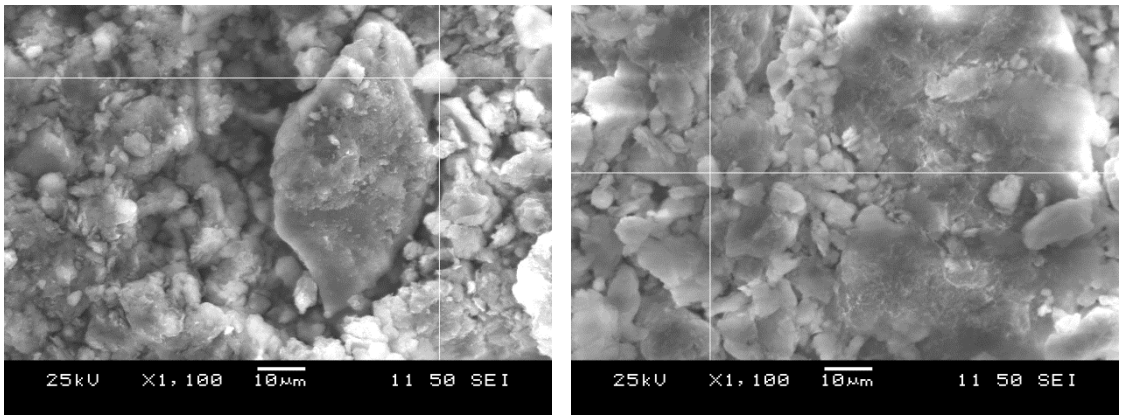


Рис. 4. Размеры частиц греческого бентонита



а б

Рис. 5. Поверхность вайомингского бентонита,
подвергнутая микрохиманализу, а – спектр № 3, б – спектр № 4

Термограмма этого бентонита представлена на рис. 6. Первый ярко выраженный эндотермический эффект наблюдается в интервале 343–423 К, где происходит удаление свободной и частично межпакетной воды и уменьшение массы образца на 4,86 %. Второй эндотермической эффект протекает при температуре 733–773 К и связан с удалением конституционной влаги и выделением CO_2, связанный с разложением органической составляющей бентонита.

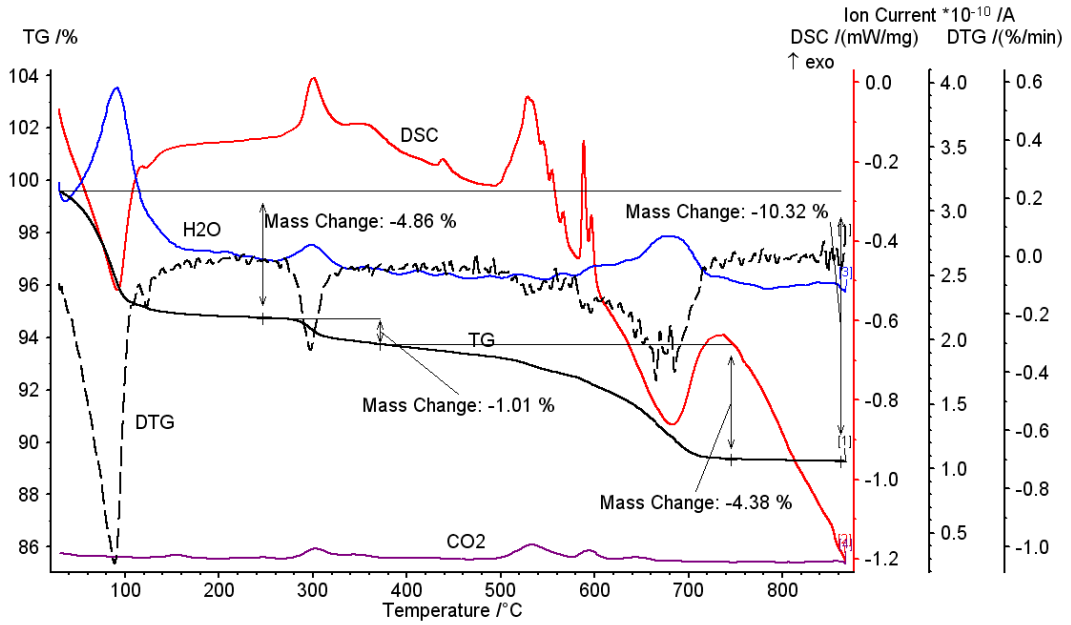


Рис. 6. Термограмма вайомингского бентонита

Третий эндотермический эффект на кривой нагревания вайомингского бентонита наблюдается в интервале температур 853–873 К и вызван разрушением кристаллической решетки минерала, разложением карбонатов, которые находятся в бентоните. Последующее нагревание сопровождается разрушением кристаллической решетки бентонита и превращением его в аморфное вещество.

В процессе нагревания в исследуемом интервале уменьшение массы составляет 10,3 %, что значительно меньше чем у греческого бентонита (14,51 %). В процессе нагревания наблюдаются два экзотермических эффекта. Первый в интервале 553–953 К связан с разложением органической составляющей бентонита. Второй экзо-эффект при температуре 853–873 К, который связан с разложением монтмориллонита. Четвертый экзотермический эффект наблюдается в интервале температур 1003–1053 К, где происходит спекание составляющих с образованием муллита. В процессе нагревания наблюдается выделяется CO_2, особенно при температуре 833–893 К, которое вызвано разложением карбонатов кальция и магния, входящих в состав бентонита.

Заключение

Определен химический состав рассматриваемых бентонитов. Установлено, что частицы минерала монтмориллонита имеют размеры 1,0–0,3 мкм и выше, толщиной 0,001–0,02 мкм. Форма частиц плохо выраженная, редко гексагональная, имеет тенденцию к образованию агрегатов частиц.

Получены данные термогравиметрических исследований и установлены интервалы температур структурных превращений и деструкции бентонитовых глин рассматриваемых месторождений.

Библиографический список

1. Солодкий, Н.Ф. Глины и каолины Урала: справочное пособие / Н.Ф. Солодкий, А.С. Шамриков, В.В. Викторов, М.С. Клепиков, А.А. Щербаков. – Челябинск: Изд-во ЧГПУ, 2012. – 176 с.

2. Кайнарский, И.С. Процессы технологии огнеупоров / И.С. Кайнарский. – М.: Изд-во «Металлургия», 1969. – 352 с.

К содержанию

УДК 621.742.4(470.58) + 544.57(470.58)

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ НА ВЯЗКОСТЬ СУСПЕНЗИЙ ГЛИНИСТЫХ МИНЕРАЛОВ

Е.Г. Антошкина, В.А. Смолко

Статья посвящена исследованию влияния частоты и времени ультразвуковой обработки на вязкость бентонитовых водно-глинистых суспензий. Объектом исследования являлась бентонитовая глина Зыряновского месторождения Курганской области, на основе которой готовились водно-глинистые суспензии. Полученные суспензии исследовали на условную вязкость, для определения которой использовался вискозиметр ВЗ-2, и динамическую вязкость, которую определяли при помощи ротационного вискозиметра Brookfield Rheo V 2.8. Показано, что обработка глинистых суспензий ультразвуком вызывает в зависимости от продолжительности и мощности обработки как диспергирующее, так и агрегатирующее действие.

Ключевые слова: водно-глинистая суспензия, ультразвуковая обработка, условная вязкость, динамическая вязкость.

Введение. Бентониты применяются как адсорбенты в химии и связующие материалы в строительстве, металлургии, при добыче нефти и газа, а также в других отраслях. В строительстве, литейном производстве требуется получение суспензий, обладающих определенной связующей способностью при минимальном расходе бентонитов, в нефтехимии получение тампонажных и промывочных суспензий с требуемой вязкостью, плотностью и другими тиксотропными свойствами структурированных систем.

Объект исследования. Объектом исследования являлась бентонитовая глина Зыряновского месторождения Курганской области марки П1Т1А.

Целью настоящей работы было исследование влияния частоты и времени ультразвуковой обработки на вязкость водных суспензий бентонитов Зыряновского месторождения для последующего получения глинистых суспензий в соответствии с требуемыми технологическими регламентами на применение растворов.

Экспериментальная часть

При ультразвуковой обработке дисперсной системы, в которой создается волновая картина, условно могут быть выделены четыре зоны. Первая зона – зона активного диспергирования твердой фазы, начинающаяся на поверхности излучателя волн и заканчивающаяся во второй переходной зоне, в которой наступает неустойчивое динамическое равновесие между процессами диспергирования и коагуляции. Третья зона – зона волновой и гидродинамической коагуляции. Четвертая зона – зона устойчивого структурно-реологического равновесия состояния твердой фазы раствора.

В зоне активного диспергирования основная роль в измельчении твердой фазы принадлежит кавитационным процессам. Диспергирование твердых частиц в условиях кавитации сопровождается гидромеханическим и термическим разрушением их адсорбционно-сольватных слоев. Диспергирование глины в растворе происходит в основном по слабым местам – дефектам их кристаллических решеток. Во второй переходной и третьей зоне идет процесс волновой и гидродинамической коагуляции, при этом, чем выше концентрация твердой фазы в растворе, тем заметнее склонность частиц к сближению. Однако, восстановление прежнего до диспергирования состояния полидисперсной системы вследствие коагуляции не происходит, так как фрагменты агрегатов и крупных частиц не восстанавливаются в единое целое, притянув на себя воду и образовав за счет более высокой удельной поверхностной энергии сольватную оболочку, имеющую монослой сильно связанной воды, которая не дает Ван-дер-ваальсовым силам полностью сблизить мелкие частицы твердой фазы [1].

При обработке низкими частотами в докавитационной области до 20 кГц ультразвук увеличивает скорость коагуляции, а с повышением мощности способствует диспергированию [2]. В ультразвуковом поле малой мощности легкие дисперсные частицы следуют за средой, тогда как крупные частицы очень мало увлекаются жидкостью. Возникающий ортокинетический эффект приводит к тому, что частицы в ультразвуковом поле различаются по амплитуде и фазе колебательного движения. В результате мелкие частицы, пронизывая среду должны оказаться в поле действия молекулярных сил крупных частиц. Преодоление барьера отталкивания и коагуляции возможно лишь тогда, когда амплитуду колебания частиц можно сравнить с расстоянием между ними. В ультразвуковом поле потоки жидкости, обтекающие большую частицу должны деформировать двойной электрический слой. Возникший индуцированный диполь с большим электрическим моментом способен поляризовать двойной электрический слой малой частицы. В этом случае в результате поляризационного взаимодействия увеличивается вероятность дальнейшей агрегации. Это наблюдается при использовании ультразвукового поля малой мощностью до 20 кГц [3].

При увеличении мощных ультразвуковых полей в дисперсных системах протекают разного рода изменения в жидкой среде, происходящие вследствие захлопывания и пульсирования кавитационных полостей, которые определяются совокупностью механических, тепловых, химических и электрических эффектов.

В объеме суспензии при обработке ультразвуковым полем возникают одномерные периодические коллоидные структуры (ПКС). Ультразвуковое поле может вызвать как деформацию двойного электрического слоя, так и поляризацию молекул жидкости вблизи поверхности раздела. Последнее

должно определить, с одной стороны, увеличение устойчивости к непосредственному слипанию микрообъектов, с другой – проявлению электрических сил, обусловленных ориентацией дипольных молекул. Некоторые исследователи [3] предполагают наличие ориентационного эффекта в жидкости, обусловленного распределением ультразвуковой волны. В этом случае можно объяснить поглощение ультразвука периодической перегруппировкой ориентированных молекул.

В работе исследовались 5%-ные (по массе) водно-глинистые суспензии. Следует отметить, что для системы, в которой содержание бентонитовой глины составляет 5–10 % по массе, процесс образования суспензии протекает свободно и быстро, так как в данной системе достаточно свободной воды для взаимодействия с минералами глины при набухании.

Полученные суспензии исследовали на условную вязкость, для определения которой использовался вискозиметр ВЗ-2. Измерения динамической вязкости производились при помощи ротационного вискозиметра Brookfield Rheo V 2.8. Пределы допускаемой абсолютной погрешности измерений динамической вязкости ±1 %. За результат испытания принимали среднее арифметическое результатов трех определений. Расхождение между результатами параллельных определений не превышало 5 %.

Ультразвуковую обработку проб суспензий проводили на установке Elmasonic S40/н с частотой ультразвука 37 кГц мощностью 340 Вт, а также на установке УЗГ-5М, позволяющей получать ультразвуковое поле с частотой 20, 50 и 60 кГц и мощностью 300 Вт. Излучателем в данном случае был электромеханический преобразователь с использованием ультразвукового стержневого концентратора. Время обработки варьировалось в течение 1, 5 и 15 минут.

Результаты исследований и обсуждение

Экспериментальные данные, полученные при определении условной вязкости суспензии зыряновского бентонита, подвергнутой обработке ультразвуковым полем мощностью 37 кГц, показали, что облучение суспензии в течение 15 минут уменьшает условную вязкость в среднем с 52 до 42 с. Однако, после обработки и выдержки в течение 24 часов, условная вязкость увеличивается на 4–5 %.

Диспергированные частички глины перераспределяются таким образом, что молекулярные связи, действующие между ними, усиливаются. Диспергирование замедляется, образуется ПКС. Начинается процесс укрупнения частиц или так называемой автокаогуляции, что ведет к повышению показателей условной вязкости.

Дальнейшая агрегация частиц ускоряется явлением реопексией за счет ультразвукового облучения. Существует определенная близость между реопексией, тиксотропным восстановлением и дилантансией (или квазидилатансией) [2].

Более высококонцентрированные водно-глинистые суспензии в исходном состоянии представляют собой пасты, поэтому измерение условной вязкости затруднено.

Экспериментальные данные, полученные при определении динамической вязкости водно-глинистых суспензий, представлены на рис. 1, 2, там же приведены уравнения регрессии и коэффициенты корреляции.

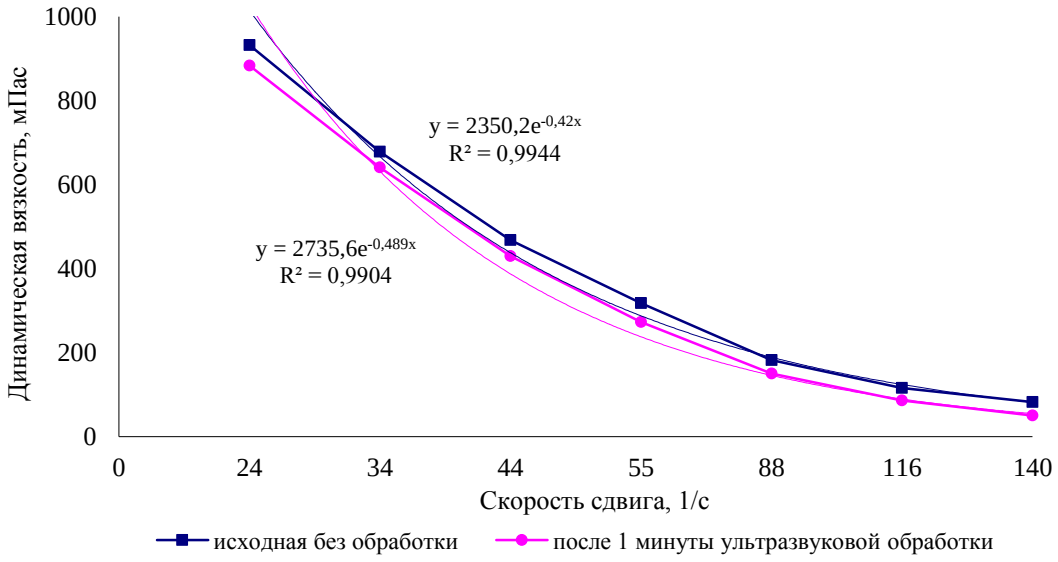


Рис. 1. Влияние скорости сдвига на динамическую вязкость водно-глинистой суспензии после обработки ультразвуковым полем частотой 20 кГц

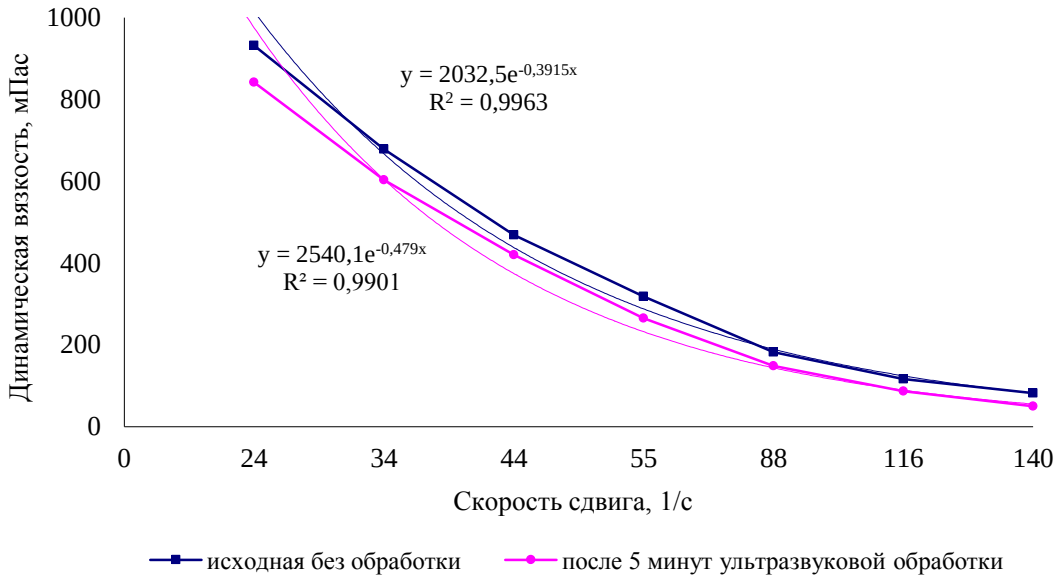


Рис. 2. Влияние скорости сдвига на динамическую вязкость водно-глинистой суспензии после обработки ультразвуковым полем частотой 20 кГц

Экспериментально установлено, что ультразвуковая обработка полем частотой 20 кГц при временных воздействиях 1, 5 минут приводит к уменьшению динамической вязкости исходной бентонитовой суспензии. Уменьшение вязкости под действием ультразвуковой обработки связанно с эффективным диспергированием частиц бентонитовой глины зыряновского месторождения.

Зависимости динамической вязкости от скорости сдвига не выражены прямыми линиями, то есть зависимость не линейна и не подчиняется закону Ньютона, из этого следует, что бентонитовые водно-глинистые суспензии являются неньютоновскими жидкостями. С увеличением скорости сдвига вязкость суспензий уменьшается, в то время как напряжение сдвига растет. Это означает, что характер течения суспензии является псевдопластическим.

На графиках зависимости динамической вязкости от скорости сдвига (рис. 1, 2) видно, что при увеличении скорости сдвига до максимального значения, достигается минимальная вязкость суспензий. Анализируя данные реологических исследований можно отметить, что водно-глинистые суспензии являются тиксотропными жидкостями, что в свою очередь указывает на структурированную систему, частицы дисперсной фазы образуют агрегаты, которые под действием нагрузки разрушаются, вследствие чего система обретает подвижность. В начальный момент времени система не разрушена, течение отсутствует. При приложении некоторого малого напряжения, необходимого для разрыва связей между элементами структуры, суспензия становится более подвижной, а в дальнейшем, по мере возрастания приложенной нагрузки, становится еще более текучей, вследствие чего динамическая вязкость снижается.

Также следует отметить, что ультразвуковая обработка водно-глинистых суспензий зыряновского бентонита позволяет получить суспензии не только с более низкой вязкостью, но, и значительно менее устойчивых к приложенной нагрузке.

Экспериментально установлено, что ультразвуковая обработка полем частотой 50 кГц, 60 кГц при временных воздействиях 1, 5 минут приводит к увеличению динамической вязкости исходной бентонитовой суспензии. Это объясняется тем, что увеличение мощности ультразвуковой обработки сопровождается агрегацией диспергированных частиц системы. Коагуляционным явлениям способствует перестроение гидратных оболочек, нарушение сферической симметрии двойного электрического слоя вокруг отдельных частиц, появление дипольного момента. Вследствие этого отдельные частицы притягиваются друг к другу и за счет соударений под действием ультразвуковых волн образуют агрегаты частиц.

Следует отметить, что при увеличении мощности до 60 кГц наблюдается небольшое ухудшение процесса коагуляции. Это можно объяснить тем, что увеличение мощности приводит к постепенному кавитационному разрушению укрупнившихся частиц.

Выводы

1. Бентонитовые водно-глинистые суспензии являются тиксотропными неньютоновскими жидкостями с псевдопластическим характером течения.

2. Ультразвуковая обработка приводит к снижению условной вязкости свежеприготовленных суспензий из-за образования периодических коллоидных структур, после чего начинается процесс автокаогуляции. После 15 минут обработки ультразвуковым полем частотой 37 кГц условная вязкость уменьшается с 52 с до 42 с.

3. Ультразвуковая обработка в зависимости от продолжительности обработки и мощности ультразвукового воздействия проявляет как диспергирующее, так и агрегатирующее действие. В результате ультразвукового воздействия полем 20 кГц на водно-глинистые суспензии зыряновского бентонита в течение 1, 5 минут происходит уменьшение динамической вязкости вследствие диспергации частиц.

4. В результате ультразвукового воздействия полем 50 кГц, 60 кГц на водно-глинистые суспензии зыряновского бентонита в течение 1, 5 минут происходит увеличение динамической вязкости, что связано с коагуляцией частиц. При увеличении мощности до 60 кГц наблюдается небольшое уменьшение процесса коагуляции, что объясняется кавитационным разрушением укрупнившихся частиц.

Библиографический список

1. Шамов, Н.А. Волновые процессы в технологии приготовления буровых растворов / Н.А. Шамов, В.Ю. Артамонов // Электронный научный журнал «Нефтегазовое производство». – 2013. – № 3. – С. 56 –65

2. Ефремов, И.Ф. Периодические коллоидные структуры / И.Ф. Ефремов. – Л.: Издательство «Химия», 1971. – 192 с.

3. Вагнер, Г.Г. Формирование структур в силикатных дисперсиях / Г.Г. Вагнер, Ф.Д. Овчаренко. – Киев: Наукова Думка, 1989. – 184 с.

4. Ганиев, Р.Ф. Нелинейная волновая механика и технология. Волновые и колебательные явления в основе высоких технологий / Р.Ф. Ганиев, Л.Е. Украинский. – М.: Институт компьютерных исследований; Научно-издательский центр «Регулярная и хаотическая динамика», 2011. – 780 с.

К содержанию

УДК 543.4 + 546

СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КРИСТАЛЛОГИДРАТОВ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

О.Н. Груба, Н.В. Германюк, А.Г. Рябухин

Модель эффективных ионных радиусов успешно применена для расчета структурных характеристик комплексных соединений щелочноземельных металлов.

Ключевые слова: структурные характеристики, кристаллогидраты, ионный радиус, аквакомплексы, галиды, щелочноземельные металлы.

В аквакомплексах галидов щелочноземельных металлов типа $[Me(H_2O)]_6Г_2$ молекулы воды, обладающие собственными дипольными моментами, выступают в роли лигандов, подобно молекулам аммиака в амминокомплексах.

Расчеты структурных характеристик аквакомплексов имеют принципиальное значение для химии комплексных соединений и современной кристаллохимии, так как они являются одним из связующих звеньев между моделью ионных радиусов и моделью гидратации ионов [1, 2].

Галиды аквакомплексов щелочноземельных металлов $[Me(H_2O)_6]Г_2$ кристаллизуются в гексагональной (гг) сингонии (пространственная группа $P\bar{3}1m-1$, $SrCl_2 \cdot 6H_2O$) [3].

Порядок вычислений структурных характеристик [1] рассмотрим на примере соединения $\lfloor Ca(H_2O)_6 \rfloor I_2$, для которого известны следующие параметры *a* = 8,290 Å и c = 4,254 Å [3]. Радиусы ионов приведены в [1, 2].

1. Объем элементарной ячейки:

$$V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c = \frac{\sqrt{3}}{2} 8{,}290^2 \cdot 4{,}254 = 253{,}1845. \quad (1)$$

2. Ребро квазикуба:

$$a_{кк} = \sqrt[3]{V} = \sqrt[3]{253{,}1845} = 6{,}32624. \quad (2)$$

3. Структурная постоянная:

$$\alpha = \alpha_{гг} \cdot \alpha_{кк} = \left(1 + \frac{3}{4}\right) \cdot \frac{1}{2} = 0{,}7165064 \, .$$

4. Межструктурное расстояние между внутренней сферой и внешней сферами $\left[Ca(H_2O)_6\right] - I$:

$$r_p = \alpha \cdot a_{кк} = 0{,}7165064 \cdot 6{,}32624 = 4{,}53276 \, . \quad (3)$$

5. Дебаевский радиус экранирования наружной (внешней) сферы:

$$r_{Dн} = r_D^{\circ}(CaF_2)\cdot f(z) = 15{,}418081\cdot 2{,}7320508\cdot 0{,}828427 = 34{,}8958144.$$

$$f(z) = 1+\sqrt{z_K^2-1} = 1+\sqrt{3} = 2{,}7320508\ .$$

$$f(c) = f_{гг}\cdot f_{кк} = \left(\sqrt{2-1}\right)\cdot 2 = 0{,}828427\ .$$

6. Радиус комплексного катиона $[Ca(H_2O)_6)]^{2+}$:

$$r[Ca(H_2O)_6)]^{2+} = \frac{1}{2}\left[r_p - r^{\circ}(I^-) + \left(r^{\circ}(I^-)\right)^2 r_{Dн}^{-1}\right] +$$

$$+\sqrt{\left[\frac{1}{2}\left\{r_p - r^{\circ}(I^-) + \left(r^{\circ}(I^-)\right)^2 r_{Dн}^{-1}\right\}\right]^2 - r_p\cdot\left(r^{\circ}(I^-)\right)^2 r_{Dн}^{-1}} =$$

$$= \frac{1}{2}\left(4{,}53279 - 1{,}98995 + \frac{1{,}98995^2}{34{,}8958144}\right) + \sqrt{1{,}7540090 - 0{,}5143710} =$$

$$= 1{,}32816 + 1{,}11787 = 2{,}44603. \qquad (4)$$

7. Радиус аниона I^- в составе соединения:

$$r(I^-) = r_p - r[Ca(H_2O)_6)]^{2+} = 4{,}53279 - 2{,}44603 = 2{,}08676. \qquad (5)$$

8. Дебаевский радиус экранирования внутренней сферы:

$$r_{D\,вн} = r_D^{\circ}(NaCl)\cdot f(z)\cdot f(c) = 18{,}159935\cdot 2{,}7320508\cdot 1{,}774519 = 88{,}040749\ .$$

Здесь $f(z) = 1+\sqrt{z_K^2-1} = 1+\sqrt{2^2-1} = 2{,}7320508\ .$,

$$f(c) = f_{кк}\ f_{ГЦК} = \left(1+\sqrt{3}\right)\cdot\frac{3\sqrt{3}}{8} = 1{,}774519.$$

9. Электромагнитное поле, очерченное $r_{D\,вн}$, частично компенсируется $r_{Dн}$:

$$r_D = r_{D\,вн} - r_{Dн} = 88{,}040749 - 34{,}8958144 = 53{,}144935\ .$$

10. Радиус молекулы кристаллизационной воды в составе комплексного иона:

$$r(H_2O) = r[Ca(H_2O)_6)]^{2+} - r(Ca^{2+}) = 2{,}44603 - 1{,}01202 = 1{,}43401\ .$$

11. Минимальный радиус H_2O:

$$r^{\circ}(H_2O) = -\frac{r(Ca^{2+})r_D}{2r(H_2O)} + \sqrt{\left(\frac{r(Ca^{2+})r_D}{2r(H_2O)}\right)^2 + r(Ca^{2+})} =$$

$$= -\frac{1{,}01202\cdot 53{,}144935}{2\cdot 1{,}43401} + \sqrt{351{,}671845 + 53{,}783737} =$$

$$= -18{,}75292 + 20{,}13593 = 1{,}38301. \qquad (6)$$

По той же методике проведены расчеты структурных характеристик других галидов (хлоридов, бромидов, йодидов) аквакомплексов кальция и стронция. Исходные (справочные) данные и результаты расчетов представлены в таблице.

Таблица

Структурные характеристики галидов аквакомплексов кальция и стронция

№	$\lfloor Me(H_2O)_6 \rfloor \Gamma_2$ $r^\circ(\Gamma^-)$	a, c [3]	V $a_{кк}$ r_p, ур. (1–3)	$r[Ca(H_2O)_6)]^{2+}$, ур. (4)	$r(\Gamma^-)$, ур. (5)	$r^\circ(H_2O)$, ур. (6)
1	$\lfloor Ca(H_2O)_6 \rfloor Cl_2$ 1,69182	7,696 3,917	200,9159 5,85695 4,19654	2,44602	1,75052	1,38300
2	$\lfloor Ca(H_2O)_6 \rfloor Br_2$ 1,81898	8,00 4,005	221,9796 6,05486 4,33835	2,44602	1,89233	1,38300
3	$\lfloor Ca(H_2O)_6 \rfloor I_2$ 1,98995	8,290 4,254	253,1845 8,32622 4,53279	2,44603	2,08676	1,38301
4	$\lfloor Sr(H_2O)_6 \rfloor Cl_2$ 1,69182	7,905 4,084	221,0701 6,04658 4,33241	2,58516	1,74726	1,38300
5	$\lfloor Sr(H_2O)_6 \rfloor Br_2$ 1,81898	8,212 4,167	243,3616 6,24335 4,47340	2,58517	1,88824	1,38301
6	$\lfloor Sr(H_2O)_6 \rfloor I_2$ 1,98995	8,623 4,290	276,2515 6,51281 4,66647	2,58516	2,08131	1,38300

Согласие минимальных радиусов $r^\circ(H_2O)$ = $1{,}38300_{(1)}$ подтверждают адекватность модели [2]. Эта величина использована ранее при создании модели гидратации ионов [3].

Библиографический список

1. Ryabukhin, A.G. Effective ionic radii / A.G. Ryabukhin // Высокотемпературные расплавы. ЧГТУ−ЧНЦ УрО РАН. − 1996. − № 1. − С. 33−38.

2. Рябухин, А.Г. Эффективные ионные радиусы. Энтальпия кристаллической решетки. Энтальпия гидратации ионов: монография / А.Г. Рябухин. − Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2000. − 115 с.

3. Справочник химика. / Под ред. Б.П. Никольского. − Л.: Химия, 1971. − Т. 1. − 1071 с.

К содержанию

УДК 544.77 + 546.05

ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ ОКСИГИДРОКСИДОВ ИТТРИЯ КАК ОСНОВЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ КАТАЛИЗАТОРОВ

Е.П. Юдина, А.В. Фролова

В работе изучена морфология оксигидроксидов иттрия, полученных гидротермальным методом синтеза. Для исследования структуры использовался метод сканирующей электронной микроскопии. Было установлено, что под влиянием противоина исходной соли образуются продукты кардинально различной формы. Выявлено, что варьирование pH-синтеза приводит к изменению размера формирующихся структур.

Ключевые слова: гидролиз солей иттрия, гидротермальный синтез, сканирующая электронная микроскопия.

Введение

В настоящее время российский рынок редкоземельных элементов и продукции на их основе развивается в направлении освоения новых технологических платформ и создания производственных мощностей в нашей стране с целью ликвидировать отставание России в области производства и использования РЗЭ (в соответствии с Постановлением Правительства РФ от 15.04.2014 № 328) [1]. В связи с этим, исследования посвященные внедрению РЗЭ в производство катализаторов, стекла и керамики отечественного производства являются особенно актуальными.

Иттрий и его соединения используются также в качестве добавки к катализаторам для нейтрализации автомобильных выхлопных газов и для переработки углеводородов [2]. Особое внимание сейчас уделяется процессу очистки моторных топлив, что связано с жесткими требованиями к их чистоте согласно спецификациям на моторные топлива Евро-4, вступившим в действие с 2005 г. в странах ЕС, и более жесткими ограничениями по содержанию серы и ароматических углеводородов. Так, доля серы в автомобильных бензинах и дизтопливах с 2005 г. не должна превышать 50 ppm, а с 2010 г. – 10 ppm (Евро-5). Такое качество моторных топлив может быть достигнуто с использованием катализаторов на основе РЗЭ. Изучение влияния параметров синтеза на строение образующихся продуктов на основе иттрия позволит получить важные данные для направленного синтеза наноструктурированных высокоактивных катализаторов с развитой пористой поверхностью.

Помимо каталитических фильтров для нейтрализации выхлопных газов автомобилей РЗЭ могут найти применение для эффективной очистки газовых продуктов мусоросжигающих заводов.

Комплекс перечисленных выше свойств РЗЭ-катализаторов может обеспечить прорыв в области создания низкотемпературных энергосберегающих и экологически безопасных каталитических процессов.

Ранее авторами предпринимались попытки получить гидроксид иттрия с заданными свойствами для дальнейшего синтеза наноструктурированного оксида иттрия с последующим введением атомов иттрия в нанокатализаторы на основе редкоземельных элементов, используя гидротермальный метод [3].

Экспериментальная часть

Для гидротермального синтеза образцов использовали растворы нитрата и хлорида иттрия с концентрацией 0,1 моль/л, гидролитический агент – водный раствор гидроксида аммония с концентрацией 3,5 моль/л. Синтез проводили при различных pH растворов. Значение pH синтеза образцов (9, 9,5, 10) находилось как ниже так и выше pH точки нулевого заряда гидроксида иттрия, равного 9,2–9,3 ед. pH. Синтез проводили в течении 24 часов при температуре 180 ºС в термостате в автоклаве с саморегулирующемся давлением, ёмкостью 40 мл с заполнением 50 %. Образцы пятикратно отмывали дистиллированной водой (до отсутствия в промывных водах противоионов), затем сушили при 50 ºС под вакуумом до постоянной массы.

SEM-изображения получили на сканирующем электроном микроскопе JeolJSM-7001F.

Обсуждение результатов

Образцы, полученные гидротермальным методом имели неоднородный состав. Ранее, методом дифракционной рентгеноскопии было доказано, что в составе продуктов, синтезированных подобным образом отсутствует гидроксид иттрия и оксид иттрия и сделаны выводы о слоистой структуре продуктов гидротермального синтеза для образцов [3].

Предположение о слоистой структуре подтверждается снимками, полученными со сканирующего электронного микроскопа. На снимках (рис. 1) представлены образцы, синтезированные из раствора нитрата иттрия. Структура образцов представлена во всех случаях палочкообразными фрагментами различной длины. Заметно, что размер фрагментов уменьшается с увеличением pH синтеза. Если при pH = 9,0 длина составляла 20–30 мкм, то при pH = 9,5 уменьшилась до 10–15 мкм и до 5–8 мкм при pH = 10,0. При этом каждый фрагмент состоит из множества соединенных между собой слоев (пластин) толщиной порядка нескольких нанометров. Наиболее четко сформированную структуру имеют образцы, синтезированные при pH=9,5. Они представляют собой трубки диаметром порядка 2 мкм и длиной около 10 мкм.

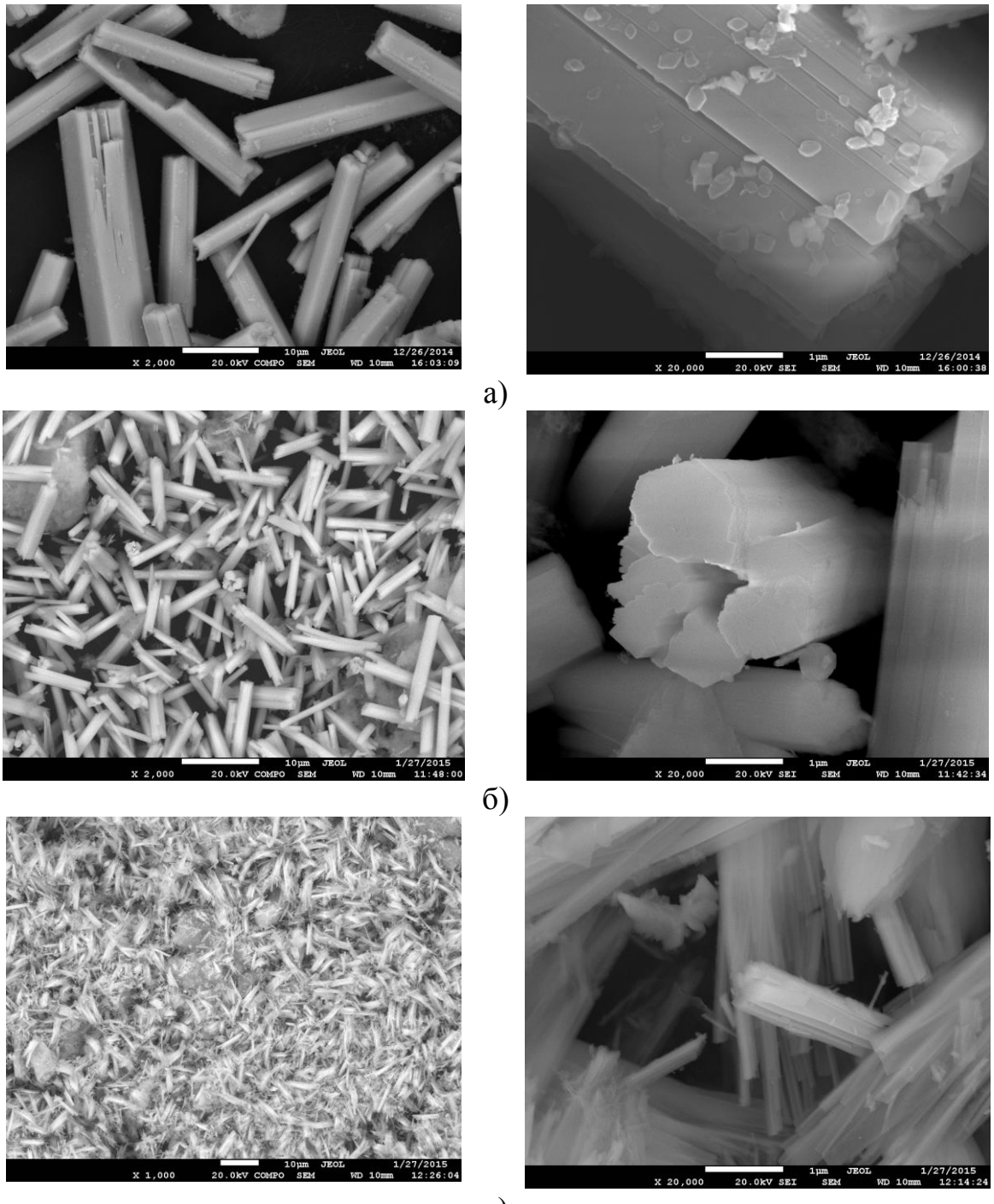
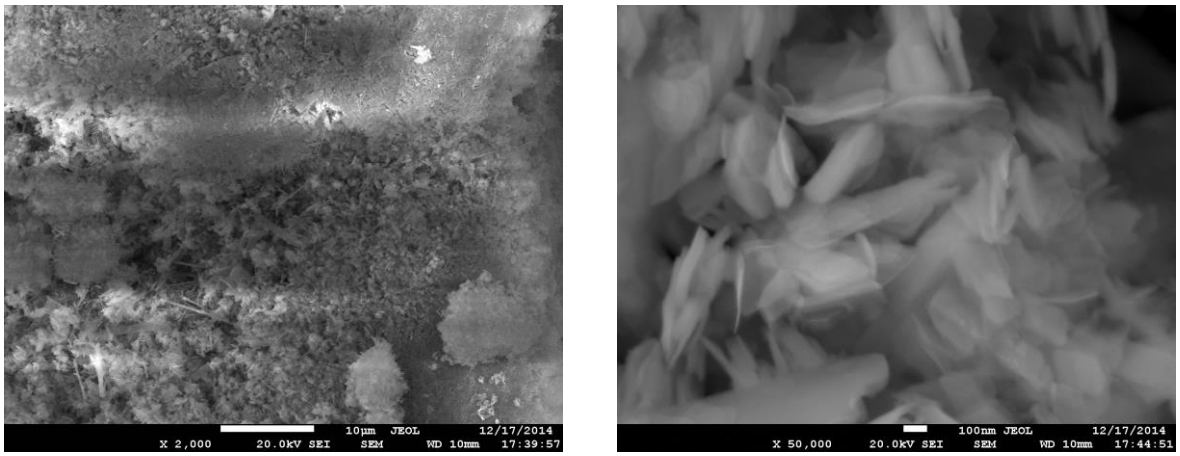
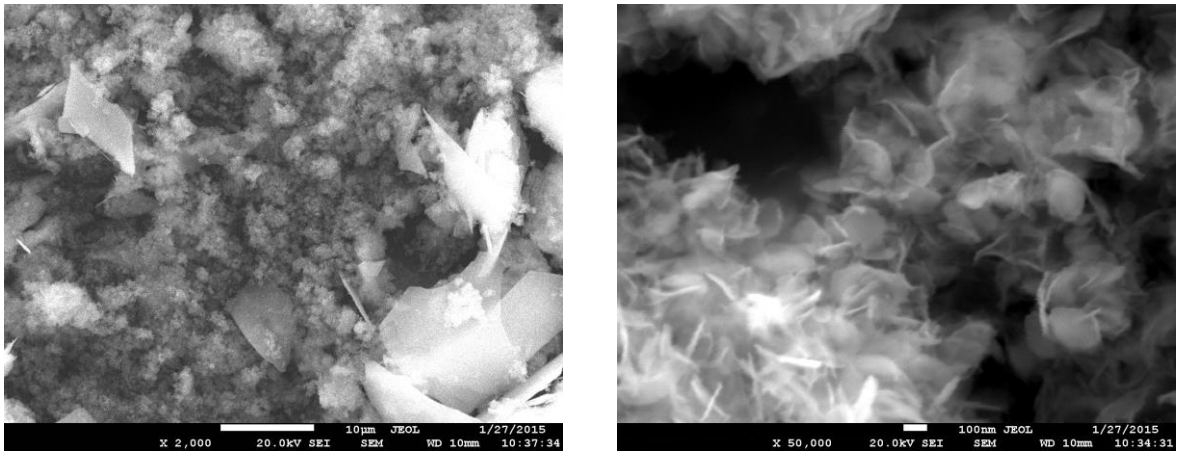


Рис. 1. SEM-изображения образцов, полученных из нитрата иттрия при а) pH = 9,0; б) pH=9,5; в) pH=10,0

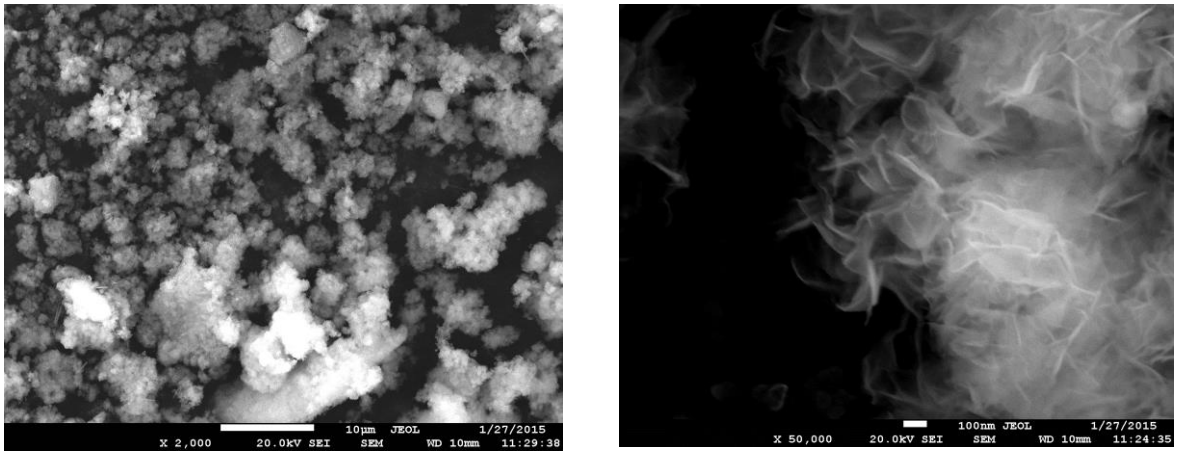
Подобная тенденция к уменьшению размера фрагментов с увеличением pH синтеза наблюдается и при использовании в качестве прекурсора хлорида иттрия (рис. 2).



а)



б)



в)

Рис. 2. SEM-изображения образцов, полученных из хлорида иттрия при а) pH=9,0; б) pH=9,5; в) pH=10,0

В данном случае фрагменты имеют характерный хлопьеобразный вид и заметно не столько изменение диаметра хлопьев, сколько их толщины от 4–5 нм при pH 9,0 до размеров порядка 1 нм при pH 10,0.

С увеличением pH выше точки нулевого заряда происходит расслоение структур, и отсутствуют элементы с чётко определимой формой. Это наблюдается как в образцах, синтезированных из нитрата иттрия, так и из хлорида иттрия. При pH=9,5 обнаружено формирование двух фаз – аморфной пластинчатой и слоистой чашуйчатой. Данные микрорентгеноспектрального анализа показывают, что состав этих фаз различен: фаза, состоящая из чешуек, имеет соотношение хлора и иттрия в составе 1:3,5 по массе, а пластинчатая фаза содержит больше хлора (1:2). Можно предположить, что эти две фазы имеют различное строение, что связано со степенью включённости ионов хлора в межслоевую структуру оксигидроксида.

Заключение

Выявлено, что в области pH точки нулевого заряда оксигидроксидов иттрия в условиях гидротермального синтеза наблюдается формирование слоистых структур, форма и размер которых зависит от противоиона прекурсора. Размер структурных фрагментов уменьшается с увеличением pH синтеза. Большое значение играет природа противоиона исходной соли иттрия, которая оказывает влияние на форму структурных фрагментов. Гидротермальный синтез позволяет получить наноразмерные фрагменты соединений иттрия с последующим направленным синтезом оксидов иттрия.

Библиографический список

1. Государственная программа Российской Федерации «Развитие промышленности и повышение её конкурентоспособности» (подпрограмма № 15 «Развитие промышленности редких и редкоземельных металлов»). – URL: www.cdnimg.rg.ru/pril/95/86/03/328.pdf. – С. 50–55.

2. Брыкин, А.В. Анализ рынка редкоземельных элементов (РЗЭ) и РЗЭ-катализаторов / А.В. Брыкин, А.В. Артемов, К.А. Колегов // Общие вопросы катализа. Катализ в промышленности. – 2013. – № 4. – С. 7–15.

3. Yudina, E.P. Analysis of products formed in hydrothermal processing of yttrium nitrate and yttrium chloride / E.P. Yudina, A.V. Frolova, I.V. Krivtsov, V.V. Avdin // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». – 2015. – Вып. 7. – № 1. – С. 51–54.

4. Авдин, В.В. Структурообразование пластинчатых оксигидратов иттрия, полученных щелочным гидролизом нитрата натрия / В.В. Авдин, И.В. Кривцов, Е.А. Кацубо, А.В. Мнякина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». – 2012. – Вып. 10. – № 36 (295). – С. 52–55.

К содержанию

УДК 546.6

АНАЛИЗ ПРОДУКТОВ СИНТЕЗА ОКСИХЛОРИДОВ ИТТРИЯ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ pH

А.В. Батист, А.В. Фролова, А.В. Богданов

В работе представлено исследование влияния конечных значений pH синтеза на результат гидролитической обработки хлорида иттрия при гель-золь синтезе. Установлено, что при увеличении конечных значений pH образуются боле плотно упакованные структуры с не определенным составом.

Ключевые слова: золь-гель метод, оксихлорид иттрия, слоистые материалы, сканирующая электронная микроскопия, рентгенофазовый анализ, дифференциальный термический анализ.

В последнее время гидроксид и оксид иттрия стали широко применяться в качестве прекурсоров для производства ИК керамики, люминофоров, в качестве агента для спекания и для уплотнения керамики. Из-за его основной природы оксид иттрия широко применяется в разнообразных каталитических реакциях, в том числе гидрирования олефина, изомеризации олефинов, альдольной конденсации. Было также обнаружено, что он является эффективным катализатором для димеризации метана и селективного каталитического восстановления оксидов азота [1]. Для всех этих целей желательно получение гидроксида иттрия с минимальным размером частиц. Наиболее эффективным методом синтеза наночастиц считается осадительная, или золь-гель технология, позволяющая проводить процесс в оптимальных условиях с точки зрения эффективности управления свойствами конечного продукта, энергетических затрат и производительности процесса [2].

Общепринятый способ получения гидроксида иттрия представляет собой осаждение водных растворов солей иттрия с использованием водного раствора гидроксида натрия или гидроксида аммония [3]. Нами ранее исследован процесс гидролиза хлорида иттрия методом гидротермального синтеза [4].

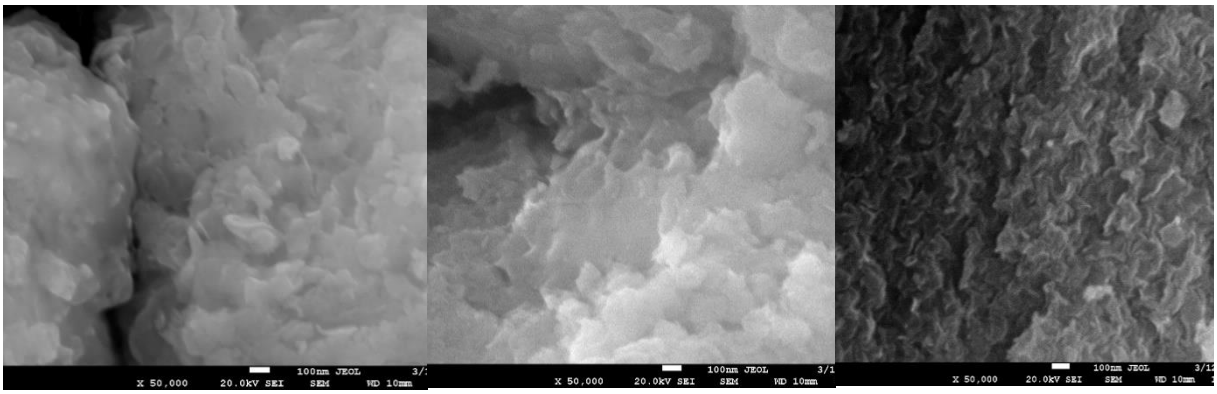
В настоящей работе для тех же концентраций соли и гидролитического агента исследована обработка хлорида иттрия гель-золь методом. Для всех полцченных образцов проведены рентгенофазовый анализ, исследование морфологии методом сканирующей электронной микроскопии (SEM) и дифференциальный термический анализ, совмещенный с термогравиметрией.

Для синтеза образцов золь-гель методом использовали раствор хлорида иттрия с концентрацией 0,1 моль/л, гидролитический агент – водный раствор гидроксида аммония с концентрацией 1 моль/л. Гидролитический агент вводили до достижения различных значений pH, которые были выбраны как

выше (8,5; 9,0), так и ниже (9,5) pH точки нулевого заряда гидроксида иттрия, равного 9,2–9,3 ед. pH. Синтез проводили при быстром введении гидролитического агента в течение 3 минут. Образцы пятикратно отмывали дистиллированной водой (до отсутствия в промывных водах противоионов), затем сушили при 50 °С под вакуумом до постоянной массы.

Далее был проведён рентгенофазовый анализ полученных образцов на XRD-дифрактометре Rigaku Ultima IV, исследована морфология на сканирующем электроном микроскопе Jeol JSM-7001F, проведен синхронный термический и масс-спектрометрический анализы на термоанализаторе Netzsch STA 449 C Jupiter, совмещенном с масс-спектрометром Aëolos QMS 403, в атмосфере аргона. Нагревание производили со скоростью 10 °С /мин в интервале температур 25…1200 °С. При проведении анализа регистрировали кривые TG и DTA, а также массовые числа 18, 37 и 44 а.е.м., соответствующие удалению из образцов H_2O, HCl и CO_2 соответственно. Кривые DTG получены в результате численного дифференцирования кривой TG.

Анализ SEM-изображений (рис. 1) показал, что все образцы обладают слоистой структурой. При этом образцы, полученные при pH ниже точки нулевого заряда (8,5 и 9,0), обладают схожими морфологическими признаками. Образец, полученный при pH выше точки нулевого заряда (9,5) обладает несколько иной, более плотной, структурой.



pH 8,5 pH 9,0 pH 9,5

Рис. 1. SEM-изображения образцов, полученных при различных pH

На рисунке 2 приведены характерные дифрактограммы образцов, синтезированных при различных pH. Анализ полученных дифрактограмм показал, что все образцы представляют собой новые вещества с неопределенным составом. Всем образцам присущи наиболее интенсивные рефлексы в области 10 градусов 2θ, что говорит о большом межплоскостном расстоянии, характерном для слоистых материалов [5].

На рис. 3 приведены термоаналитические кривые образцов.

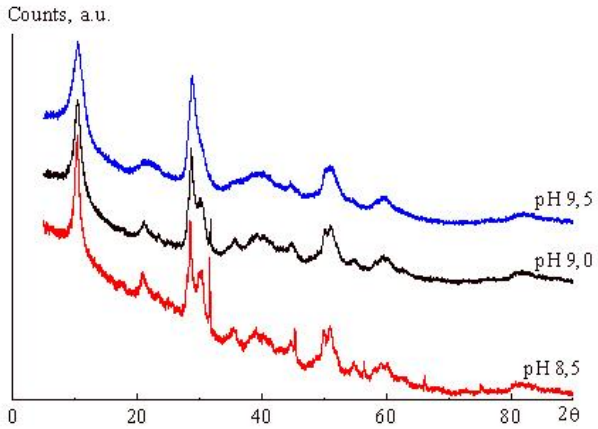


Рис. 2. Рентгенодифракционный анализ образцов

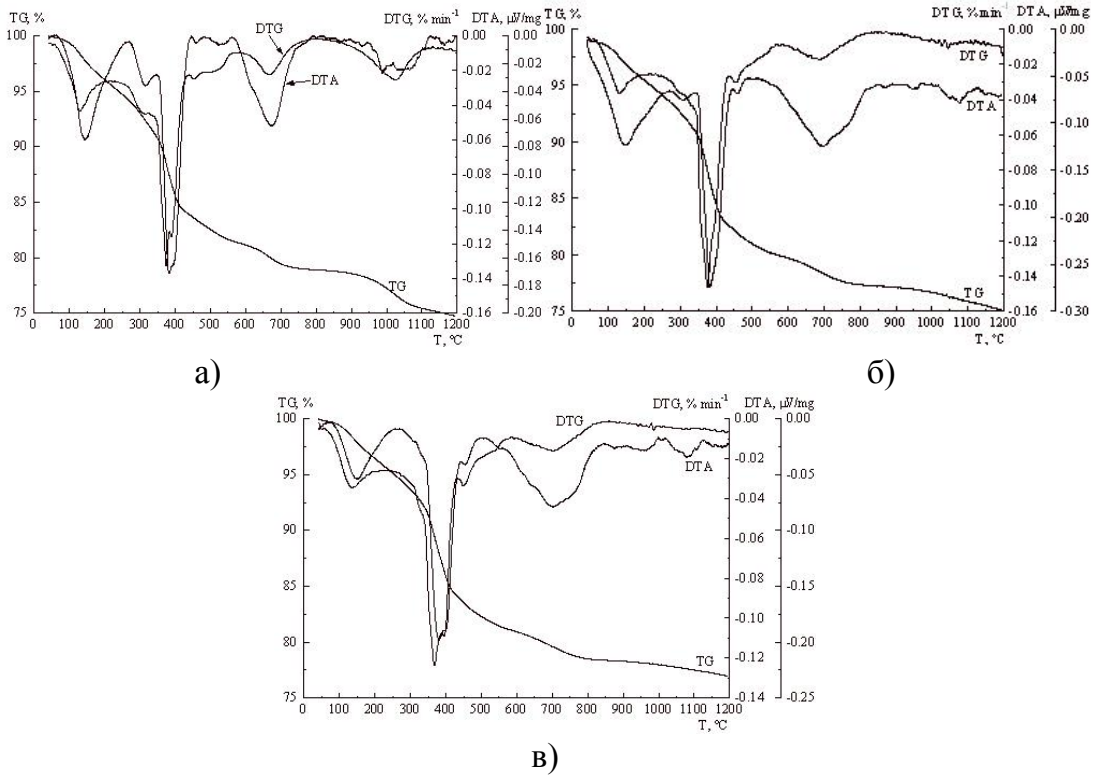


Рис. 3. Термоаналитические кривые образцов, синтезированных
а) при pH 8,5; б) при pH 9,0; в) при pH 9,5

С возрастанием pH синтеза наблюдается тенденция к снижению содержания в образцах адсорбированной углекислоты, что может объясняться уменьшением межплоскостного расстояния. Чётко выраженный пик на кривой DTG в интервале температур 820…1120 °C (рис. 2а), соответствующий, по данным масс-спектрометрии, отщеплению HCl, с возрастанием pH уменьшается (рис. 2б, в); общая потеря массы образцов также уменьшается с возрастанием pH синтеза. Это связано с уменьшением в образцах, полученных при более высоких значениях pH, доли хлоридных групп и соответственным возрастанием содержания гидроксо-групп.

Библиографический список

1. Nan Li, Kazumichi Yanagisawa Controlling the morphology of yttrium oxide through different precursors synthesized by hydrothermal method Journal of Solid State Chemistry. 2008. No. 181. Pp. 1738–1743.

2. Dupont, A. Size and morphology control of Y_2O_3 nanopowders via a sol–gel route / A. Dupont, C. Parent, B. Le Garrec, and J.M. Heintz // Journal of Solid State Chemistry. 2003. V 171. Pp. 152–160.

3. Li, T. Synthesis and characterization of branched yttrium hydroxide fluoride microcrystals with hierarchical tubular structure / T. Li, J. Wentao, S. Qiliang // Journal of rare earths. 2012. V 30, N. 4. P. 378.

4. Yudina, E.P. Analysis of products formed in hydrothermal processing of yttrium nitrate and yttrium chloride / E.P. Yudina, A.V. Frolova, I.V. Krivtsov, V.V. Avdin // Вестник ЮурГУ. Серия «Химия». – 2015. – Вып. 7. – № 1. – С. 51–54.

5. Yuanzhou Xi, Davis R. J. Intercalation of Ethylene Glycol into Yttrium Hydroxide Layered Materials. Inorg. Chem. 2010. No. 49. Pp. 3888–3895.

К содержанию

УДК 628.47(470.55)

СЕЛЕКТИВНЫЙ СБОР ОТХОДОВ КАК СПОСОБ РЕАЛИЗАЦИИ ЗАКОНОДАТЕЛЬНЫХ НОВЕЛЛ В ОБЛАСТИ ОБРАЩЕНИЯ С ОПАСНЫМИ ОТХОДАМИ

Т.Г. Крупнова, И.В. Машкова, А.М. Кострюкова

В Челябинской области по данным Росстата в последние годы образуется более 100 млн т отходов производства и потребления. Применение селективного сбора отходов является одним из способов решения этой проблемы. В данной работе предложена модель пластикового контейнера для селективного сбора отходов, пригодная для ежедневного употребления в домашних условиях.

Ключевые слова: селективный сбор отходов, отходы производства и потребления.

Каждый житель Российской Федерации ежедневно сталкивается с проблемой твердых коммунальных отходов (ТКО). Особенно актуальна проблема отходов для Челябинской области, в том числе токсичных [1, 2].

В настоящее время в Федеральный закон № 89-ФЗ от 24.06.1998 г. «Об отходах производства и потребления» внесены изменения (от 29 декабря 2014 г. № 458-ФЗ). В частности они касаются перехода на программный метод работы, когда в каждом регионе будут разрабатываться свои

схемы работы с отходами. В Законе введен термин твердые коммунальные отходы и появилась новая глава им посвященная. Основной мерой экономического стимулирования к переработке отходов стал утилизационный сбор. Закон нацелен на кардинальное изменение системе обращения с отходами. Законодательство устанавливает приоритет переработки отходов над захоронением. Предусмотрена передача полномочий по организации захоронений, обработки и переработки субъекту РФ. Изменения нацелены на создание административной системы госрегулирования в области обращения с отходами и сокращение объемов размещения отходов за счет введения механизма расширенной ответственности производителей. Будут созданы региональные структуры – региональные операторы, которые будут функционировать за счет средств, получаемых от применения тарифного регулирования в сфере услуг по обращению с отходами и субсидий из федерального бюджета.

В ближайшее время возникнет необходимость в разработке программы по организации сбора, сортировки, переработки и размещения отходов на территории Челябинской области, в том числе твердых коммунальных отходов. В настоящее время в Челябинской области развернута кампания по организации селективного сбора мусора. Реализуется несколько пилотных проектов, которые призваны расширить опыт местных органов управления в области управления отходами и наладить взаимодействие населения и власти. Но для того чтобы система селективного сбора отходов работала, просто поставить баки недостаточно. Зарубежный опыт показывает [3], что должна быть четко отработана логистика сбора мусора, его разделения и сортировки, вывоза и переработки. Для этого необходим целый комплекс, который необходимо начинать с первого этапа – селективного сбора отходов населением.

Пластиковые контейнеры для раздельного сбора мусора – новинка рынка Челябинской области. Многие семьи, офисы, общественные помещения не практикуют сбор раздельного мусора из-за лени, нехватки мест для раздельных контейнеров, а также за неуважением к окружающей среды. Нами разработан контейнер для селективного сбора отходов [4]. Предлагаемое изделие относится к предметам домашнего обихода. Оно предназначено для сбора отходов и их временного хранения перед утилизацией, для применения в быту, а также в различных помещениях общественного и коммерческого назначения, в которых персонал, посетители и присущие этим помещениям технологические процессы, продуцируют отходы с устойчивой периодичностью, но в недостаточно больших объёмах.

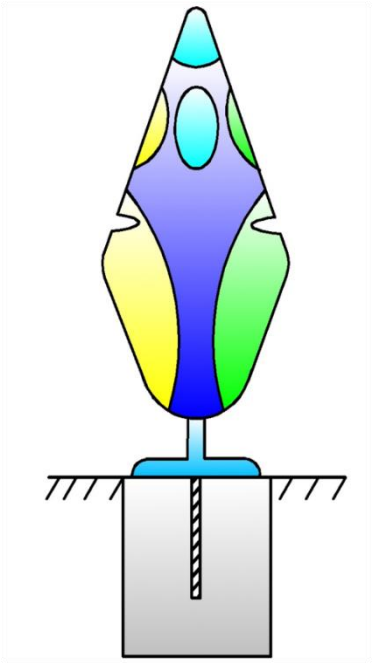
Конструкция предлагаемого изделия разработана для раздельного сбора мусора. Конструкция разделена на несколько отличающихся цветом секций для разных видов отходов. Секции для различных видов отходов выполнены в форме секторов, которые при соединении создают компактную

конструкцию. Особенность конструкции заключается в применении крышки контейнера с запорным устройством, совмещённым ручкой для его переноски, что позволило более рационально использовать имеющуюся площадь под размещение контейнеров, т.к. в направлении боковых плоскостей не требуется наличие зазора для установки ручки для переноски. Соединение отдельных секций в единый модуль происходит без применения специального защитного кожуха – вся конструкция держится за счёт взаимного упора отдельных элементов.

Изделие может состоять из двух, трёх и большего количества секций для сбора отходов. Причём, в зависимости от необходимости, секции могут быть выполнены разными по объёму (за счёт деления условного круга на неодинаковые сектора). Макет изделия представлен на рисунке.

Выпускаемое изделие будет использоваться как элемент воспитательной работы – устанавливая контейнеры по сборке раздельного мусора на улице в общественных местах, приучать людей к так называемому каждодневному «ритуалу» выбрасывания раздельно мусор.

Ключевым вопросом организации раздельного сбора отходов является поддержка его населением. Поэтому параллельно с установкой контейнеров необходима организация социальной рекламы (баннеры, информационные листы, освещение в СМИ). В информационно-рекламных мероприятиях следует рекламировать цветовую кодировку мусора.



Макет контейнера для селективного сбора мусора

Информация о наличии в торговых центрах услуги по приему вторичных ресурсов должна четко и ясно распространяться в магазине.

Способами распространения такой информации могут быть:

- красочный и качественно выполненный плакат в месте установки контейнеров;
- распространение аудироликов через средства громкой связи в торговом зале;
- демонстрация видеороликов на экранах информации при их наличии в торговом центре;
- информация на чеке о готовности торговой сети принять вторичные ресурсы у покупателей.

Службы информации и сотрудники торговых центров, ответственные за информирование покупателей, должны быть проинструктированы о наличии и месте расположения контейнеров для сбора вторичных ресурсов, а также о природоохранном значении селективного сбора отходов. Следует особо подчеркнуть, что эффект от внедрения селективного сбора отходов определяется активной позицией органов исполнительной власти.

Библиографический список

1. Зыбалов, В.С. Исследование содержания хлорорганических пестицидов в объектах окружающей среды на территории Челябинской области / В.С. Зыбалов, Т.Г. Крупнова // Вестник Южно-уральского государственного университета. Серия: «Химия». – 2014. – Т. 6. – № 3. – С. 39–43.

2. Машкова, И.В. Проблемы обращения с ртутьсодержащими отходами на территории Челябинской области / И.В. Машкова, Т.Г. Крупнова, А.М. Кострюкова // Модернизация и научные исследования в транспортном комплексе. – 2014. – Т. 1. – С. 301–304.

3. Крупнова, Т.Г. Зарубежный опыт обращения с твердыми бытовыми отходами (обзор) / Т.Г. Крупнова, А.М. Кострюкова, И.В. Машкова // Современная техника и технологии. – 2014. – № 8 (36). – С. 12–21.

4. Пат. 141782 Российская Федерация, МПК A47J 47/18. Контейнер для селективного сбора бытовых отходов / К.Г. Рязанова, Т.Г. Крупнова, А.М. Кострюкова. – 2014107263/12; заявл. 24.02.2014; опубл. 10.06.2014. Бюл. № 16. – 3 с.

К содержанию

УДК 628.16(470.55)

ПРИМЕНЕНИЕ ОЦЕНКИ ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА В ЭКОЛОГИЧЕСКОМ МЕНЕДЖМЕНТЕ ТЕХНОЛОГИЙ ПОДГОТОВКИ ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ

Т.Г. Крупнова, И.В. Машкова, А.М. Кострюкова, С.С. Юдаков

Статья содержит обзор публикаций по Оценке жизненного цикла технологий водоподготовки питьевой воды. В статье показано, что инструмент Оценки жизненного цикла может быть полезен для оценки различных воздействий на окружающую среду на протяжении всей технологической цепочки водоподготовки. В данной работе описано исследование ОЖЦ двух вариантов оптимизации существующих сооружений водоподготовки города Южноуральска. Для проведения ОЖЦ было использовано программное обеспечение Sima Pro 8.0.2.

Ключевые слова: Оценка жизненного цикла (ОЖЦ), сооружения водоподготовки, питьевая вода, традиционная водоподготовка.

В Российской Федерации обычно при выборе технологии подготовки воды питьевого качества специалисты руководствуются технологическими и экономическими показателями. В последние годы в мировой практике наметилась тенденция учета влияния технологий на состояние окружающей среды, а именно оценка выбросов в атмосферу, сбросов в водоемы, количества и возможности утилизации отходов и осадков, минимизации истощения природных ресурсов и потребления энергии. Таким образом, на выбор технологии водоподготовки накладываются не только технологические и финансовые ограничения, но и ограничения, связанные с охраной окружающей среды, энерго- и ресурсосбережением. Для прогнозирований такого рода воздействий используют инструментарий Оценки жизненного цикла (ОЖЦ). В настоящей работе нами проанализированы статьи, авторы которых используют метод ОЖЦ для выбора и сравнения технологии подготовки воды питьевого качества.

Первые работы по Оценке жизненного цикла появились в начале 1990-х [1], метод был воспринят научным сообществом неоднозначно и первоначально подвергался критике [2]. В дальнейшем метод получил существенное развитие и в гармонизированном виде оформился в виде международных стандартов ISO 14040 «Environmental Management. Life Cycle Assessment. Principles and Framework» и ISO 14044 «Environmental Management. Life Cycle Assessment. Requirements and Guidelines». Методологическая надежность метода значительно улучшилась с разработкой ряда руководящих принципов и учебных пособий [3–5]. В настоящее время существует

ряд международных инициатив по разработке дальнейших рекомендаций развития метода, разрабатывается в качестве самостоятельного метода Оценка стоимости жизненного цикла, Life Cycle Costing (LCC) [6].

ОЖЦ включает в себя четыре основных стадии: 1) определение цели, границ (пространственных и временных) и функциональной единицы (для исследований в области водоподготовки, как правило, в качестве функциональной единицы выбирают 1 $м^3$ воды соответствующего качества); 2) инвентаризация (Life Cycle Inventory, LCI); 3) оценка воздействий (Life Cycle Impact Assessment, LCIA), 4) интерпретация (Life Cycle Interpretation).

В РФ метод ОЖЦ применяется пока крайне редко, несмотря на имеющиеся стандарты [7]. В русскоязычной литературе последних лет рядом исследователей методология ОЖЦ была использована для анализа технологий переработки отходов [8] и очистки сточных вод [9].

В зарубежных исследованиях инструментарий ОЖЦ успешно используется для выбора технологии водоподготовки питьевой воды (Drinking Water Treatment LCA). В таблице представлена краткая информация о публикациях, отражающих результаты таких работ.

Таблица

Публикации по ОЖЦ технологий водоподготовки

Страна	Тип водоисточника	Цель работы	Ссылка
Нидерланды	Подземные воды	Сравнение традиционной технологии водоподготовки и технологии нанофильтрации	[10]
Южная Африка	Река	Сравнение традиционной технологии водоподготовки и технологии ультрафильтрации	[11]
Нидерланды	Подземные воды	Сравнение традиционной технологии водоподготовки и технологии обратного осмоса	[12]
Нидерланды	Польдер/ канал	Оценка традиционной технологии	[13]
Нидерланды	Поверхностные воды	Сравнение традиционной технологии водоподготовки и технологии нанофильтрации	[14]
Малайзия	Поверхностные воды	Сравнение традиционной технологии водоподготовки (два варианта: с использованием флотации и тонкослойного отстаивания) и технологии ультрафильтрации	[15]
Малайзия	Поверхностные воды	Оценка традиционной технологии	[16]

Во всех представленных в таблице работах в качестве функциональной единицы был выбран 1 $м^3$ воды питьевого качества (согласно законодательства соответствующей страны). Большинство исследований являются «gate-to-gate study» (область применения в пределах одного предприятия) и сфокусированные на одной стадии жизненного цикла.

Обычно проведение ОЖЦ требует использования программного обеспечения, например таких программ как SimaPro или GaBi. Эти программные продукты, как правило, включают в себя несколько инвентаризационных баз данных (European reference Life Cycle Data system, U.S. Life-Cycle Inventory database, Ecoinvent и др.), а также позволяют использовать различные методы оценки (Impact2002+, Traci, Ecoindicator и др.).

Часто используемым для оценки воздействий методов является [17, 18]. Eco-Indicator 99 предусматривает список из 11 показателей воздействии, которые отнесены к трем категориям воздействия, т.е. оценка осуществляется по трем видам причиняемого экологического ущерба:

1) здоровье человека (единица измерения – число заболеваний, вызванных экологическими изменениями);

2) качество экосистемы (единица измерения – количество видов растений, находящихся под угрозой исчезновения);

3) ресурсы (единица измерения – дополнительные затраты энергии, необходимые в будущем для компенсации низкого качества ресурсов).

Однако, при расчетах исследователи могут столкнуться с некоторыми ограничениями надежности ОЖЦ. Так как базы данных были разработаны, главным образом, в Европейском контексте, они, как правило, должны быть адаптированы к применению в других географо-экономических регионах. Другой важной проблемой является то, что не все процессы и реагенты, используемые в практике водоподготовки, включены в существующие базы данных.

Как видно из таблицы, наиболее часто к ОЖЦ прибегают в связи с широким внедрением передовых технологий водоподготовки. ОЖЦ позволяет сравнить классические апробированные технологии и новые, пока не имеющие широкой практики применения, спрогнозировать воздействия на окружающую среды, организм человека, визуализировать полученные результаты.

При интерпретации ОЖЦ производят определение проблем и предложений по улучшению технологий. Далее оценивают альтернативные варианты. Такой анализ чувствительности дает информацию о необходимости изменения технологии и проведения дополнительных исследований.

Челябинская область относится к регионам с наиболее напряженным состоянием окружающей природной среды [19], поэтому технологии водоподготовки, применяемые на ее территории требуют особого внимания. Нами ОЖЦ была использована выбора варианта реконструкции станции подготовки

питьевой воды города Южноуральска [20–23]. Для ОЖЦ использовалось программное обеспечение SimaPro 8.0.2. Применили метод оценки воздействий Eco-Indicator 99. В качестве функциональной единицы был выбран 1 $м^3$ питьевой воды, производимой в соответствии с требованиям СанПиН 2.1.4.1074-01 «Питьевая воды. Гигиенические требования к качеству воды централизованных систем питьевого водоснабжения. Контроль качества».

Таким образом, Оценка жизненного цикла является современным инструментом повышения энергоэффективности и ресурсосбережения, а также снижения негативного воздействия станций водоподготовки питьевой воды на окружающую среду и здоровье человека.

Библиографический список

1. Guine´e, J.B. Quantitative life cycle assessment of products: 1. Goal definition and inventory / J.B. Guine´e, H.A. Udo de Haes, G.Huppes // J. Clean. Prod. 1993. V. 1. Pp. 3–13.

2. Ayres, R.U. Life cycle analysis: a critique / R.U. Ayres // Resour. Conserv. Recycling. 1995. V. 14. Pp. 199–223.

3. Wenzel, H. Environmental Assessment of Products. vol. 1. Methodology, Tools, Techniques and Case Studies / H. Wenzel, M.Z. Hauschild, L. Alting. – MA.: Kluwer Academic Publishers, 1997. – 544 p.

4. Guine´e, J.B. Handbook on Life Cycle Assessment: Operational Guide to the ISO Standards / J.B. Guine´e. – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2002. – 693 p.

5. Baumann, H. The Hitch Hiker's Guide to LCA: An Orientation in Life Cycle Assessment Methodology and Application. / H. Baumann, A.-M. Tillman. – Lund: Studentlitteratur, 2004. – 544 p.

6. Recent developments in Life Cycle Assessment / G. Finnveden, M.Z. Hauschild, T. Ekvall et. al. // Journal of Environmental Management. 2009. V. 91. Pp. 1–21.

7. ГОСТ Р ИСО 14040-2010. Экологический менеджмент. Оценка жизненного цикла. Принципы и структура. – М.: Стандартинформ, 2010. – 24 с.

8. Трунова, Е.Ю. Формирование системы управления использованием отходов (на примере электронной промышленности): автореф. дис. … канд. техн. наук / Е.Ю. Трунова. – М., 2011. – 28 с.

9. Жильникова, Н.А. Повышение эффективности функционирования производственных систем в территориальных природно-технических комплексах: автореф. дис. … канд. техн. наук. / Н.А. Жильникова. – СПб, 2012. – 19 с.

10. Sombekke, H.D.M. Environmental impact assessment of groundwater treatment with nanofiltration / H.D.M. Sombekke, D.K. Voorhoeve, P. Hiemstra // Desalination. 1997. V. 113. Pp. 293–296.

11. Friedrich, E. Environmental life cycle assessment of potable water production. Master thesis of Chemical Engineering / E. Friedrich – South Africa: University of Natal, 2001. – 201 p.

12. Improving ecoefficiency of Amsterdam water supply: a LCA approach / P.K. Mohapatra, M.A. Siebel, H.J. Gijzen et. al // J Water Supp Res Technol Aqua. 2002. V. 51 (4). Pp. 217–227.

13. Environmental and financial life cycle impact assessment of drinking water production at Waternet / R. Barrios, M. Siebela, A. van der Helmb et. al // J. Clean Prod. 2008. V. 16. Pp. 471–476.

14. Comparative life cycle assessment of water treatment plants / A. Bonton, C. Bouchard, B. Barbeau , S. Jedrzejak // Desalination. 2012. V. 284. Pp. 42–54.

15. Sharaai, A.H. Life Cycle Impact Assessment (LCIA) of Potable Water Production in Malaysia: A Comparison among Different Technology Used in Water Treatment Plant / A.H. Sharaai, N.Z. Mahmood, A.H. Sulaiman // Environment Asia. 2010. V. 3(1). Pp. 95–102.

16. Sharaai, A.H. Life Cycle Impact Assessment (LCIA) in Potable Water Production in Malaysia: Potential Impact Analysis Contributed from Production and Contruction Phase Using Eco-indicator 99 Evaluation Method / A.H. Sharaai, N.Z. Mahmood, A.H. Sulaiman // World Applied Sciences Journal. 2010. V. 11 (10). Pp. 1230–1237.

17. Goedkoop, M. The Eco–indicator 99. A damage oriented method for Life Cycle Impact Assessment. Manual for designers / M. Goedkoop, S. Effting, M. Collgnon. – Amersfoort: PRe Consultants, 2000. – 34 p.

18. Goedkoop, M. The Eco–indicator 99. A damage oriented method for Life Cycle Impact Assessment. Methodology report / M. Goedkoop. – Amersfoort: PRe Consultants, 2000. – 132 p.

19. Зыбалов, В.С. Исследование содержания хлорорганических пестицидов в объектах окружающей среды на территории Челябинской области / В.С. Зыбалов, Т.Г. Крупнова // Вестник Южно-уральского государственного университета. Серия: «Химия». – 2014. – Т. 6. – № 3. – С. 39–43.

20. Модернизация технологической схемы подготовки питьевой воды для станции водоподготовки города Южноуральска / А.А. Литвинов, Т.Г. Крупнова, И.В. Машкова, А.М. Кострюкова // Экология и научно-технический прогресс. Урбанистика. – 2013. – Т. 1. – С. 144–151.

21. Литвинов, А.А. Разработка проекта реконструкции станции водоподготовки города Южноуральска / А.А. Литвинов, Т.Г. Крупнова // Водоочистка. Водоподготовка. Водоснабжение. – 2014. – № 5 (77). – С. 50–55.

22. Litvinov, A.A. Comparative study of different drinking water treatment technologies using life cycle assessment method / A.A. Litvinov, Krupnova T.G. // 14th SGEM GeoConference on Water Resources. Forest, Marine and Ocean Ecosystems, SGEM2014 Conference Proceedings, June 19-25, 2014. – Vol. 1, Pp. 127–134.

23. Крупнова, Т.Г. Оценка жизненного цикла в экологическом менеджменте технологий водоподготовки питьевой воды: практика применения // Т.Г. Крупнова, А.А. Литвинов // Сборник материалов XIII Международного научно-практического симпозиума и выставки «Чистая вода России», 17-19 марта 2015 года. – Екатеринбург, 2015. – С. 462–468.

К содержанию

УДК 546.1

ХАРАКТЕРИСТИКИ КОВАЛЕНТНЫХ И ГАЛОГЕННЫХ СВЯЗЕЙ МОЛЕКУЛ ЙОДА В КЛАСТЕРНОМ ПОДХОДЕ

С.Э. Насибуллина, Л.М. Булатова, Е.В. Барташевич

Выполнено теоретическое исследование характеристик ковалентных связей и нековалентных взаимодействий между атомами йода в структурах кластеров, состоящих из нескольких молекул I_2. Показано, что электронная плотность и плотности потенциальной и кинетической энергии в критических точках связей йода существенно меньше варьируют под влиянием вторичных взаимодействий, чем величины одноэлектронного потенциала, индексы делокализации электронов и атомной дипольной поляризации.

Ключевые слова: йод, нековалентные взаимодействия, галогенные связи, одноэлектронный потенциал.

Комплексы молекулярного йода с органическими соединениями отличаются структурным многообразием и имеют широкое практическое применение. Комплексы йода с органическими гетероциклическими соединениями, такими как замещенные феназины, тетратиофульвалены, представляют огромный интерес, так как обладают свойством электрической проводимости. Преимуществом медицинских препаратов молекулярного йода является широчайший спектр их противомикробного действия, а также отсутствие развития резистентности микроорганизмов к элементарному йоду.

Отличительной особенностью межмолекулярных взаимодействий с участием молекул йода и других галогенов является их способность формировать галогенные связи [1], которые выполняют важную структурообразующую функцию. Галогенная связь формируется между атомами-донорами электронов и атомами галогенов, которые выступают акцепторами электронов, благодаря наличию у них области повышенного электростатического потенциала, формирующейся на продолжении ковалентной связи галогена [2]. Среди всех галогенов наибольшей анизотропией электростатического потенциала обладают ковалентно связанные атомы йода. Галогенные связи йода являются предметом пристального внимания в области инженерии кристаллов.

Свойства ковалентных и галогенных связей с успехом могут изучаться с позиций QTAIM (Квантовой теории атомов в молекулах) [3]. Данный подход включает топологический анализ функции электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$, полученной с помощью квантово-химических расчетов или в ходе прецизионного дифракционного эксперимента. Плотности электронной энергии, вычисленные в критических точках электронной плотности $\rho(\mathbf{r_b})$, отвечающих связям, могут служить удобными характеристиками связей и использоваться для сравнения их прочности. Распределение лапласиана электронной

плотности $\nabla^2\rho(\mathbf{r})$ обычно наглядно иллюстрирует области концентрации электронов в атомных бассейнах, которые позволяют увидеть валентные оболочки атомов и выделить области наибольшего и наименьшего экранирования ядра внешней электронной оболочкой.

Лапласиан электронной плотности был одной из первых функций, которая объяснила структуру и организацию нековалентных взаимодействий в кристалле Cl_2 [4]:

$$\nabla^2\rho(\mathbf{r}) = \frac{\partial^2\rho}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\rho}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\rho}{\partial z^2}.$$

К сожалению, распределение лапласиана электронной плотности, вычисляемое для атомов йода во многих популярных базисных наборах, не информативно в отношении внешних электронных оболочек [5]. Поэтому для описания нековалентных взаимодействий йода используют функцию функция одноэлектронного потенциала $P(\mathbf{r})$ [6]:

$$P(\mathbf{r}) = \frac{1}{4}\frac{\nabla^2\rho(\mathbf{r})}{\rho(\mathbf{r})} - \frac{1}{8}\left[\frac{|\nabla\rho(\mathbf{r})|}{\rho(\mathbf{r})}\right]^2.$$

Основная цель данной работы заключается в теоретическом исследовании характеристик ковалентных связей и нековалентных взаимодействий между атомами йода в структурах кластеров, состоящих из нескольких молекул I_2. Рассматриваются одноэлектронный потенциал, индексы делокализации электронов и атомная дипольная поляризация, электронная плотность, плотности потенциальной и кинетической энергии в критических точках ковалентной связи йода, находящейся под влиянием варьирующихся нековалентных взаимодействий.

Определение геометрии стационарных состояний для молекулярных кластеров йода, моделирующих фрагменты упаковок, наблюдаемых в йодсодержащих кристаллах, выполнялась методом Кона-Шэма, с использованием функционала B3LYP и базисного набора 6-311G(d) в программе Firefly [7]. Для всех систем проводился анализ гармонических частот, который показал, что структуры отвечают локальным минимумам полной энергии. Все вычисления характеристик в критических точках связей, а также топологический анализ электронной плотности выполнены с помощью пакетов компьютерных программ AIMALL [8] и Multiwfn [9].

Рассмотрим закономерности изменений индексов делокализации в молекуле йода δ(I, I) для молекулярных кластеров, являющихся фрагментами упаковок, наблюдаемых в кристалле. В рассматриваемый ряд вошли кластеры из взаимодействующих молекул йода.

Пронаблюдаем, как изменяется индекс делокализации δ(I1, I2) I1–I2 ковалентной связи в молекуле йода, при ее вовлечении в нековалентные взаи-

модействия. Для этого проанализируем изменение характеристик этих связей в нескольких электронейтральных кластерах, состоящих из нескольких молекул йода и отличающихся структурной конфигурацией (рис. 1.). В нашем случае максимально насыщенный нековалентными взаимодействиями кластер содержит 7 молекул йода ($7I_2$), образующих укладку, подобную слою молекул, формируемых в кристалле йода. Два других кластера различаются тем, что либо один ($3I_2$), либо оба атома ($I_2 \cdot 2I_2$) центральной молекулы йода вовлечены в нековалентные взаимодействия с соседними молекулами.

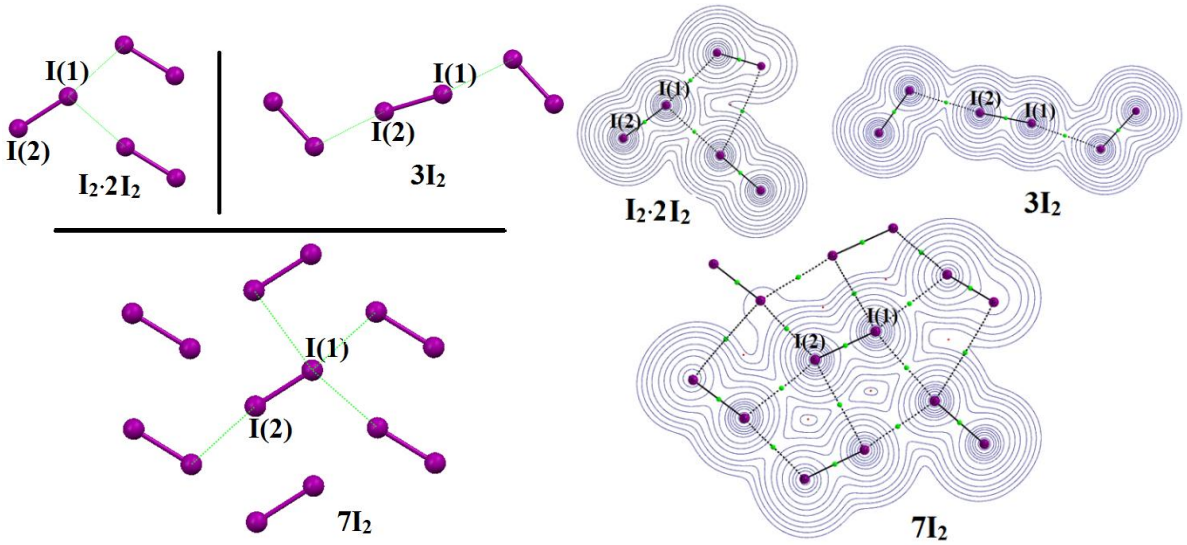


Рис. 1. а) Структура кластеров из взаимодействующих молекул йода, б) контуры электронной плотности, связевые пути и критические точки электронной плотности

Таблица 1

Индексы делокализации электронов, характеристики в критических точках ковалентных связей йода (ат. ед.), межатомные расстояния (Å)

Кластер	δ(I1, I2)	$\rho(\mathbf{r}_b)$	$\nabla^2\rho(\mathbf{r}_b)$	$P(\mathbf{r}_b)$	$g(\mathbf{r}_b)$	$v(\mathbf{r}_b)$	R I1–I2
I_2	1,335	0,068	-0,004	-0,015	0,0198	-0,0406	2,7375
$I_2 \cdot 2I_2$	1,263	0,067	-0,001	-0,004	0,0195	-0,0391	2,7570
$3I_2$	1,248	0,066	-0,000	-0,000	0,0192	-0,0385	2,7642
$7I_2$	1,195	0,065	0,002	0,009	0,0192	-0,0378	2,7760

Как показывает таблица 1, характер вовлеченности молекулы в нековалентные взаимодействия существенно сказывается на величинах индексов делокализации связи I1–I2. Разность индексов делокализации для связи I1–I2 в структуре $7I_2$ и в изолированной молекуле йода достигает $\Delta\delta = 0{,}140$, что сопоставимо по величине с индексом делокализации типичных галогенных связей I…I ($\delta = 0.179$) в этом же кластере. Таким образом, при учете внутрислоевых взаимодействий наблюдается существенное понижение ве-

личины δ(I1, I2) для ковалентной связи в молекуле йода. Индексы локализации λ(I1) рассматриваемого атома йода (I1) понижаются при вовлечении атома I1 в нековалентные взаимодействия очень слабо (всего на 0,4 %). Таким образом, индексы делокализации связей I1–I2 очень чувствительны к вовлеченности молекулы йода в нековалентные взаимодействия.

В кластерах $3I_2$, $I_2 \cdot 2I_2$, $7I_2$ электронная плотность в критических точках связей I1–I2 варьирует очень слабо (±0,002 ат. ед.). В то же время, лапласиан $\nabla^2\rho(\mathbf{r}_b)$ в критической точке электронной плотности для I1–I2, в рассмотренном ряду меняет знак, становясь положительным в кластере со множественными взаимодействиями $7I_2$.

Данные таблицы 1 показывают, что одноэлектронный потенциал $P(r_b)$ для связей I1–I2 в ряду I_2, $3I_2$, $I_2 \cdot 2I_2$, $7I_2$ коррелирует с величинами $\nabla^2\rho(\mathbf{r}_b)$. Однако для полного ряда связей йода I–I/I…I в более широком диапазоне, включающем ковалентные связи, эти функции ведут себя по-разному в зависимости от длин связей и типа взаимодействий йода (рис. 2).

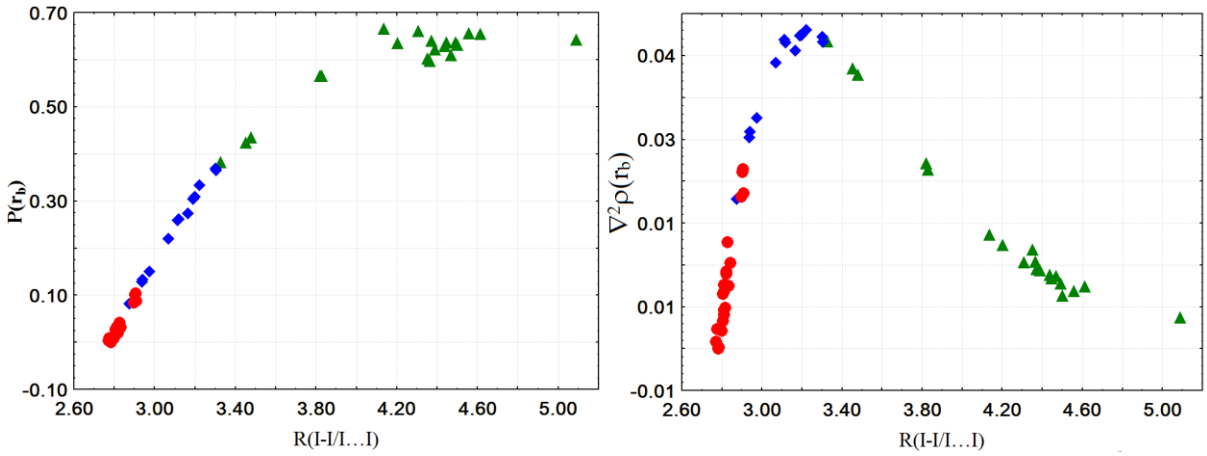


Рис. 2. Одноэлектронный потенциал $P(\mathbf{r}_b)$ (а) и лапласиан $\nabla^2\rho(\mathbf{r}_b)$ (б) в критических точках электронной плотности в йодсодержащих кластерах в зависимости от расстояний R(I–I/I…I)

По данным таблицы 1 плотность кинетической энергии электронов $g(\mathbf{r}_b)$ в критической точке ковалентной связи йода I1–I2 меньше зависит от вовлеченности молекул в нековалентные взаимодействия, тогда как плотность потенциальной энергии $v(\mathbf{r}_b)$ существенно зависит от этого фактора. Это наблюдение согласуется с тезисом о том, что величина $g(\mathbf{r}_b)$ является подходящим дескриптором для построения корреляционных зависимостей «топологические характеристики – физико-химическое свойство». В условиях использования моделей, типа корреляции Эспинозы [10], разработанной для водородных связей, величина $g(\mathbf{r}_b)$ будет более устойчивым фактором в моделях при вариациях окружения рассматриваемой молекулы.

Таблица 2

Индексы локализации электронов, атомный заряд (э), полная, внутри- и межатомная дипольная поляризация (ат. ед.)

Кластер	λ(I1)	L%	Q(I1)	M(I1)	M^{intra}(I1)	M^{inter}(I1)
I_2	52.33	98.74	0.0000	0.2059	0.2059	0.0000
$I_2 \cdot 2I_2$	52.25	98.58	-0.0046	0.1007	0.1839	0.2774
$3I_2$	52.30	98.62	-0.0362	0.0714	0.1866	0.1166
$7I_2$	52.11	98.32	0.0047	0.1652	0.1450	0.0573

Важно отметить, что полная атомная дипольная поляризация йода M(I1) (см. табл. 2), которая, как продемонстрировано в работе [11], является дескриптором прочности галогенный связей йода в условиях множественных нековалентных взаимодействий, существенно варьируется в рассматриваемом ряду. По сравнению с изолированной молекулой I_2, при учете влияния двух соседних молекул в $3I_2$, величина полного атомного дипольного момента M(I1) падает почти вдвое и растет в сформировавшемся симметричном окружении в комплексе $7I_2$.

Таким образом, использование димерных или кластерных моделей при сравнении свойств связей йода I–I/I…I, требует полного учета влияния на рассматриваемую молекулу её окружения, с которым она образует нековалентные взаимодействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации.

Библиографический список

1. Desiraju, G.R. Definition of the halogen bond (IUPAC Recommendations 2013) / G.R. Desiraju, P.S. Ho, L. Kloo, A.C. Legon, R. Marquardt, P. Metrangolo, A.P. Politzer, G. Resnati, K. Rissanen // Pure Appl. Chem. 2013. V. 85. No. 8. Pp. 1711–1713.

2. Politzer, P. Perspectives on halogen bonding and other σ-hole interactions: Lex parsimoniae (Occam's Razor) / P. Politzer, K.E. Riley, F.A. Bulat, J.S. Murray // Comput.Theor.Chem. 2012. V. 998. P. 2.

3. Бейдер, Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория / Р. Бейдер. – М.: Мир, 2001. – 532 с.

4. Tsirelson, V.G. Topological definition of crystal structure: determination of the bonded interactions in solid molecular chlorine/ V.G. Tsirelson, P.-F. Zou, T.-H. Tang, R.F.W.Bader // Acta Crystallogr. A. 1995. V. 51. Pp. 143–153.

5. Kohout, M. Contribution to the electron distribution analysis. I. Shell structure of atoms / M. Kohout, A. Savin, H. Preuss // J. Chem. Phys. 1991. V. 95. Pp. 1928–1941.

6. Hunter, G. Conditional probability amplitudes in wave mechanics / G.Hunter // Int.J.Quant.Chem. 1975. V. 9. Pp. 237–242.

7. Granovsky, A.A. Firefly. – URL: http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html.

8. Keith, T.A. (2013) AIMALL, Version 13.10.19. Professional.

9. Lu, T. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer / T. Lu, F. Chen // J. Comp. Chem. 2012. V. 33. Pp. 580–592.

10. Espinosa, E. Hydrogen bond strengths revealed by topological analyses of experimentally observed electron densities / E. Espinosa, E. Molins, C. Lecomte // Chem. Phys. Lett. – 1998. – Vol. 285. – Pp. 170–173.

11. Bartashevich, E.V. Atomic Dipole Polarization in Charge-Transfer Complexes with Halogen Bonding / E.V. Bartashevich, V.G. Tsirelson // Phys. Chem. Chem. Phys. 2013. V. 15. Pp. 2530–2538.

К содержанию

УДК 665.65 + 546.2

ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ СЕРНИСТЫХ НЕФТЯНЫХ КОКСОВ В ТЕХНОЛОГИИ ГРАФИТИРОВАННОЙ ПРОДУКЦИИ

Б.Ш. Дыскина, Д.А. Салихов

В работе показано влияние десульфуризации регулярных неигольчатых коксов на трещинообразование (брак) и удельное электросопротивление (сортность) графитированных электродов. Установлены аналитические зависимости этих показателей от содержания серы в прокаленной смеси сернистых и малосернистых коксов. Выявлены граничные факторы оптимизации приготовления и прокаливания смесового кокса.

Ключевые слова: нефтяной кокс, сера, вспучивание, графитированный электрод, трещины, удельное электросопротивление.

Традиционная технология изготовления графитированной продукции в электродной промышленности России складывалась на сырьевой базе, состоящей из нефтяных регулярных коксов с содержанием серы до 1,0 %, импортных игольчатых – с серой 0,3–05 % и среднетемпературного каменноугольного пека в качестве связующего [1]. В нефтяных коксах российского производства минимальное содержание серы 1,5 %. В работе [2] констатируется факт, что в РФ не производится игольчатый кокс, необходимый для изготовления высокоплотных крупногабаритных графитированных электродов, работающих в мощных электросталеплавильных печах; не производится электродный кокс с серой менее 1,0 % – для рядовых графитированных электродов. Отсутствие таких коксов российская промышленность покрывает за счет импорта. В современных геополитических условиях заметно актуализировалась проблема вовлечения отечественных коксов с повышенным содержанием серы в технологию производства графитированных электродов.

Производство графитированных электродов – многооперационный процесс, включающий: приготовление полигранулята заданного гранулометрического состава кокса прокаленного при температурах 1200–1300 °С; дозирование и смешивание компонентов; прессование заготовок; обжиг прессованных заготовок в восстановительной среде при температурах 900–1000 °С; охлаждение обожженных заготовок; графитирование обожженных заготовок при температурах 2400–2600 °С; охлаждение и разбраковка графитированных заготовок; механическая обработка; определение сортности по удельному электросопротивлению (УЭС) графитированныхэлектродов [3]. Повышенное содержание серы в коксах на переделах смешивания, прессовании и обжига практически не влияет на качество заготовок [4]. На переделе графитации – повышение брака по трещинам графитированных заготовок пропорционально содержанию серы в коксе. Получена линейная зависимость брака по трещинам (Б, %) графитированных заготовок для электродов сечением 300–400 мм от содержания серы в коксе (S, %):

$$Б = 25\ (S - 0{,}6). \qquad (1)$$

Из этого следует, что графитирование без трещинообразования может быть гарантировано для заготовок на основе малосернистых коксов с содержанием серы 0,6 % и менее. Однако нормативно-техническими документами [5, 6] для коксов, предназначенных для графитированной продукции, лимитирован верхний предел массовой доли серы – 1,0 %. Это означает, что товарный кокс априори может до 10 % обусловить брак по трещинам графитированных заготовок. При увеличении серы в коксе до 1,5 % доля брака графитированных заготовок электродов диаметром 400 мм может превысить 20 %. При промышленном опробовании нефтяного кокса с содержанием серы 1,7 % в технологии графитированных электродов сечением от 300 до 555 мм получен брак, возрастающий с увеличением сечения электродов (табл. 1). Причем графитированные электродные заготовки при разгрузке печи разваливались на части.

Таблица 1

Выход годных графитированных заготовок разных сечений

Сечение, мм	300	350	400	450	500	555
Выход годных графитированных заготовок, %	72	59	48	35	15	0
Брак, %	28	41	52	65	85	100

Одним из способов вовлечения сернистых коксов является разбавление малосернистыми коксами с серой менее 1,0 % до получения коксовой смеси с аддитивным содержанием серы до 1,0 %. При этом могут быть использованы: схема смешения «сырых» непрокаленных коксов с последующим прокаливанием полученной смеси (вариант 1) или схема смешения предварительно прокаленных коксов (вариант 2).

Для получения смесового кокса использовали «сырые» коксы с содержанием серы от 0,4 до 2,3 %, полученные на разных нефтеперерабатывающих заводах из различных нефтяных остатков (табл. 2). Затем смесь прокаливали в промышленных камерных печах. В результате получили малосернистый, малозольный прокаленный смесовый кокс с меньшим значением действительной плотности, чем можно было получить на исходных коксах, прокаленных при 1300 °С в течение 5 часов. Из чего можно судить, что температура промышленной прокалки была ниже, чем 1300 °С.

Промышленное опробование прокаленной смеси проведено в действующей технологии производства графитированных электродов сечением от 300 до 710 мм. Сортность графитированных электродов определяется величиной УЭС, определенной вдоль оси прессования. Чем меньше УЭС электродов, тем выше сортность и дороже электроды. Требования по УЭС для рядовых электродов диаметром 225–700 мм на коксах с серой не более 1,0 % находятся в пределах 7,0–11,0 мкОм м.

Для электродов на основе прокаленной смеси выявлено, что УЭС электродов диаметром 400 мм возрастает пропорционально повышению аддитивного содержания серы ($S_{адд}$, %) в смеси:

$$УЭС_{\varnothing 400\ мм} = 8{,}9 + 1{,}2\ S_{адд}. \quad (2)$$

Согласно уравнению (2), при аддитивном содержании серы 1,0 %, ожидаемый УЭС электродов диаметром 400 мм составит 10,1 мкОм м. С увеличением сечения графитированных электродов их УЭС растет пропорпорционально доле сернистого кокса (С) в прокаленной смеси с аддитивным содержанием серы не более 1,0 %:

$$УЭС_{\varnothing 500\text{-}710\ мм} = 8{,}9 + 1{,}1С. \quad (3)$$

Таблица 2

Характеристика «сырых» нефтяных коксов и прокаленной смеси

Сырье коксования	Сера, %	Зола, %	Действительная** плотность, г/см^3	Балл** структуры
Гудрон туркменских нефтей	0,5	0,4	2,09	4,3
Смесь* гудрона и крекинг-остатка	1,5	0,2	2,10	4,3
Смесь* дистиллятного и остаточного крекинг-остатков	2,1	0,5	2,08	4,5
Гудрон западно-сибирских нефтей*	2,3	0,3	2,07	4,1
Смесь* гудрона и асфальта	0,8	0,1	2,08	3,9
Гудрон парафинистых нефтей	1,4	0,3	2,08	3,9
Смесь прокаленных коксов, ТУ 38 10990-89 [5]	не более 1,0	не более 0,4	не менее 2,06**	4,2

Примечания. *Остатки западно-сибирских нефтей; **Для определения действительной плотности и балла микроструктуры сырого кокса пробу предварительно прокаливают при температуре 1300 °С с изотермической выдержкой 5 ч.

Из уравнений (2) и (3) видно, что смесь «сырых» коксов, составленная по принципу получения в прокаленной смесовой пробе массовую долю серы, равную 1,0 %, приводит к получению низкосортного графита с УЭС 10,1 мкОм м и более.

С целью снижения в лабораторных условиях провели опробование смеси нефтяных коксов с аддитивным содержанием серы 1,0 %, состоящей из малосернистого кокса с содержанием серы не более 1,0 % (предпочтительно не более 0,6 %) и сернистого – с содержанием серы 1,1–1,5 %. В качестве связующего использовали среднетемпературный каменноугольный пек [7]. Соотношение компонентов в массе:

– малосернистого нефтяного кокса 38–60 %;
– сернистого нефтяного кокса 20–38 %;
– каменноугольного пека 20–24 %.

Смесь прокаливали при температуре 1300 °С в течение 5 часов. Прокаленную смесь дробили, классифицировали по фракциям, дозировали, смешивали с каменноугольным пеком. Гранулометрический состав шихты соответствовал промышленному для электродов диаметром 400 мм. Отпрессовали заготовки диаметром 60 мм; обжигали при температуре 1250 °С; графитировали в промышленной печи. Брака не было. УЭС графитированных образцов составил 6,3–7,4 мкОм м.

При использовании сернистого кокса с содержанием серы 1,6 % или в количестве, превышающем 38 %, УЭС графитов возрастает на 20–33 %; при соотношении в сухой шихте сернистого и малосернистого кокса 1:1, прирост УЭС графита достигает 48 %.

Сера нефтяных остатков способствует ускорению внутри- и межмолекулярной конденсации, оказывает «сшивающее» действие, затрудняя взаимную ориентацию молекул и упорядочение структуры. Интервал интенсивного удаления серы из сернистых коксов 1400–2000°С [1, 2, 8]. Глубина десульфуризации растет с повышением исходного содержания серы, температуры обработки, изотермической выдержки и умельчения частиц кокса. Удаление серы сопровождает необратимый рост объемно-линейных размеров, пористости, трещиноватости. В зарубежной литературе процесс называют «puffing» или «sulphurpuffing», как результат внутреннего давления от спонтанного сброса серосодержащих газов. Из этого следует, что вспучивание может быть обусловлено хаотичным перемещением гексагональных плоскостей после снятия «сшивающего» эффекта серы.

В перспективе представляет интерес схема разбавления предварительно прокаленных сернистых и малосернистых коксов. Это позволит готовить контролируемые шихты не только по количеству, но и гранулометрическому составу с учетом особенностей технологии каждого сечения графитированных электродов.

Таким образом, в результате исследования показано влияние десульфуризации регулярных неигольчатых коксов на трещинообразование (брак) и удельное электросопротивление (сортность) графитированных электродов. Установлены аналитические зависимости этих показателей от содержания серы в используемой шихте кокса. Выявлены граничные факторы оптимизации приготовления и прокаливания смесового кокса.

Библиографический список

1. Мордухович, Б.Ш. Научные основы и опыт применения вспучивающихся коксов в технологии производства графитированных электродов: автореф. дис. … д-ра техн. наук / Б.Ш. Мордухович. – Уфа, 1999. – 48 с.

2. Ахметов, В.В. Получение малосернистых коксов из сернистых нефтей / В.В. Ахметов. – Уфа: Изд-во ГУП ИНХП РБ, 2010. – 180 с.

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

4. Мордухович, Б.Ш. Структурные превращения сернистых коксов и качество графитированных материалов / Б.Ш. Мордухович, Л.В. Ким // Сырьевые материалы электродного производства: Сб. науч. тр. / НИИграфит, ГосНИИЭП. – М., 1986. – С. 31–39.

5. ТУ 38 10990-89. Кокс нефтяной малосернистый прокаленный в камерных печах. – Изм. 1,2. без срока ограничения. – Сланцы, 1995.

6. ГОСТ 22898-78. Коксы нефтяные малосернистые.

7. А.с. 1452044. Шихта для изготовления графитированных электродов. 08.12.86.

8. Whittaker M.P., Grindstaff L.I. The irreversible expansion of carbon bodies during graphitisation. – Carbon. 1969. V. 7. № 5. Pp. 615–621.

К содержанию

УДК 661.666.2

ИССЛЕДОВАНИЯ В ОБЛАСТИ РАЗРАБОТКИ ОТЕЧЕСТВЕННОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ИЗОСТАТИЧЕСКОГО ГРАФИТА

Н.П. Нонишнева, А.В. Фролов

Физико-химические свойства и структура кокса-наполнителя, его гранулометрический состав и удельная поверхность являются одними из важнейших параметров в разработке технологии получения изостатического графита. Установлено, что для исследованных видов коксов резкое уменьшение диаметра частиц происходит через 2 часа измельчения. Для получения заданной крупности частиц менее 20 мкм время измельчения разное и зависит от структуры и свойств коксов. С увеличением времени измельчения растет удельная поверхность помола, величина которой также зависит от структуры и свойств кокса. Для проведения дальнейших исследований по влиянию свойств кокса и пека, а также их соотношения подготовлены тонкие помолы коксов с близкими значениями удельной поверхности.

Ключевые слова: изостатический графит, пековый кокс, нефтяной кокс, удельная поверхность, гранулометрический состав, крупность частиц кокса, время измельчения.

Изостатический графит относится к классу изотропных, высокоплотных, мелкозернистых конструкционных графитов и обладает высокими физико-механическими свойствами, химической и термической стойкостью в различных условиях его эксплуатации. Благодаря своим уникальным свойствам, изостатический графит применяется в атомной энергетике, авиационной и космической технике, металлургии и машиностроении, электронной и химической промышленности, ювелирном производстве, биомедицине, производстве элементов солнечных батарей, жидкокристаллических дисплеев, полупроводниковой техники и других отраслях промышленности.

Основной объем мирового производства изостатического графита (80 %) сосредоточен в США, Японии, Китае, Германии, Франции, Индии [1]. В России изостатический графит не производится и потребители вынуждены покупать его за рубежом.

Купить технологию производства изостатического графита практически невозможно, немногочисленные производители тщательно охраняют свою интеллектуальную собственность.

В связи с этим, разработка отечественной технологии получения изостатического графита является крайне актуальной, особенно в условиях настоящих экономических санкций, и позволит России войти в число ведущих стран-производителей изостатического графита.

Технология получения изостатического графита, как и других марок высокоплотных конструкционных графитов, состоит из подготовки пресспорошков на основе твердого углеродного наполнителя и связующего, прессовании с использованием изостатического пресса, обжиге и графитации [2, 3]. Секрет технологии состоит в правильном выборе кокса и пека, их соотношения, степени измельчения кокса и пресспорошка, режимов прессования, графиков обжига и графитации.

Как показал анализ литературных данных [4, 5], в мировой практике получения изостатического графита в качестве наполнителей используются анизотропные нефтяные и изотропные пековые коксы. Однако более высокое качество изостатических графитов получено при применении изотропного пекового кокса. В качестве связующего используется, в основном, высокотемпературный каменноугольный пек, с высоким выходом коксового остатка.

Одной из основных проблем решаемых при разработке технологии получения изостатического графита, является проблема получения заданного гранулометрического состава при измельчении наполнителя. С уменьшением размера частиц в диапазоне 3000-1 мкм прочность графитированной продукции на сжатие, изгиб и разрыв увеличивается в 5–6 раз, модуль упругости увеличивается в 2 раза [5]. Согласно литературных данных [6], для изготовления изостатических графитов с высокими физико-механическими показателями в основном используют коксы с зерном менее 1–20 микрон.

В данной работе представлены результаты исследования влияния свойств твердых сырьевых компонентов и времени их размола на гранулометрический состав и удельную поверхность.

Для проведения исследований были взяты прокаленные пековые коксы производства России и Китая, а также прокаленный нефтяной малозольный, малосернистый кокс. Физико-химические свойства коксов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Свойства коксов различных поставщиков

Основные характеристики	Пековый кокс Россия	Нефтяной кокс	Пековый кокс Китай
Плотность г/см^3	2,02	2,10	2,02
Содержание серы, %	0,2	0,4	0,15
Содержание золы, %	0,59	0,26	0,31

Размол коксов производился на лабораторной шаровой мельнице с различной продолжительностью помола для получения заданной крупности и сравнимой удельной поверхности порошка кокса. Масса загрузки материала

в шаровую мельницу составляла 1–1,2 кг, степень заполнения объема фарфорового стакана мельницы 33 %. При размоле использовались керамические мелющие тела – шары Ø43 мм.

Для анализа распределения частиц по размерам использовали метод лазерной дифракции на анализаторе размера частиц Cilas 1180 LD с обработкой в ультразвуке в течение 5 секунд (метод ISO 13320:2009 – Particle size analysis – Laser diffraction methods).

Время размола нефтяного кокса изменялось от 2 до 10 часов.

В таблице 2 и на рисунке 1 приведены результаты анализа распределения частиц тонкого помола по размерам пековых коксов России и Китая, а также нефтяного кокса в зависимости от времени измельчения.

Таблица 2

Результаты анализа распределения частиц коксов
по размерам в зависимости от времени измельчения

Продолжительность измельчения, час	Исходный материал	2	4	6	8	10
Диаметр частиц пекового кокса Россия, мкм	410,31	41,89	32,92	20,17	20,33	15,44
Диаметр частиц пекового кокса Китая, мкм	406,70	67,77	43,02	28,23	18,15	20,55
Диаметр частиц нефтяного кокса, мкм	412,96	69,16	44,86	32,31	20,32	20,94

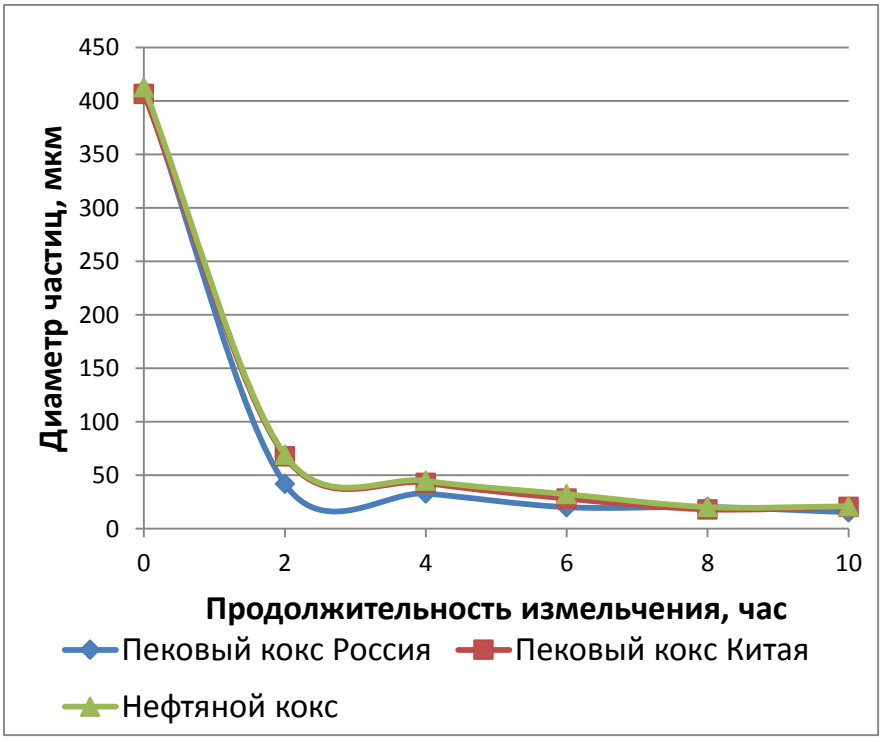


Рис. 1. Изменение крупности частиц тонкого помола коксов

Как видно из приведенных результатов, начальный размер коксовых частиц у всех видов кокса сопоставим и составляет ~ 400 мкм. Для всех выбранных видов кокса диаметр частиц резко уменьшается в первые 2 часа измельчения. При этом размер частиц пекового кокса России изменяется до 42 микрон, а пекового коса Китай и нефтяного кокса до 68–69 микрон. При выбранном режиме измельчения, для получения тонкодисперсного порошка наполнителя с содержанием частиц крупностью 20 мкм в количестве 90 % по объему, достигается в течение 6 часов измельчения для пекового кокса России и 8 часов измельчения для пекового кокса Китай и нефтяного кокса.

Для полученных тонких помолов кокса была, также, определена удельная поверхность. Измерения проводились с помощью низкотемпературной адсорбции азота динамическим методом на приборе Q-Surf – Multi-point Surface Analyzer в диапазоне измеряемых значений Syд. 0,5–1500 м2/г.

Результаты определения удельной поверхности для исследуемых коксов в зависимости от времени измельчения приведены в таблице 3 и на рисунке 2.

На рисунке видно, что с увеличением времени размола увеличивается удельная поверхность всех видов кокса. Нефтяной кокс и пековый кокс Китая при одинаковом времени помола имеют более низкую удельную поверхность, чем пековый кокс России.

Значение удельной поверхности является более представительным критерием для оценки поверхности тонкодисперсных порошков, т.к. учитывает особенности внутренней структуры материала

В соответствии с полученными результатами исследований, критерием в выборе наполнителя для получения коксо-пековых композиций изостатического графита являются доля частиц в диапазоне < 20 мкм и значение удельной поверхности.

Таблица 3

Результаты измерения удельной поверхности коксов различных производителей по методу BET ($м^2/г$)

Время измельчения, час	Удельная поверхность $м^2/г$		
	Пековый кокс Россия	Нефтяной кокс	Пековый кокс Китай
0	4,3	1,2	3,6
2	7,2	4,3	7,0
4	10,5	8,4	9,3
6	14,1	11,9	12,3
8	16,0	14,3	14,6
10	19,0	17,7	16,5

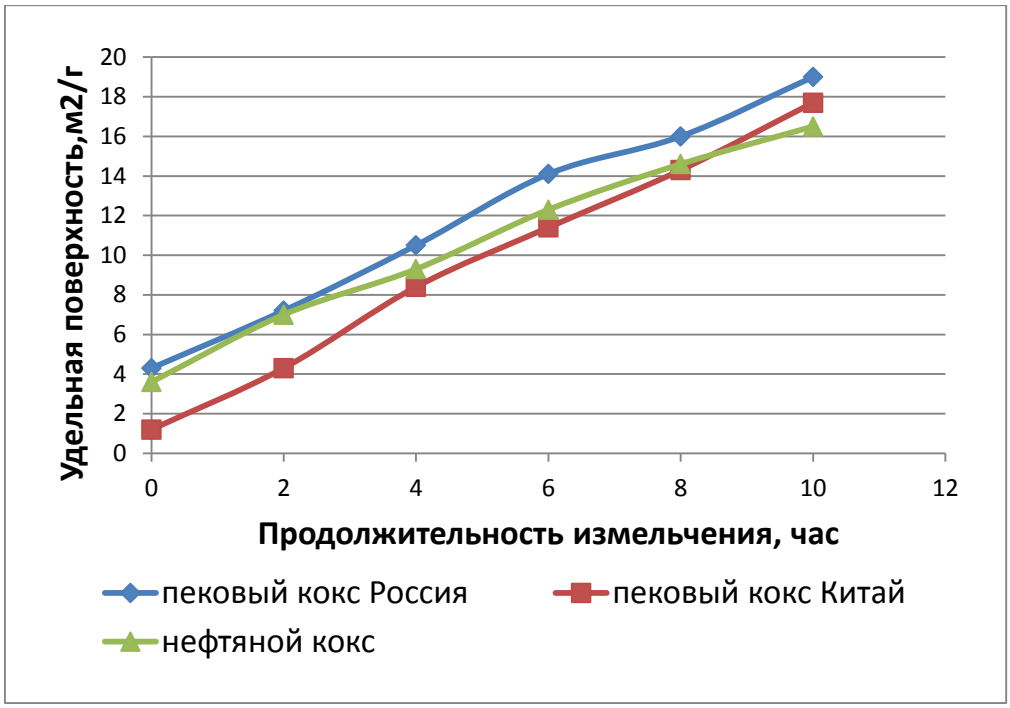


Рис. 2. Зависимость удельной поверхности кокса от продолжительности помола

Согласно этим критериям для дальнейших исследований влияния свойств коксов и каменноугольного пека, а также их соотношения, на свойства изостатического графита были выбраны коксы с близкими значениями удельной поверхности, достигнутые при различном времени измельчения:

– пековый кокс России с продолжительностью помола 6 часов и удельной поверхностью 14,1 м2/г;

– нефтяной кокс с продолжительностью помола 8 часов и удельной поверхностью 14,3 м2/г;

– пековый кокс Китая с продолжительностью помола 8 часов и удельной поверхностью 14,6 м2/г.

Библиографический список

1. Каталог «SGL Carbon Group». Fine grained graphite for industrial applications isostatically pressed and molded.

2.Фиалков, А.С. Процессы и аппараты производства порошковых углеграфитовых материалов / А.С.Фиалков. – М.: Аспект Пресс, 2008. – 687 с.

3. Процессы изостатического прессования: учебное пособие / под ред. П.Дж. Джеймса. – М.: Высшая школа, 1990. – 142 с.

4. Asao, O. High density isotropic graphites and glassy carbons. Japanese situation: production, properties and applicaitions / O. Asao // Introduction to carbon technologies. Ed. Marsh H., Heintz E.A. and Rodriques-Reinoso F. Alicante: Universidad de Alicante. Secretariado de Publicationes. 1997. P. 564.

5. Chard, W., Conavway M., Niesz O. Advanced high pressure graphite processing technology / W. Chard, M. Conavway, O. Niesz // Petroleum derived carbons. ACS Symposium series 21. Washington DC. 1979. P. 155.

6. Пат. 2493098 Российская Федерация, МПК C01B31/04. Способ получения изостатического графита / А.А. Лавренов, В.П. Фокин, №2012100051/05, заявл. 11.01.2012, опубл. 20.09.2013.

К содержанию

УДК 539.26:544.022.246 + 546.28

ПРОЦЕССЫ ДЕГИДРАТАЦИИ В СИСТЕМЕ SNO_2–SIO_2 РАЗЛИЧНОГО СОСТАВА

Т.В. Варламова, Д.М. Галимов, Д.А. Жеребцов, К.Р.Шамсутдинова

Методами термического и масс-спектрометрического анализа исследованы образцы ксерогелей в системе SnO_2–SiO_2 с молярными соотношениями компонент 9:1 и 1:9., Выявлена существенная разница в составах ксерогелей и процессах их дегидратации. На основании полученных данных сделан вывод о зависимости процессов структурообразования гелей (ксерогелей) от соотношения олова и кремния в исходных смешанных растворах.

Ключевые слова: функциональные материалы, оксиды олова и кремния, ксерогели, методы получения.

Системы на основе оксидов олова и кремния, привлекают внимание исследователей как функциональные материалы. Такие системы приобретают новые, либо улучшенные свойства, если получать их в виде нанокомпозитов. Например, сенсоры, полученные на основе нанокомпозитов из оксидов олова и кремния обладают более высокой чувствительностью по сравнению с материалами из индивидуального оксида олова [1]. На базе оксидов в системе SnO_2–SiO_2 возможно создание новых оптических и электронных устройств [2, 3]. В работе [4] сообщается об увеличении эффективности работы ионно-литиевых батарей при использовании анодов, включающих оксиды олова и кремния с размерами кристаллитов нанометрового размера. Согласно [5] нанокомпозиты в системе SnO_2–SiO_2 проявляют высокие каталитические свойства при окислении органических веществ.

Различные методы и условия получения оксидно-металлических материалов (объёмных и плёночных), как для индивидуальных оксидов, так и для композитов из двух и более оксидов приводят к тому, что брутто-химический состав (главным образом, степень гидратированности), степень кристалличности, морфология, структура на микро- или даже на ноуровне таких систем, и, как следствие, их электронные свойства, которые, в свою очередь, определяют функциональные свойства данных материалов, существенно различаются [6]. Системное исследование оксиднометаллических материалов различного состава в зависимости от способов приготовления –

важная научная задача, решение которой позволит в дальнейшем направлено получать функциональные материалы с высокими оптическими, электрофизическими и механическими параметрами, удовлетворяющими техническим требованиям потребителя.

В данной работе представлены результаты термического и масс-спектрометрического исследования образцов ксерогелей SnO_2–SiO_2, полученных высушиванием на воздухе соответствующих гелей при температуре 110°С в течение двух часов. Образец №1 имел молярное соотношение оксидов олова и кремния в своём составе 9:1, образец № 2 имел обратное молярное соотношение 1:9. Исходные гели были приготовлены из 0,62 М раствора $SnCl_2 \cdot 2H_2O$ (марки х.ч.) в абсолютированном изопропиловом спирте и тетраэтоксисилана (ТЭОС, $Si(OC_2H_5)_4$), которые при смешивании в указанных пропорциях в течение 10–12 дней переходили в прозрачные гели жёлтого цвета. Полученные ксерогели имели также жёлтый цвет и были полупрозрачными и высокопористыми.

Данные дифференциального термического анализа (ДТА) и термогравиметрии (ТГ) получены с помощью прибора синхронного термического анализа Netzsch STA 449C Jupiter. Одновременно с термическими исследованиями проводился анализ выделяющихся газов при помощи квадрупольного масс-спектрометра Netzsch QMS 403C Aeolos.

На рисунках 1 и 2 приведены термограммы, совмещённые с масс-спектрограммами, образцов ксерогелей SnO_2–SiO_2 №1 и № 2.

Во время термической обработки могут протекать различные процессы: испарение растворителей, разложение кислот и солей, деструкция полиорганосилоксанов и органических модификаторов, выгорание органических остатков, образование новых органических соединений, стеклование, окисление, а также кристаллизация и перекристаллизация новых фаз [7].

В образце №1 на кривой TG (рис. 1) можно выделить четыре температурные характеристические области потери массы: 23–129 °С, 129–374 °С, 374–627 °С и 627–1100 °С.

В интервале температур 23–129 °С масса образца уменьшается на 3,4 %. Основной летучий продукт при этом вода. На кривой DTA на этом этапе присутствует эндотермический эффект при 77 °С. Следует отметить, что на кривой DTAобразцы № 2, содержащего небольшое количество оловянной компоненты, данный эффект отсутствует. Указанному эффекту может соответствовать плавление остатков неразложившихся при высушивании ксерогеля солей, родственных кристаллогидрату $SnCl_2 \cdot 2H_2O$. Чистый $SnCl_2 \cdot 2H_2O$ плавится при 33,7 °С [8]. Согласно [9] при нагревании около 80 °С проходит реакция:

$$SnCl_2 \cdot 2H_2O = [Sn(H_2O)Cl_2] + H_2O.$$

Происходит плавление кристаллогидрата и образуется моногидрат $[Sn(H_2O)Cl_2]$. При дальнейшем нагревании проходит реакция:

$$7[Sn(H_2O)Cl_2] + 13H_2O \rightarrow [Sn_3(OH)_4]^{2+} + [Sn_4(OH)_6]^{2+} + 14Cl^- + 10H_3O^+.$$

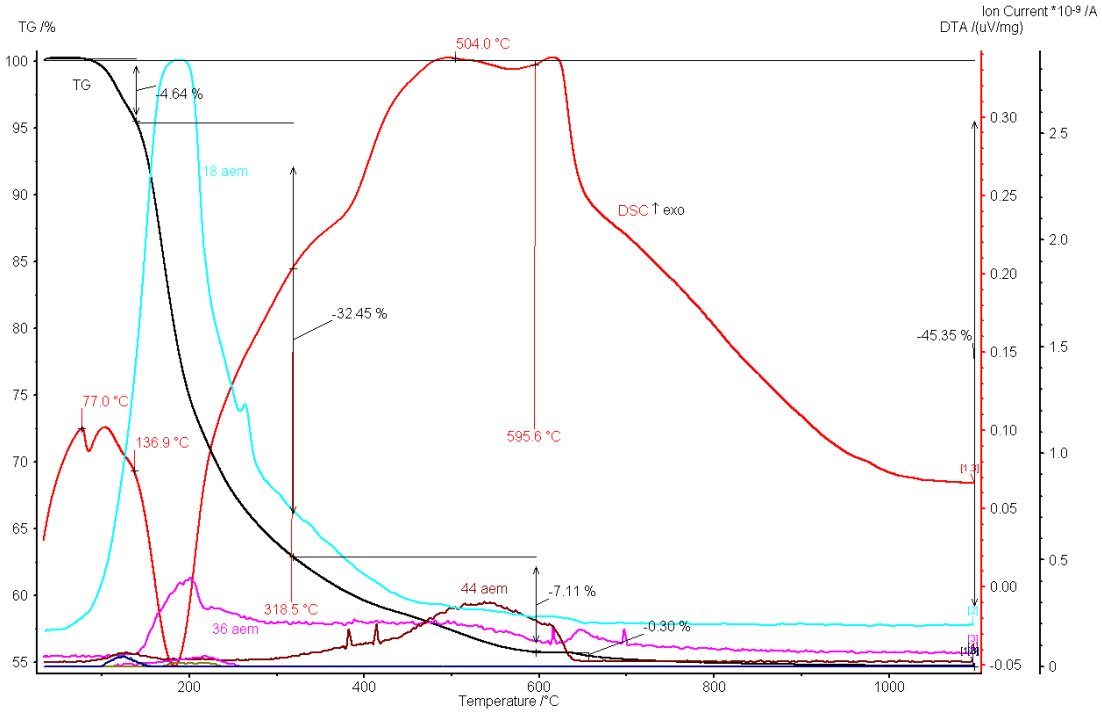


Рис. 1. Данные термического и масс-спектрометрического анализов образца № 1 – 90 SnO_2–10SiO_2

Протекание именно таких реакций подтверждается масс – спектрами воды и HCl в интервале температур 130–250 °C. Присутствие в образце № 1 частично гидролизованного ТЭОС, следов изопропанола и этанола делает процессы более сложными. Так в диапазоне 100–250 °C в газовой фазе доминирует H_2O и HCl, однако, наблюдается выделение молекул с массовыми числами 78 и 64. Массовое число 71,57 вероятно связано с Cl_2. Пик, отвечающий массовому числу 78 обнаруживается в образце № 1 и не обнаруживается в образце № 2. Температура максимума выделения молекулы с массой 78 соответствует 120 °C и отвечает началу выделения HCl (максимум при 190°C). Из известных литературных данных о гидролизе и выделении HCl при нагревании $SnCl_2 \cdot 2H_2O$ [9] можно предположить протекание реакции изопропанола с HCl с образованием хлорпропана, который имеет молекулярную массу 78 (образец № 1). В пользу предположения об образования C_3H_7Cl свидетельствует синхронное регистрирование с массовым числом 78 массового числа 64, которому может соответствовать C_2H_5Cl –продукт аналогичной реакции с этанолом (продуктом гидролиза ТЭОС).

В интервале 129–374 °C происходит потеря массы 36,19 %. Это основная потеря массы, которая связана с выделением H_2O, HCl и незначительного количества других летучих продуктов. На этом этапе имеется один эндотермический эффект с максимумом около 180 °C, соответствующий максимальному выделению H_2O и HCl. Аналогичный эндотермический эффект наблюдается на кривых DTA для гелей полученных, полученных старением золя на основе ТЭОС и растворов нитратов металлов [7].

Третий этап (374–627 °С) проходит с изменением массы 4,73 %. Это изменение массы сопровождается выделением CO_2 и экзотермическим тепловым эффектом. Данный этап связан с выгоранием углеродных остатков.

В интервале температур от 627 до 680 °С происходит потеря массы 0,45 %, сопровождающаяся повышением содержания HCl в атмосфере. Данный процесс можно объяснить испарением остатков $SnCl_2$, имеющего $T_{кип}$=652 °С [10].

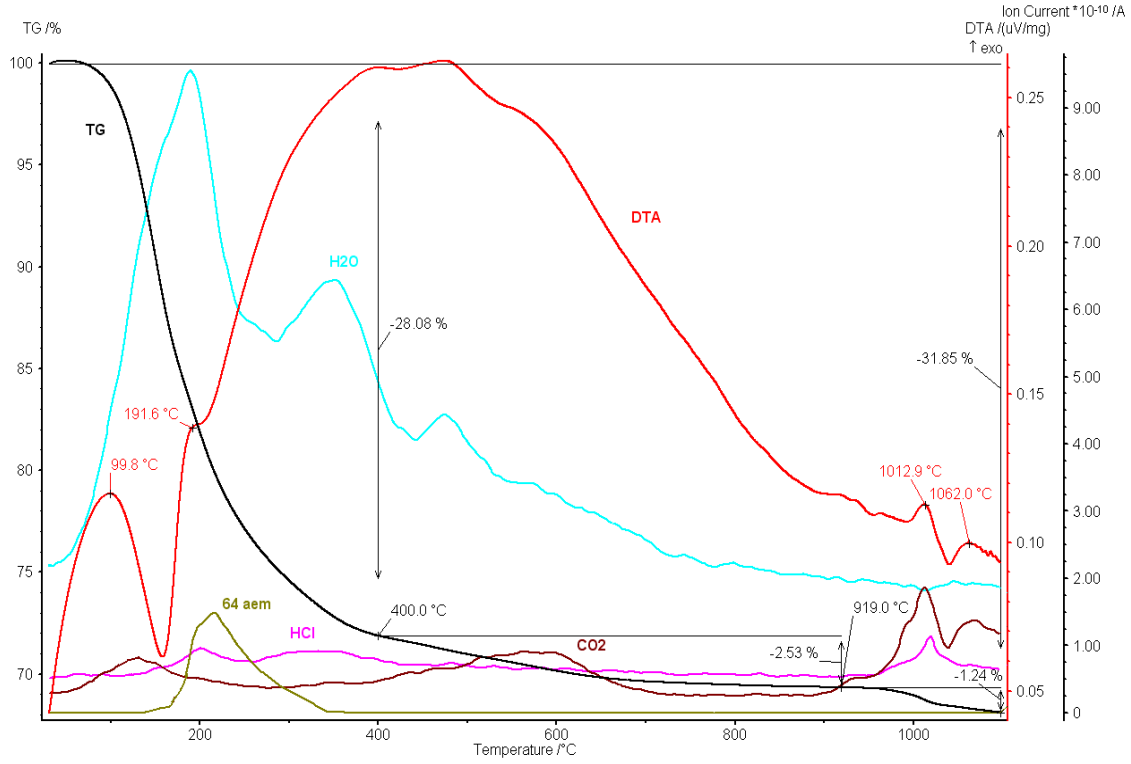


Рис. 2. Данные термического и масс-спектрометрического анализов образца № 2 – 10 SnO_2–90SiO_2

Образец № 2 (рис. 2) заметно отличается от образца № 1 по термическим превращениям. На кривой TG можно выделить три температурных интервала (этапа): 23–400 °С; 400–919 °С; 919–1100 °С.

На первом этапе (23–400 °С) в широком диапазоне температур проходит выделение H_2O, HCl и CO_2 и частиц с молекулярной массой 64. Отличие от образца № 1 состоит в том, что количество летучих намного меньше. Общая потеря массы образца № 1 равна 45,35 %, а образца № 2 – 31,85 %. Образец № 2 имеет максимум выделения воды около 190 °С, причем этот максимум примерно в 3 раза менее интенсивный, однако, захватывает гораздо больший диапазон температур. Потере H_2O соответствует эндотермический тепловой эффект с максимумом около 160 °С, близкий аналогичному эффекту для образца № 1 при температуре максимума 180 °С Максимум выделения HCl находится около 200 °С.

Отсутствует широкая размытая полоса, отмечающая выделению HCl вплоть до 650 °С в отличие от масс-спектрограммы образца № 1.

Второй этап (400–919 °С) сопровождается незначительной потерей массы 2,53 % и обусловлен прежде всего потерей воды и незначительным выделением CO_2. Это, наряду с отсутствием теплового экзотермического эффекта говорит о незначительном количестве ококсованных углеродных остатков, что отличает образец № 2 от образца № 1.

Третий этап (919–1100 °С) сопровождается потерей массы 1,24 % и выделением HCl и CO_2, а также экзотермическим тепловым эффектом с максимумом 1013 °С. Происходящие на этом этапе процессы сложно объяснить. Во-первых, процессы окисления углерода активно проходят уже выше 600 °С. В образце № 2, так же как и в образце № 1, окисление углеродных остатков проходит при 450–650 °С и сопровождается широкими пиками выделения CO_2 (рис. 2). Во-вторых, для системы Sn – Si – Cl – O неизвестны соединения с температурой кипения выше 700 °С. Таким образом источников углерода и хлора при температуре 900 °С и выше теоретически быть не должно.

На основании полученных данных следует заключить, что процессы термодеструкции ксерогелей в системе SnO_2–SiO_2, среди которых доминирует процесс дегидратации, существенно различаются, что указывает на значительное отличие в процессах структурообразования гелей (ксерогелей). Более глубокая и точная интерпретация полученных результатов требует проведения дополнительных анализов рентгенфазовым и ИК-спектральным методами.

Библиографический список

1. Wang, Y. Grain size control of calcined SnO_2 nanocrystals: Raman study and room temperature ethanol sensing properties / Y. Wang, L. Dong , X. Jia, D. Chen, S. Guan // Jornal of Nanoscience and Nanotechnology. 2011. № 11. P. 3592.

2. Yisi Feng, Risheng Yao, Lide Zhang // Physica B. 2004. V. 350. P. 348.

3. S.N.B. Bhaktha, C. Armellini, F. Beclin et al, Photonics – 2008, Intern. Conference on Fiber Optics and Photonics, Dec.13–17, 2008, IIT Delhi, India.

4. Hyesun Kim, Jaephil Cho // Jornal of Materials Chemistry. 2008. V. 18. P. 771.

5. A.A. Yelwande, M.E. Navgire, D.T. Tayde, et al //South Africans Journal of Chemistry. 2012. V. 65. P. 131.

6. Belova, I.D. The Composition, Structure and Electronic Properties of Thermally Prepered Iridium Oxid Films / I.D. Belova, T.V. Varlamova, B.Sh. Galyamov, Yu.E. Roginskaya, R.R. Shifrina, S.G. Prutchenko, G.I. Kaplan, M.A. Sevostyanov // Materials Chemistry and Physics. 1988. V. 20. P. 39.

7. Максимов, А.И. Основы золь-гель-технологии нанокомпозитов: Монография / А.И. Максимов, В.А. Мошников, Ю.М. Таиров, О. Шилова. – СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2007. – 156 с.

8. Глинка, Н.Л. Общая химия / Н.Л. Глинка. – М.: Химия, 1985. – С. 505–509.

9. Химические свойства неорганических веществ / Р.А. Лидин, В.А. Молочко, Л.Л. Андреева. – М.: Изд-во Дрофа, 2007. – 637 с.

10. Спиваковский, В.Б. Аналитическая химия олова / В.Б.Спиваковский. – М.: Наука, 1975. – 245 с.

К содержанию

МАШИНОСТРОИТЕЛЬНЫЙ ФАКУЛЬТЕТ В г. МИАСС

УДК 53.043 + 536.424.1

АНАЛИЗ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ОБРАБОТКЕ МЕТАЛЛОВ

И.И. Антропов

Проведен анализ процессов, протекающих в поверхностном слое металлов при неразрушающей высокоэнергетической обработке. Приведены результаты реализации самосогласованной схемы расчета температурного поля и их сравнение с результатами экспериментальных исследований.

Ключевые слова: лазерная обработка, самосогласованный расчет, закалка, фазовый состав.

Введение

Повышение износостойкости и других эксплуатационных характеристик изделий является на сегодняшний день одной из задач, сохраняющих свою актуальность. Разработка новых методов высокоэнергетической обработки позволяет значительно снизить стоимость технологии модификации материалов по сравнению с традиционными методами при обеспечении повышенных характеристик. Этим обеспечивается значительная экономия материалов и энергетических ресурсов, как на этапе изготовления деталей, так и при их ремонте и восстановлении. При эксплуатации наиболее подвержен механическим и химическим нагрузкам поверхностный слой деталей, поэтому повышение его износостойкости является основной задачей при любом виде обработки.

Наиболее важным критерием, по которому делается выбор того или иного метода поверхностной модификации, является, как правило, обеспечение повышенной твердости за счет измельчения структуры. Однако поверхностные фазовые переходы сопровождаются рядом дополнительных эффектов, которые в комплексе могут как повысить, так и снизить время эксплуатации детали. В частности, изменение фазового состава неотъемлемо вызывает изменение реакционных характеристик поверхности, которые напрямую связаны с энергетическим состоянием поверхностного слоя. Кроме того, после обработки в поверхностном слое возникают знакопеременные механические напряжения, модуль изменения которых достигает значений до 600 МПа на достаточно малых (до 1 мм) протяженностях [1].

Использование высококонцентрированных поверхностных энергетических источников энергии является на сегодняшний день одним из наиболее

перспективных методов поверхностной обработки. Высокие скорости нагрева и охлаждения позволяют эффективно модифицировать микроструктуру поверхности. Инициировать процесс фазовой перестройки можно несколькими способами. Наиболее распространенными нетрадиционными методами являются использование плазмы, лазерного излучения или их комбинация. В зависимости от выбранного метода, возможна реализация обработки в непрерывном или импульсном режиме. Тепловые процессы при использовании различных источников подобны, причем наибольшая нестационарность процессов свойственна случаю лазерной поверхностной обработке. Это связано с тем, что закономерности протекания фазовых превращений при интенсивном тепловом воздействии существенно отличаются от превращений, сопровождающих традиционные методы обработки [2], что выражается, прежде всего, в смещении точек $\alpha \rightarrow \gamma$ превращений в условиях интенсивного нагрева.

Анализ процессов в поверхностном слое металлов при высокоэнергетической обработке

Рассмотрим процессы, сопровождающие лазерную поверхностную обработку. Механизм взаимодействия лазерного излучения с поверхностью металлов достаточно сложен и связан с действием ряда факторов, наиболее существенными из которых являются время воздействия (δt), временная форма лазерного импульса и плотность мощности на поверхности материала (q). Известно несколько режимов лазерного воздействия, имеющих особый характер. Первым из них (по интенсивности) является режим аномального рассеивания [3], который наблюдается при $\delta t \sim 10^{-8}$ с и $10^3 < q < 10^7$ Вт/см^2. Второй режим – чистого испарения (без прохождения через жидкую фазу) реализуется [4] при $\delta t \sim 10^{-8}$ с и $10^8 < q < 10^{10}$ Вт/см^2. При дальнейшем увеличении интенсивности свыше $q > 10^{12}$ Вт/см^2 происходит переход к ударно-волновому воздействию [5]. Увеличение длительности импульса при тех же значениях плотности мощности приводит к интенсивному выгоранию материала уже при $\delta t \sim 10^{-7}$ с и $q \sim 10^8$ Вт/см^2.

В металлах кванты излучения поглощаются электронами проводимости в слое толщиной $10^{-6}…10^{-5}$ см, что соответствует глубине проникновения излучения в материал. Энергия электронов проводимости возрастает, повышается температура электронного газа, которая постепенно выравнивается. Температура решетки вследствие отличия масс электронов и ионных остовов в течении некоторого времени сохраняется. Начиная с определенного момента времени, усиливается электрон-фононное взаимодействие, результатом которого является снижение температуры электронного газа и повышение температуры решетки. В течение около 10^{-11} с температуры электронного газа и кристаллической решетки выравниваются и тепловые процессы можно охарактеризовать совместной температурой.

Кроме того, известно, что при интенсивностях излучения q ~ 10^7 Вт/см^2 для коротких импульсов и q ~ 10^5–10^6 Вт/см^2 для импульсов длительностью от миллисекундной и более возникает приповерхностная плазма. Плазма существенно влияет на характер взаимодействия излучения с веществом. Это проявляется в том, что она сама частично или полностью поглощает лазерное излучение и тем самым изменяет его часть, которая попадает на обрабатываемую поверхность. С другой стороны, плазма выступает в роли буферного преобразователя энергии, поскольку сама начинает эффективно нагревать поверхность материала. Таким образом, при длительностях, характерных для неразрушающей лазерной обработки металлов, процессы в поверхностном слое могут рассматриваться в классической термодинамической постановке. При характерной для данного типа обработки цилиндрической симметрии постановка задачи лазерного нагрева имеет вид

$$\frac{1}{a}\frac{\partial}{\partial t}T(r,z,t)=\frac{\partial^2}{\partial r^2}T(r,z,t)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}T(r,z,t)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}T(r,z,t), \quad (1)$$

с граничными и начальными условиями

$$T(r,z,0)=0;\quad T(\infty,\infty,t)=0;\quad -\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\bigg|_{z=0}=q_0\cdot\varphi(r,z)\tau(t), \quad (2)$$

где a, λ – коэффициенты температуропроводности и теплопроводности, изменяющиеся нелинейно, $q(r,z,t)=q_0\cdot\varphi(r,z)\tau(t)$ – эффективный распределенный тепловой источник.

В инфракрасной и видимой области оптического диапазона металлы достаточно хорошо отражают электромагнитное излучение. Это вызвано рассеянием света на свободных электронах, концентрация которых в металлах составляет 10^{22}–10^{23} см$^{-3}$. В общем случае, можно выделить следующие механизмы поглощения [6]:

$$A=A_{внутр}+A_{внеш}=A_{Д}+A_{A}+A_{МЗ}+A_{ш}+A_{окс}+A_{деф}, \quad (3)$$

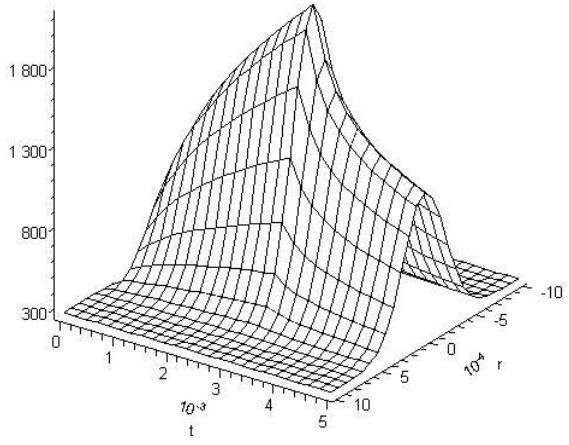
где $A_{внутр}$ – поглощение, обусловленное внутренними свойствами металла и состоит из нормального (по модели Друде) и аномального скин-эффекта, а также межзонными переходами;

$A_{внеш}$ – функция, обусловленная внешними (поверхностными) эффектами и включает в себя шероховатость поверхности, оксиды, включения и дефекты. Поведение коэффициента поглощения при высокоэнергетическом воздействии достаточно нелинейно и существенно зависит от пространственного и временного распределения плотности мощности. Однако, при рассмотрении задачи нагрева с учетом образования приповерхностной плазмы можно для длительного по времени нормально распределенного эффективного теплового источника, действующего в течение времени $0\le t\le\tau$ с последующим выключением, записать решение (1) в виде:

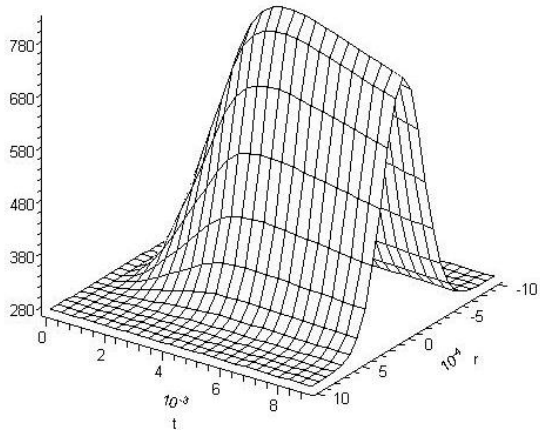
$$T(r,z,t)=\begin{cases}\dfrac{2\langle q\rangle e^{-kr^2}\sqrt{at}}{\lambda}\Phi^*\left(\dfrac{z}{2\sqrt{at}}\right) & при\ \ 0\le t\le\tau,\\ \dfrac{2\langle q\rangle e^{-kr^2}\sqrt{a}}{\lambda}\left(\sqrt{t}\Phi^*\left(\dfrac{z}{2\sqrt{at}}\right)-\sqrt{t-\tau}\,\Phi^*\left(\dfrac{z}{2\sqrt{a(t-\tau)}}\right)\right) & при\ t>\tau,\end{cases} \qquad (3а)$$

где $\Phi^*(\xi)$ – дополнение к интегралу вероятности, k – коэффициент пространственного сжатия, $\langle q\rangle$ – максимальное значение плотности эффективного теплового источника.

Учет нелинейности теплофизических параметров можно обеспечить использованием самосогласованного алгоритма расчета теплового фронта, при котором значение параметров определяются на предыдущем шаге определения температуры.



а)



б)

Рис. 1. Изменение температуры металла (сталь 45) со временем при действии лазерным излучением:
а) на поверхности,
б) на глубине 250 мкм

Результаты и их обсуждение

Обработке подвергались образцы, изготовленные из углеродистых и низколегированных сталей нескольких марок. Обработка проводилась в импульсном режиме по схеме без перекрытия зон теплового воздействия. Результаты исследования структуры и морфологических характеристик поверхности сравнивались с результатами моделирования процессов. Рассчитанные распределения температур для пятна обработки образца из стали ст45 приведены на рис. 1. Условия обработки: время облучения 3 мс, эффективная энергия излучения в импульсе 1,5 Дж, диаметр пятна излучения на поверхности материала 1 мм. Энергетические параметры излучения определялись по стандартным методикам, распределение интенсивности по апертуре близкое к нормальному.

Анализ результатов расчета для различных глубин показывает, что температура достигает начала аустенитного превращения за десятые доли миллисекунд для поверхности материала и около 1,2 мс на глубине 100 мкм; распад аустенита на этих глубина начинается практически одновременно через 7 мс после начала облучения. Таким образом, время выдержки при

температуре выше точки аустенитного превращения составляет около 5,5–7 мс, что достаточно для получения при дальнейшем охлаждении мелкодисперсной структуры.

Типичные микроструктуры, получаемые при лазерных скоростях нагрева углеродистых сталей, показаны на рис. 2. Характерной особенностью высокоскоростного фазового превращения является наличие границ зерен, характерных для исходной равновесной структуры. Протяженность переходных участков между областями с различным фазовым составом является функцией концентрации углерода в исходной матрице. Для низкоуглеродистых сталей характерны неравномерное распределение углерода по пятну обработки и снижение градиента концентрации неоднородности внутри пятна по сравнению с его значением снаружи пятна. Это объясняется тем, что процесс возникновения и роста новой фазы связан не только с установлением неравномерной концентрации примесей, но и стимулирует вынесение не периферию зоны обработки дислокаций. Можно отметить, что внутри зоны обработки также может наблюдаться увеличение концентрации неоднородностей. Как правило, это возникает при каком-либо повреждении обрабатываемой поверхности.

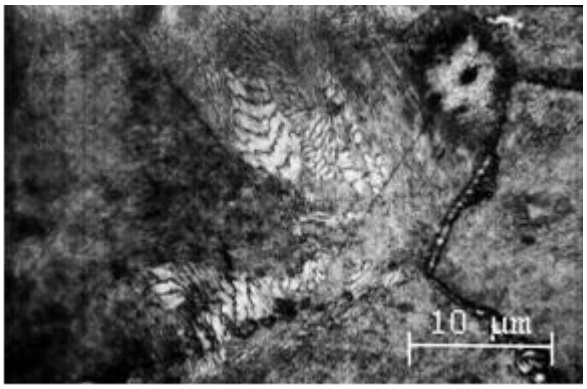
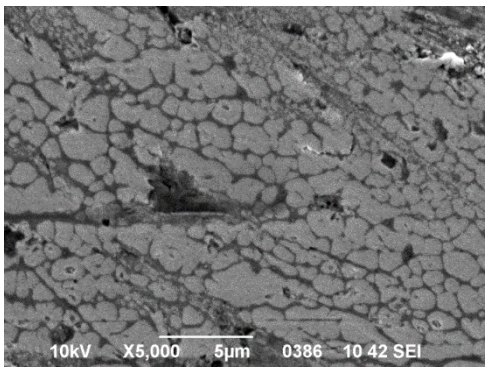
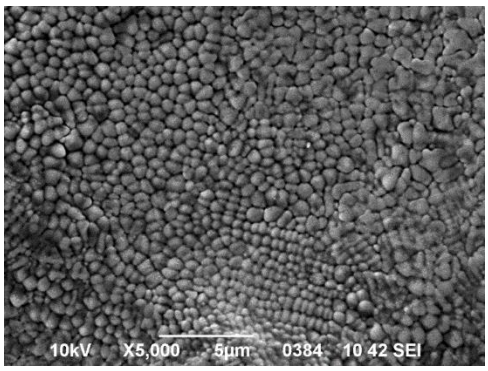


Рис. 2. Микроструктура поверхности стали 40Х после лазерной обработки, х1000



а)



б)

Рис. 3. Поверхность образца из ст45: необработанный (а) и обработанный (б) участки

Область обработки на поверхности можно условно разделить на три зоны. Автозакаленная (до 200 мкм) после окончания действия лазерного импульса находится в жидком состоянии и вследствие интенсивного (порядка 10^6 К/с) теплоотвода в ней происходит направленная кристаллизация и образуется дендритная структура. Во второй зоне (до 350 мкм) не происходит оплавления и происходит полная рекристаллизация с измельчением

зерна. В третьей области, где температура, достаточная для проведения полной закалки, не достигается, возможны два варианта протекания процессов: частичная закалка за счет переохлаждения зерен аустенита и перераспределение дефектов в пределах зоны обработки.

Глубина зоны структурных преобразований может быть определена на основании (3) по распределению температуры. Полученные оценки достаточно совпадают с результатами металлографического анализа поперечных микрошлифов с точностью до 10 %.

Необходимо также отметить, что локальная поверхностная обработка также сопровождается переплавкой тонкого поверхностного слоя. На рис. 3 приведено SEI-изображение центральной части зоны обработки на поверхности образца из ст45 до и после реализации лазерного упрочнения. В обработанных участках наблюдается образование достаточно упорядоченной глобулярной структуры с характерными размерами до 200 нм.

Таким образом, описанная математическая модель лазерного поверхностного нагрева достаточно хорошо согласуется с результатами экспериментальных исследований и может быть использована при определении режимов лазерной поверхностной закалки по требуемым параметрам зоны обработки. Для уточнения описанной модели возможно введение в (1) и (2) членов, учитывающих фазовые превращения и радиационные потери.

Библиографический список

1. Mor, G.P. Residual stresses measurements by means of x-ray diffraction on electron beam welded joints and laser hardened surfaces / G.P. Mor, R. Pezzoni // Proceedings of the 2nd International Conference on Residual Stresses ‘‘ICRS2”; ed. by G. Beck, S. Denis, A. Simon. – London: Nancy, Elsevier Applied Science. 1988. Pp. 696–702.

2. Бертяев, Б.И. О механизме $\alpha \rightarrow \gamma$ – превращения в Fe и углеродистой стали / Б.И. Бертяев // Вестн. Самарского гос. тех. ун-та. Серия физ.-мат. науки. – 2004. – № 26. – С. 151–158.

3. Анисимов, С.И. Действие излучения большой мощности на металлы / С.И. Анисимов, Я.Р. Имас, Ю.В. Хадыко. – М.: Наука, 1970. – 272 с.

4. Иванов, А.Ю. Испарительный режим лазерного воздействия на поверхность / А.Ю. Иванов, Г.Е. Скворцов // Письма в ЖТФ. – 2000. – Т. 26, Вып. 15. – С. 65–71.

5. Анисимов, С.И. Применение мощных лазеров для исследования вещества при сверхвысоких давлениях / С.И. Анисимов, А.М. Прохоров, В.Е. Фортов // УФН. – 1984. – Т. 142, № 3. – С. 395–434.

6. Laser heating of metals / A.M. Prokhorov, V.I. Konov, I. Ursu, N. Mihailescu. – Taylor & Francis. – 1990. – 240 p.

К содержанию

УДК 53.043

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА СТАЛЬНЫХ ИЗДЕЛИЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ ГАЗОРАЗРЯДНОЙ ПЛАЗМОЙ

И.И. Антропов

В работе рассмотрена задача нагрева стальных изделий неравновесной плазмой, зажигаемой между электролитическим катодом и обрабатываемым изделием. Приведены результаты расчета температур с учетом радиационных потерь поверхности. Приведенные экспериментальные результаты по распределению твердости материала показывают удовлетворительную сходимость с результатами моделирования.

Ключевые слова: электролитический катод, плазменная обработка, твердость.

Плазменная поверхностная обработка на сегодняшний день достаточно широко используется для поверхностного упрочнения стальных изделий. Это обусловлено такими характеристиками плазмотронов, как сравнительно низкая себестоимость оборудования и его эксплуатации, достаточно гибкий диапазон режимов обработки, которые могут заключаться не только в традиционной термообработке, но и в обеспечении легирования поверхности, высокая технологичность процесса. Основные типы плазмотронов уже стали традиционными, основные режимы работы выявлены, а исследования посвящены, в основном, задачам конструктивной оптимизации или использованию комбинированных методов, таких как лазерно-плазменная обработка.

Сравнительно недавно появилось новое направление развития плазменных генераторов, позволяющих создать неравновесную плазму между обрабатываемой поверхностью и жидким электродом. Применение такой схемы обработки позволяет значительно повысить КПД процесса при минимальных затратах на создание самой установки. В качестве материала для жидкого электрода в таких схемах используются различные растворы солей, концентрация которых позволяет регулировать режим обработки в достаточно широких пределах. Известно [1], что при сравнительно низких значениях напряжения между обрабатываемой деталью и электродом в устройстве реализуется электролиз, переходящий при повышении теплового потока в пограничное пузырьковое, а затем пленочное кипение с образованием парогазовой подушки. Типичные значения напряжений, подающихся на электрохимическую ячейку, при этом составляют 100–300 В. Протекающие процессы при этом позволяют реализовать азотирование или цементацию поверхности анода, закалку за счет погружения нагретой детали в электролит.

При повышении напряжения на электролитической ячейке до единиц кВ между электролитом и обрабатываемой поверхностью начинают развиваться многоканальный разряд, эффективно нагревающий обрабатываемую поверхность (рис. 1). Данная работа посвящена моделированию процесса нагрева поверхности анода получаемой неравновесной плазмой.

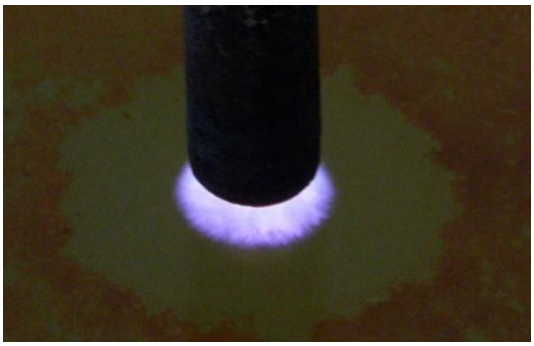


Рис. 1. Характер разряда при обработке

Для проведения обработки была использована установка, которая включает в себя регулируемый высоковольтный управляемый выпрямитель, L-C-фильтр и электрохимическую ячейку. На рис. 2 представлены вольт-амперные характеристики разряда для различных концентрации электролита от 0 до 0,6 вес% NaCl. Исследование распределения потенциала зондовым методом показало, что основное падение напряжения происходит на разрядном промежутке. Таким образом, представленные характеристики позволяют определить рабочие диапазоны и удельную интегральную мощность, вводимую в поверхностный слой.

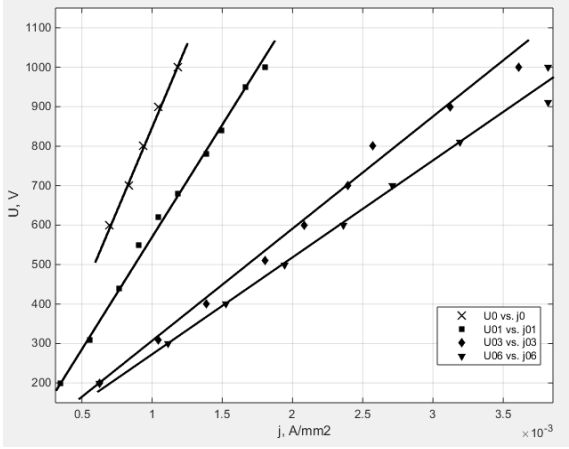


Рис. 2. Вольт-амперные характеристики для различных концентраций электролита

Задача плазменного нагрева при рассматриваемом методе обработки может быть описана уравнением теплопроводности в виде:

$$\rho c_p\left(\frac{\partial T}{\partial t}+\vec{u}\nabla T\right)=\nabla\left(k\nabla T\right)+Q, \quad (1)$$

где ρ – плотность обрабатываемого материала, c_p – удельная теплоемкость, k – теплопроводность, T – температура, Q – тепловой источник.

Начальные и граничные условия можно представить в виде:

начальные условия:

$$T\big|_{t=0}=T_0, \quad (2)$$

граничные условия для боковой поверхности:

$$-\vec{n}\left(-k\nabla T\right)=\varepsilon_1\sigma\left(T_0^4-T^4\right), \quad (3)$$

граничные условия для поверхности, соприкасающейся с плазмой:

$$-\vec{n}\left(-k\nabla T\right)=q_0+\varepsilon_2\sigma\left(T_0^4-T^4\right), \qquad (3a)$$

где T_0 – температура окружающей среды, ε – коэффициент черноты поверхности при температуре T, q_0 – тепловой поток через поверхность, контактирующую с плазмой.

Задача решалась на пространственной сетке методом конечных элементов. В качестве входных параметров модели использованы следующие значения:

– обрабатываемая деталь – параллелограмм с основанием 12x12 мм и длиной 50 мм;

– тепловой поток $4\cdot10^6$ Вт/м^2 подводится в основание;

– время обработки – 60 с.

Результаты определения температур представлены на рис. 3. Анализ представленных зависимостей показывает, что температура торцевой поверхности при нагреве может достигать температуры плавления. В основном массиве обрабатываемого изделия наблюдается неравномерное распределение температуры как в продольном направлении вследствие инерционности теплопроводности, так и поперечном направлении из-за конвекционных и излучательных потерь. Приведенные оценки показывают, что вследствие охлаждения разница температур боковой поверхности и центральной части образца может достигать 50 °С, что может существенно сказаться на распределении твердости поверхности при малых временах обработки поверхности.

Исходя из приведенных зависимостей для температуры, можно предположить возможность протекания фазовой перестройки в областях с температурой выше точки Ac_3 при осуществлении быстрого охлаждения образца.

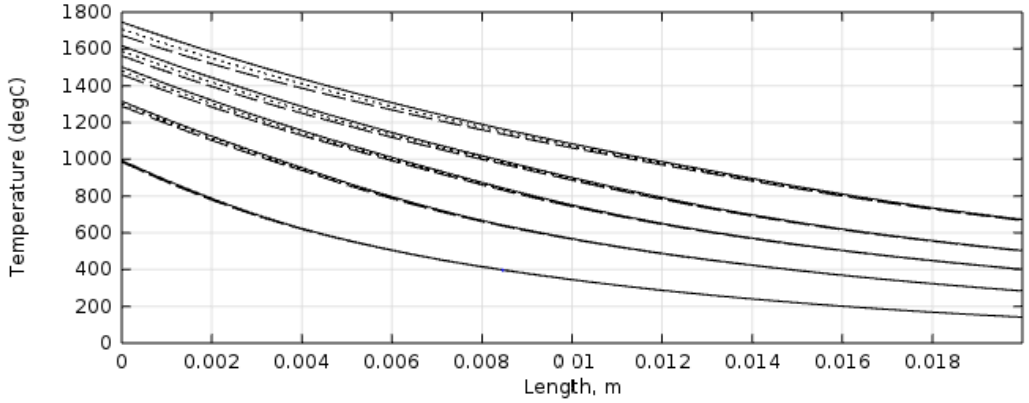


Рис. 3. Распределение температур вдоль образца по центральной линии (сплошные кривые), образующей (пунктирные кривые) и середине боковой стороны (точечные линии) для моментов времени 10 с, 20 с, 40 с, 60 с

Необходимо отметить, что представленная расчетная модель достаточно хорошо согласуется с проведенными экспериментами [2]. Так, при обработке визуально наблюдается большое количество областей спонтанной

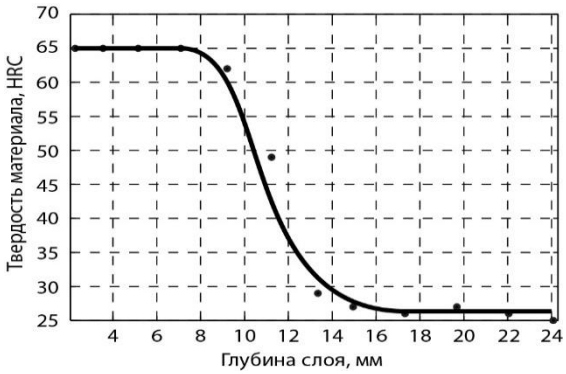


Рис. 4. Распределение твердости

контракции разрядных каналов и нагрев торцевой поверхности образца вплоть до температуры плавления. Протяженность области проплавления составляет несколько микрометров. Результаты исследования твердости (рис. 4) и микроструктуры поверхности после обработки также достаточно хорошо согласуются с результатами моделирования, протяженность зоны упрочнения соответствует рассчитанному распределению температур и для указанного режима составляет порядка 12 мм. Твердость образца при этом повышается до 4,5 раз по сравнению с необработанными участками.

В качестве дальнейшего направления исследований можно рассматривать введение в граничные условия (3) слагаемых, характеризующих конвективный теплообмен с окружающей средой и парами электролита.

Библиографический список

1. Ясногородский, И.З. Нагрев материалов и сплавов в электролите / И.З. Ясногородский. – М.: Государственное научно-техническое издательство машиностроительной литературы,1949. – 128 с.

2. Мурга, В.В. Использование плазмотрона с жидким катодом для упрочнения поверхности материалов / В.В. Мурга, Дж. Омеман, И.И. Антропов. – Алчевск: ДонГТУ, 2008. – С. 6.

К содержанию

УДК 544.48–143:535.375.5

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ТИТАНСОДЕРЖАЩИХ СТЕКОЛ ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

Г.Г. Кориневская

Структурное положение ионов титана в натриевотитаносиликатных системах различных составов изучено методом колебательной спектроскопии (методом спектроскопии комбинационного рассеяния света). Выполнена интерпретация спектров КР. Установлено, что титан может находиться в трех типах структурных единиц, проявляя координационные числа $^{[4]}$Ti, $^{[5]}$Ti или $^{[6]}$Ti в зависимости от состава. Структурные особенности титаносиликатных систем определяются закономерностями образования титанатной и силикатной составляющей и их взаимодействием.

Ключевые слова: структура, координационное число, титаносиликатные стекла, спектроскопия.

Введение. Исследованием титаносиликатных систем различных составов занимались многие ученые [1–4], исследования которых показывают, что изменение координационного числа титана на $^{[4]}$Ti, $^{[5]}$Ti $^{[6]}$Ti зависит от многих факторов, в частности, от состава и соотношения катиона-модификатора и катиона-сеткообразователя. Щелочная среда способствует стабилизации тетраэдрического титана и определяется соотношением кремния и титана. Повышение же кислотности среды (увеличение SiO_2) способствует стабилизации октаэдрического титана. Установлено, что в стеклах с высоким содержанием щелочных металлов добавление титана способствует увеличению полимеризованности структуры стекла, а в стеклах с их низким содержанием – ее деполимеризации. Наблюдаемое изменение структуры титаносиликатных стекол связано со структурным положением в неупорядоченной сетке стекла ионов титана, способных изменять координационное число от четырех до пяти и шести. Результаты исследований титаносиликатных систем по выявлению структурной роли титана и его координации, тем не менее, остаются весьма противоречивыми.

Целью нашего исследования являлось установление структурной роли титана в натриевотитаносиликатных стеклах различного состава, определение его координации, выявление конкурирующей роли титана и кремния как катионов-сеткообразователей.

Методика моделирования. Синтез титаносиликатного стекла проводился из аморфного SiO_2, TiO_2 и Na_2CO_3 квалификации «хч». Исходные реактивы предварительно высушивались в сушильной печи при 383 К в течение двух часов. Затем исходную шихту тщательно перемешивали в ступке

с этиловым спиртом, высушивали при температуре 383 К. Прокаленную смесь помещали в платиновый тигель и плавили в силитовой печи при температуре 1473 К до полной гомогенизации. Составы полученной титаносиликатной системы $Na_2O–SiO_2–TiO_2$ в разрезе с постоянным соотношением $SiO_2/Na_2O = 1,5$ и варьируемой концентрацией диоксида титана от 0–40 % представлены в таблице 1.

Таблица 1

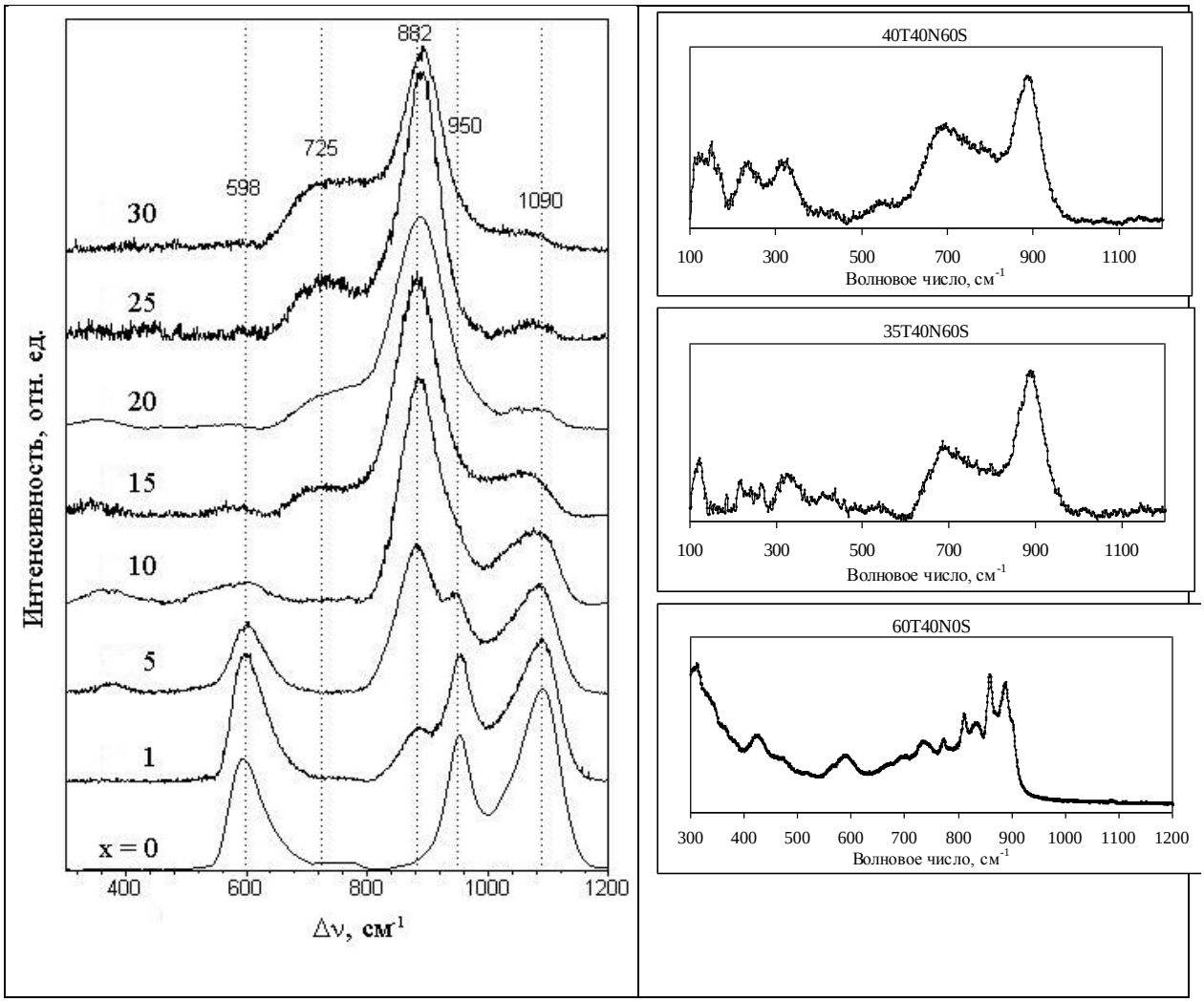
Химический состав синтезированных стекол

Обозначение образца	Состав, мол. %	Обозначение образца	Состав, мол. %
0T40N60S	0 TiO_2·40 Na_2O·60 SiO_2	20T40N60S	20 TiO_2·80(40 Na_2O·60 SiO_2)
1T40N60S	1 TiO_2·99(40 Na_2O·60 SiO_2)	25T40N60S	25 TiO_2·75(40 Na_2O·60 SiO_2)
5T40N60S	5 TiO_2·95(40 Na_2O·60 SiO_2)	30T40N60S	30 TiO_2·70(40 Na_2O·60 SiO_2)
10T40N60S	10 TiO_2·90(40 Na_2O·60 SiO_2)	35T40N60S	35 TiO_2·65(40 Na_2O·60 SiO_2)
15T40N60S	15 TiO_2·85(40 Na_2O·60 SiO_2)	40T40N60S	40 TiO_2·60(40 Na_2O·60 SiO_2)
		60T40N0S	60TiO_2·40 Na_2O·0 SiO_2

Исследование структурных особенностей полученных синтетических стекол проводили методами спектроскопии комбинационного рассеяния (КР). Для регистрации спектров комбинационного рассеяния исследуемых стекол использовали спектрометр iHR 320 Labram с микроскопом Olimpus BX41. Полученные спектры КР представлены (рис.).

Результаты и обсуждение. На рис. 1 представлены спектры КР титаносиликатных стекол и расплавов состава $xTiO_2 \cdot (100\text{-}x)[40Na_2O \cdot 60SiO_2]$, где ($0 \le x \le 40$). Нижний спектр на этом рисунке соответствует бинарному натриевосиликатному стеклу состава $40Na_2O{\cdot}60SiO_2$ (0T40N60S). Спектры КР стекол данных систем, как и спектры КР двухкомпонентных щелочносиликатных систем (0T40N60S), характеризуются присутствием двух групп интенсивных полос: в высокочастотной (1060–1100см$^{-1}$ и 930–960 см$^{-1}$) и низкочастотной (590–620 см$^{-1}$) областях спектра. Полосы в высокочастотной области спектра обусловлены соответственно валентными колебаниями концевых группировок $Si–O^-$ в структурных единицах Q^3 и $O^-–Si–O^-$ в структурных единицах Q^2. Полоса в низкочастотной области (400–700 см$^{-1}$) связана с симметричными валентными и частично деформационными колебаниями мостиковых связей Si–O–Si [5].

В спектрах КР стекол трехкомпонентных титаносиликатных систем $Na_2O–SiO_2–TiO_2$ наблюдается изменение интенсивностей полос, которые объясняется проявлением в системе титана. Интерпретация характеристических полос в спектрах комбинационного рассеяния титаносиликатных систем приведена в таблице 2.



Спектры стекол составов $xTiO_2 \cdot (100\text{-}x)\,[40Na_2O \cdot 60SiO_2]$, где $(0 \le x \le 40)$

Анализ спектров КР силикатных стекол исследуемых систем Na_2O–SiO_2–TiO_2 с наличием и отсутствием титана показывает, что положение максимума 1090 $см^{-1}$ высокочастотной области в присутствии титана смещается в более низкочастотную область. Положение максимума второй полосы данной области (950 $см^{-1}$) остается практически неизменным (до 10 мол.% TiO_2), а при дальнейшем увеличении содержания титана также смещается в более низкочастотную область. Положение максимума (600 $см^{-1}$) в низкочастотной области смещается в более высокочастотную область [6]. С увеличением содержания TiO_2 в тройной системе состава $xTiO_2 \cdot (100\text{-}x)\,[40Na_2O \cdot 60SiO_2]$ начинает существенно изменяться структурный рисунок спектра комбинационного рассеяния.

Таблица 2

Интерпретация характеристических полос

Область частот ($\Delta\nu$, $см^{-1}$)	Отнесение полос спектров КР
250-300	Колебания шестикоординированного атома титана TiO_6
540–630	Симметричные валентные и частично деформационные колебания мостиков Si-O-Si
600	Колебания шестикоординированного атома титана TiO_6
700–765	Колебания шестикоординированного атома титана TiO_6
750–840	Валентные колебания изолированных тетраэдров SiO_4 со всеми немостиковыми атомами кислорода (Q^0)
775-900	Валентные колебания, обусловленные колебаниями титанильной связи пятикоординированного атома титана TiO_5
805–855	Колебания концевых группировок тетраэдров, находящихся на конце цепочечной структуры конечного размера (Q^1)
855–900	Колебания концевого тетраэдра, связанного одной мостиковой связью с другим аналогичным тетраэдром – составляющие димера (Q^1)
880-945	Деполяризованная полоса четырехкоординированного атома титана TiO_4
960–1115	Поляризованная полоса четырехкоординированного атома титана TiO_4
900–940	Колебания концевых группировок тетраэдров с двумя мостиковыми связями, соединенными с концевыми тетраэдрами с одной мостиковой связью (Q^2)
930–980	Колебания тетраэдра с двумя мостиковыми связями, связанного с аналогичным тетраэдром – составляющие цепочки или реже кольцевой структуры (расплавы и кристаллические силикаты) (Q^2)
980–1020	Колебания тетраэдров с одним концевым атомом кислорода, связанных с цепочечными тетраэдрами (по два концевых атома кислорода) – составляющие начало ответвления от цепочечной структуры (Q^3)
1030–1100	Колебания концевых группировок тетраэдров с тремя мостиковыми связями, связанными с аналогичными тетраэдрами (Q^3)

При небольших добавках к бинарному стеклу оксида титана (1 мол. %) в спектре появляется новая линия, максимум которой расположен вблизи 880 $см^{-1}$. Интенсивность этой липни монотонно растет при увеличении содержания TiO_2 вплоть до 25 мол. %, а затем несколько уменьшается. При содержании TiO_2 15 мол. % и более в спектрах появляется еще одна широкая полоса с максимумом около 725 $см^{-1}$. В изученном диапазоне составов наблюдается непрерывный рост этой полосы при увеличении концентрации TiO_2. Появление этих полос и увеличение их интенсивности происходит на фоне монотонного уменьшения интенсивностей линий 950 и 1090 $см^{-1}$, причем первая из этих линий становится неразрешимой уже в спектре стекла

10T40N60S и о ее наличии можно судить только по асимметрии со стороны высоких частот линии с максимумом 880 $см^{-1}$. А полоса с максимум 1090 $см^{-1}$ по мере увеличения концентрации оксида титана смещается в область низких частот, начиная со спектра стекла 15T40N60S, а в высокочастотной области при дальнейшем увеличении титана наблюдается широкая слабая полоса без четко выраженного максимума. Линия 600 $см^{-1}$ в диапазоне 1T40N60S–35T40N60S уменьшается вплоть до полного исчезновения. Таким образом, в представленных на рисунке спектрах можно выделить три полосы, характеризующие силикатную составляющую неупорядоченной сетки (600, 950 и 1090 $см^{-1}$), и две линии (880 и 725 $см^{-1}$), появление которых связано с добавлением к исходному стеклу (0T40N60S) оксида титана. На спектрах КР изучаемых систем состава 35T40N60S–40T40N60S изменяется структурный рисунок низкочастотной области. Наблюдается изменение соотношения интенсивностей полос 700 и 880 $см^{-1}$ и появление серии в области 100–500 $см^{-1}$. Аналогичную серию полос наблюдаем и на спектре бинарного натриевотитанового стекла (60T40N0S).

Авторы [7], проведя анализ литературных данных по колебательным спектрам титанатных и титаносиликатных стекол и кристаллов, пришли к выводу, что характеристические полосы атомов титана в тетраэдрической координации в спектрах КР расположены к диапазонах 900–945 и 960-1115 $см^{-1}$. Для спектров КР соединений, в структуре которых атомы титана имеют пятерную координацию, характерно наличие сильной линии в диапазоне 775–900 $см^{-1}$, а октаэдрическая координация атомов Ti в стеклообразных материалах может быть идентифицирована по рассеянию в интервале частот 700–750 $см^{-1}$. Близость расположения частотных диапазонов, характеризующих тетраэдрическую (900–945 $см^{-1}$) и «полуоктаэдрическую» (775–900 $см^{-1}$) координацию атомов титана, позволяет отнести линию вблизи 880 $см^{-1}$ как к одной, так и к другой структурной позиции Ti [8].

Было изучено структурное положение атомов титана в титаносиликатных стеклах соседних разрезов $xTiO_2 \cdot (100\text{-}x)[Na_2O \cdot SiO_2]$ и $xTiO_2$ $(100\text{-}x)[Na_2O$ $2SiO_2]$ по отношению к исследуемому в данной работе разрезу $xTiO_2$ $(100\text{-}x)[2Na_2O \cdot 3SiO_2]$ методами колебательной спектроскопии [9, 10]. Данные результаты исследования стекол показали, что во всем изученном диапазоне составов в спектрах КР присутствует линия с максимумом 940 см-1, обусловленная колебаниями связей Ti–O тетраэдров TiO_4 [9], а при этом не наблюдалась полоса с максимумом 880 $см^{-1}$. При увеличении концентрации TiO_2 в стеклах первого разреза приводит к появлению в спектрах КР линии в области 843–858 $см^{-1}$, которая интерпретировалась авторами как структурная единица пятикоординированного атомов титана [5]. Отнесение линии было выполнено на основе сопоставления спектров изученных модельных титаносиликатных стекол со спектром природного минерала фресноита, в структуре которого атомы титана имеют координационное число равное 5. При этом авторами не обнаруживается полоса 940 $см^{-1}$.

Согласно [7], происхождение широкой линии с максимумом вблизи 725 $см^{-1}$, которая наблюдается в спектрах КР при содержании TiO_2 более 10 мол. %, связано с образованием в структуре стекол титанокислородных октаэдров. Характер изменения интенсивности этой линии показывает, что с ростом содержания TiO_2 (> 10 мол. %) доля атомов титана с координационным числом равным 6 постепенно увеличивается. Следует отметить, что в диапазоне составов от 10 до 25 мол. % имеет место одновременное увеличение концентрации атомов титана с различным координационным числом, а для систем состава 25T40N60S– 40T40N60S увеличение доли шестикоординированных атомов титана происходит на фоне уменьшения доли ионов титана с координационным числом 5.

Заключение. При исследовании титаносиликатных стекол установлено, что, также как и в случае бинарных силикатных систем, в спектрах КР наблюдаются более выражено полосы при малых концентрациях титана, соответствующие колебаниям немостиковых связей в структурных единицах Q^3 и Q^2, интенсивности которых закономерно изменяются в зависимости от состава.

В спектрах КР доминирует полоса с максимумом в области 860–887 $см^{-1}$, интенсивность которой увеличивается при увеличении содержания титана в стеклах и которая связана с колебаниями тетраэдров TiO_4. Предполагается, что уменьшение структурных единиц Q^2 и Q^3 происходит за счет встраивания ионов титана в существующие немостиковые связи тетраэдров кремния. Наблюдаемое изменение структуры стекол связано со структурной ролью титана, представленного ионами в четверной координации и выступающего в качестве катиона-сеткообразователя.

Анализ спектров КР рассмотренных систем показал, что при содержании оксида титана до 10 мол. % в ближайшем окружении атомов титана находится пять атомов кислорода (TiO_5), образующих тетрагональную пирамиду, в вершине которой находится атом кислорода, связанный с атомом титана двойной связью. При постоянном соотношении SiO_2/Na_2O = 1,5 с дальнейшим увеличением содержания TiO_2 (35–40 мол. %) приводит к появлению в структуре стекол атомов шестикоординированного титана (TiO_6). В промежуточной области по составу TiO_2 (10–25 мол. %) с ростом концентрации титана имеет место увеличение доли обоих типов титанокислородных структурных групп – TiO_5 и TiO_6 на фоне ярко выраженного уменьшения доли силикатной составляющей. Титансодержащие структурные единицы в пограничных областях перехода титана из одной координации в другую, вероятно, могут представлять собой структуру со смешанным тетраэдрически-полуоктаэдрическим и полуоктаэдрическим-октаэдрическим каркасоми. Физико-химические свойства титаносиликатных систем и их структурные особенности определяются закономерностями образования титанатной и силикатной составляющей и их взаимодействием.

Библиографический список

1. Henderson, G.S. The Structure of Silicate Melts: a Glass Perspective / G. S. Henderson // Canadian Mineralogist. 2005. V. 43. Pp. 1921–1958.

2. Mysen, B.O. Raman Spectroscopy of Silicate Melts at Magmatic Temperature: Na_2O–SiO_2, K_2O–SiO_2 and Li_2O–SiO_2 SiCb Binary Compositions in the Temperature Range 25–1783 °C / B.O. Mysen, J.D. Frantz // Chem. Geol. 1992. V. 96. Pp. 321–332.

3. Malfail, W.J. Quantitative Raman Spectroscopy: Speciation of Na-silicate Glasses and Melts / W.J. Malfail, V.P. ZakaznoVa-Herzog, W.E. Hatter // Amer. Mineralogist. 2008. V. 93. Pp. 1505–1518.

4. Aguiar, H. Structural Study of Sol-Gel Silicate Glasses by IR and Raman Spcetroscopic / H. Aguiar, J. Semi, P. Gonzalez, B. Leon // J. Non-Cryst. Solids. 2009. V. 355. Pp. 475–480.

5. Анфилогов, В.Н. Силикатные расплавы / В.Н. Анфилогов, В.Н. Быков, А.А. Осипов. – М.: Наука, 2005. – 358 с.

6. Кориневская, Г.Г. Структура титаносиликатных расплавов и стекол системы Na_2O-SiO_2-TiO_2 по данным спектроскопических методов / Г.Г. Кориневская, В.А. Муфтахов // Уральский минералогический сборник. – 2009. – № 16. – С. 190–195.

7. Sokolov, V.O. Quantum-Chemical Modeling of Titanium Centers in Titanosilicate Glass / V.O. Sokolov, V.G. Ptotnichenko, E.M. Dianov // Inorganic Materials. 2006. V. 42. № 11. Pp. 1273–1288.

8. Осипов, А.А. Координация титана в натриевотитаносиликатных стеклах состава $xTiO_2 \cdot (100\text{-}x)[2\ Na_2O \cdot 3\ SiO_2]$ $(0 \leq x \leq 30)$ по данным спектроскопии комбинационного рассеяния / А.А. Осипов, Г.Г. Кориневская, Л.М. Осипова, В.А. Муфтахов // Физика и химия стекла. – 2012. – Т. 38, № 4. – С. 459–463.

9. Kusahiraki K. Infrared and Raman Spectra of Vitreous Silica and Sodium Silicates Containing Titanium / K. Kusahiraki // J. Non-Cryst. Solids. 1987. V. 95–96. Pp. 411–418.

10. Henderson, G.S. The Structure of Ti Silicate Glasses by Micro-Raman Spectroscopy / G.S. Henderson, M.E. Fleet // Canadian Mineralogy. 1995. V. 33. Pp. 399–408.

К содержанию

УДК 502.7.05 + 502.056

ГЕМЕРОБИАЛЬНОСТЬ КАК МЕТОД РАСЧЕТА РЕКРИАЦИННОЙ НАГРУЗКИ РАСТИТЕЛЬНЫХ СООБЩЕСТВ ОСОБО ОХРАНЯЕМЫХ ПРИРОДНЫХ ТЕРРИТОРИЙ

В.С. Петухов

Дана характеристика рекреационной нагрузки. Определена гемеробиальность растительных сообществ ФГБУ «Байкальский государственный заповедник». На основании полученных данных сделан вывод о нарушении растительных сообществ заповедника.

Ключевые слова: гемеробиальность, рекреационная нагрузка, растительное сообщество.

В соответствии со статьей 7 ФЗ «Об особо охраняемых природных территориях» одной из задач государственных природных заповедников является экологическое просвещение и развитие познавательного туризма.

В заповедниках развитие познавательного туризма осуществляется на конкретных участках, определенных индивидуальными положениями о заповедниках, с учетом режима особой охраны, размеров, ландшафтной и природоохранной специфики территорий.

Непосредственная организация работ по развитию познавательного туризма на территории заповедников, как правило, ведётся отделами экологического просвещения.

Развитие познавательного туризма на особо охраняемых природных территориях федерального значения осуществляется по следующим направлениям:

– разработка комплекса экскурсионных программ для различных категорий посетителей, в том числе организация демонстрации диких животных в естественной среде;

– обустройство (в том числе информационное) экскурсионных экологических троп и туристических маршрутов, смотровых площадок, мест наблюдения за дикими животными;

– создание новых и модернизация существующих музеев и информационных центров для посетителей;

– проведение оценки предельно допустимых нагрузок и определение путей минимизации негативного воздействия на природные экосистемы;

– создание инфраструктуры для обеспечения сервисного обслуживания посетителей;

– разработка и внедрение системы добровольной сертификации экскурсионных экологических троп и туристических маршрутов на особо охраняемых природных территориях;

– развитие сопутствующего туризму малого и среднего бизнеса (развитие сети мини-гостиниц, гостевых домов, крестьянско-фермерских хозяйств, традиционных промыслов и ремесел, производства экологически чистых продуктов, сувенирных изделий и др.);

– разработка правил, регулирующих поведение посетителей на особо охраняемых природных территориях, с целью обеспечения безопасности людей и предотвращения ущерба природным комплексам и объектам и др.

Среди многообразных аспектов научно-практической деятельности, связанной с организацией экотуров, особое место занимает изучение возникающих в этой связи эколого-географических проблем, в частности, определение допустимых нагрузок на природную среду [4].

Разные природные комплексы и составляющие их элементы существенно различаются между собой по своей потенциальной стойкости к рекреационным нагрузкам.

Устойчивостью природного комплекса к рекреационным нагрузкам называется его способность противостоять этим нагрузкам до известного предела. Превышение нагрузок приводит к потере способности природного комплекса к самовозобновлению.

Под нагрузкой понимается посещение определенным количеством туристов единицы площади природного комплекса в единицу времени.

Нагрузка бывает:

Критическая – когда в природных комплексах могут произойти необратимые изменения;

Допустимая – близкая к критической, но не вызывающая необратимых изменений;

Недопустимая – когда в природных комплексах уже произошли необратимые изменения.

Допустимую рекреационную нагрузку можно подразделить на три основных вида:

1. Экологическая допустимая нагрузка – это уровень посещаемости туристской территории, превышение которого приводит к негативным экологическим последствиям.

Происходит это либо в результате действий туристов, либо вследствие негативных последствий от функционирования туристской инфраструктуры.

2. Рекреационная социальная допустимая нагрузка – уровень посещаемости туристского объекта, превышение которого влечет за собой ухудшение впечатлений от поездки.

3. Местная социальная допустимая нагрузка – уровень посещаемости территории, превышение которого приводит к негативным последствиям для местной культуры и ухудшению взаимоотношений местного населения с туристами.

Определение нормы рекреационных нагрузок. Воздействие человека на природные комплексы развиваются поэтапно. Рассмотрим эти этапы.

1. Деятельность человека не вносит в природный комплекс никаких заметных изменений.

2. Рекреационное воздействие человека выражается в установлении редкой сети тропинок, в появлении среди травянистых растений некоторых светолюбивых видов, в начальной фазе разрушения травяного покрова.

3. Тропиночная сеть еще сравнительно густа, в травянистом покрове преобладают светолюбивые виды, начинают появляться и луговые травы, мощность травяного покрова уменьшается, на внетропиночных участках возобновление леса все еще удовлетворительное.

4. Тропинки густой сетью опутывают лес, в составе травяного покрова количество собственно лесных видов незначительно, жизнеспособных молодых деревьев возрастом 5–7 лет фактически нет, травяной покров встречается фрагментарно у стволов деревьев.

5. Полное отсутствие травяного покрова и молодых деревьев на вытоптанной площади – отдельные экземпляры сорных и однолетних видов трав.

Граница устойчивости природного комплекса, т.е. предел, после которого наступают необратимые изменения, проходит между третьим и четвертым этапами. Соответственно за предельно допустимую принимается та нагрузка, которая соответствует третьему этапу. Необратимые изменения в природном комплексе начинаются на четвертом этапе, а угроза гибели лесных насаждений – на пятом этапе. Первый, второй и отчасти третий этапы воздействия человека на растительный покров с точки зрения эстетической привлекательности природного комплекса в ряде случаев следует признать положительными.

Под нормой рекреационных нагрузок обычно понимается единовременная нагрузка, измеряемая численностью людей в единицу времени на единицу площади. Если же ввести в это понятие период интенсивного рекреационного использования территории в течении суток, то можно получить более достоверную нагрузку на природный комплекс в течение заданного времени.

Рекреационная нагрузка является тем показателем, который отражает совокупное воздействие рекреационной деятельности на ландшафтные комплексы. В отношении существующего опыта нормирования рекреационных нагрузок необходимо отметить следующие особенности.

1. В качестве источника воздействия, который необходимо нормировать, принимается количество отдыхающих (рекреантов). Вместе с тем не учитываются такие факторы рекреационного воздействия, как транспортные средства отдыхающих и строительство различного рода инфраструктурных сооружений. Фактически производится нормирование не рекреационной нагрузки, а потока рекреантов, туристов и экскурсантов.

2. Нет единого мнения относительно системы измерения рекреационной нагрузки. Так, в качестве единицы ее измерения различными авторами принимаются следующие показатели: а) количество человек, которые могут одновременно находиться на единицы площади территории; б) количество человек, которые могут одновременно находиться на единице площади территории при определенном периоде ее эксплуатации; в) число туристов, пребывающих в сутки на рекреационных объектах в течение сезона; г) количество отдыхающих, проходящих по единице площади за единицу времени; д) единовременное количество отдыхающих на единице площади с учетом суммарного времени вида отдыха за учетный период.

3. Нормы рекреационных нагрузок устанавливаются по-разному для: 1) различных типов одного из ландшафтных компонентов; 2) различных типов ландшафтных комплексов; 3) отдельных видов рекреационной деятельности; 4) различных функционально-ландшафтных систем и 5) различных совмещенных вариантов.

4. Для одного и того же объекта при однотипном его использовании нормы рекреационных нагрузок могут отличаться в зависимости от критерия их определения – функционального, психологического или экологического. Практическое применение норм нагрузок в подобных случаях затруднено.

В.П. Чижовой на примере особо охраняемых природных территорий Камчатки были сформулированы восемь принципов определения допустимых рекреационных нагрузок. В соответствии с первым принципом допустимую рекреационную нагрузку определяют отдельно для каждого туристского маршрута, исходя из конкретных природных и организационных условий.

В соответствии со вторым принципом нагрузку определяют по началу и концу сезона функционирования туристских маршрутов.

В соответствии с третьим принципом нагрузку определяют по численности каждой группы, оптимальной с точки зрения психологического комфорта, но не более десяти туристов и двух сопровождающих. Например, на пешеходном маршруте максимальное число туристов – 15…20 человек, а для наблюдателей за птицами – не более 3…4 человек.

По четвертому принципу новые туристские маршруты следует начинать с небольшой нагрузки – одна туристская группа в две недели. После года эксплуатации природного комплекса в таком режиме можно принимать решение о сохранении нагрузки или ее корректировке. Экологический мониторинг по этому поводу лежит в основе пятого принципа.

Мониторинг желательно проводить не реже трех раз в сезон: в начале, середине и после его окончания. Величину допустимой нагрузки следует корректировать ежегодно в соответствии с шестым принципом. Таким образом, для первого года эксплуатации туристского маршрута итоговая допустимая нагрузка на него составляет приблизительно 60 человек за сезон

(5 туров по 12 человек). Такую нагрузку можно рекомендовать лишь при условии рационального благоустройства маршрута, что и предполагает седьмой принцип определения нагрузок. Немаловажно также соблюдение определенных общих и специфических природоохранных требований (восьмой принцип).

На основе всех восьми принципов определяется допустимая нагрузка на туристские территории, особенно на заповедные. Суммируя величины нагрузки для всех маршрутов, получаем общую пропускную способность туристской территории [3].

К одному из методов определения рекреационной нагрузки можно отнести определение гемеробиальности растительных сообществ.

Гемеробиальность – результирующая антропогенного влияния на растения, отражающая процессы нарушенности растительных сообществ.

Большой вклад в изучение гемеробиальности растений вносит научная школа профессора H. Sukopp (Германия) [5]. В России изучением данного вопроса занимаются А.Р. Ишбирдин (Башкирский государственный университет), М.М. Черосов (Институт биологических проблем криолитозоны СО РАН), Б.Н. Пестряков (Северо-Восточный федеральный университет), П.А. Горелова (Северо-Восточный федеральный университет).

По совокупности растений во флоре и их оценкам по гемеробии можно определить степень нарушенности различных типов растительности, а также флор различных уровней организации. По степени гемеробиальности согласно методики разделения видов растений по шкале гемеробии Яласа выделяют:

– агемеробные виды, не выносящие антропогенного влияния(сокр. - a);

– олигогемеробные виды лесов, лугов, верховых болот и т.д., выносящие очень незначительное антропогенное влияние (o);

– мезогемеробные виды лесов, лугов, остепненных лугов и степей, испытывающих экстенсивное антропогенное влияние (m);

– β-эугемеробные виды лугов и лесов с интенсивным уходом, выносящие эвтрофикацию, известкование, незначительное нарушение грунта(b);

– α-эугемеробные виды удобряемых лугов, деградирующих лесов, полевые сорняки (c);

– полигемеробные виды, выращиваемые в культуре, и типичные рудеральные растения, выносящие сильные и частые нарушения местообитаний (p);

– метагемеробные виды полностью деградировавших экосистем и искусственных сообществ (t)[2].

Исследования по определению гемеробиальности растительных сообществ проводились на территории ФГБУ «Байкальский государственный заповедник».

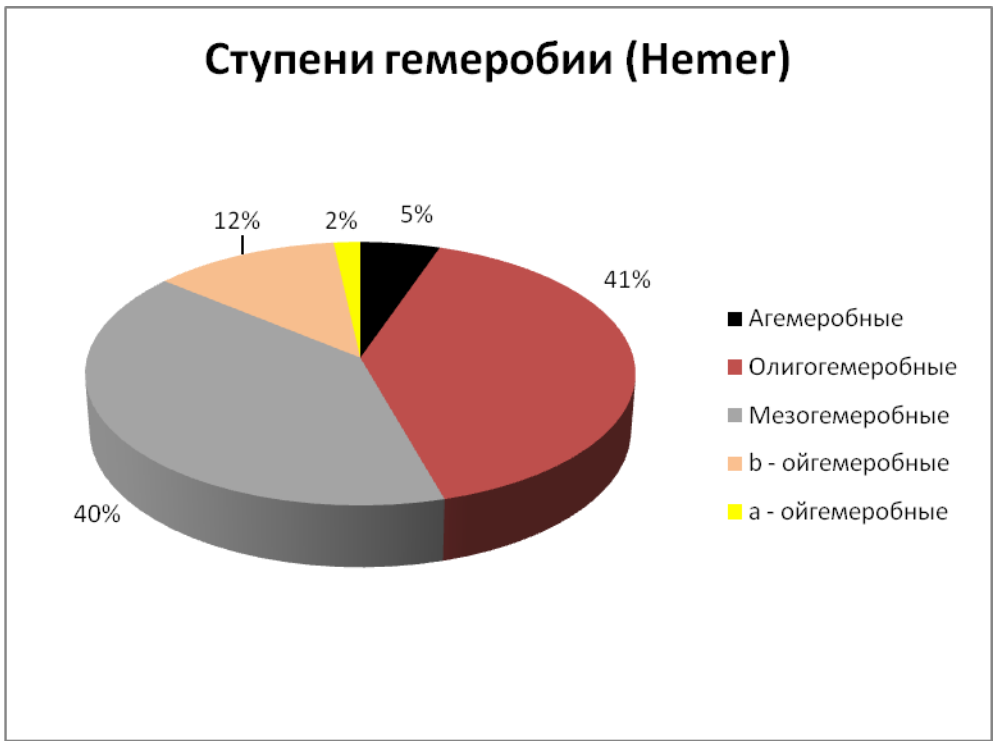
Результаты исследования

Для изучения динамики структуры и состава сообществ, формирующих растительность магистральных путей заповедника, заложены и описаны три

постоянных пробных площади (ППП) по ходу большой Байкальской тропы. Для каждой ППП описания проводились геоботанические описания с выявлением полного видового состава, обилия по Друде, доли участия синантропных видов рядом с тропой и на контрольной площадке.

По каждому из элементов тропы и на прилегающей территории были проложены трансекты, на которых располагались на расстоянии 25 см друг от друга учетные площадки. Таким образом, при их заложении был использован метод случайной выборки с элементами сознательного отбора. Размер учетных площадок – 0,1 м² каждая, их количество для определения надземной биомассы и встречаемости – 10.

Средний спектр гемеробиальности растительных сообществ по всем ППП представлен на рисунке.



Спектр гемеробиальности растительных сообществ ББТ

Как видно из рисунка, на всех ППП большой Байкальской тропы Байкальского государственного заповедника доля гемеробных видов (сумма агемеробных, олигогемеробных и мезогемеробных) составляет 86 %, отсутствуют полигемеробные и метагемеробные виды.

Полученные данные согласуются с исследованиями, проведенными В.Н. Охлопковым Б.Н. Пестряковым, которые в своей работе, посвященной процессам синатропизации флоры и растительности острова Самойловский (дельта р. Лены), получили аналогичные данные [1].

Исследования гемеробиальности растений Якутии, проведенные Б.Н. Пестряковым, М.М. Черосовым и А.Р. Ишбирдиным, показывают, что в наиболее нарушенных флористических районах Якутии увеличивается доля полигемеробных и метегемеробных видов. Следовательно, отсутствие этих видов в наших исследованиях может указывать на не высокую степень антропогенного воздействия на территорию заповедника [2].

Подводя итоги можно выделить следующее:

1. В растительных сообществах большой Байкальской тропы Байкальского государственного заповедника преобладают олиго- и мезогемеробные виды растений.

2. При данном уровне развития туристической деятельности на территории заповедника нарушений естественных растительных сообществ не выявлено.

Библиографический список

1. Охлопков, В.Н. Процессы синатропизации флоры и растительности острова самойловский (дельта р. Лены) / В.Н. Охлопков, Б.Н. Пестряков // Успехи современного естествознания. – 2014. – № 8 . – С. 24–26.

2. Пестряков, Б.Н. Гемеробиальность растений Якутии / Б.Н. Пестряков, М.М. Черосов, А.Р. Ишбирдин // Научные ведомости Белгородского университета. Серия Естественные науки. – 2011. – № 9 (104). – Вып. 15/1. – С. 131–135.

3. Рекреационные нагрузки на ландшафтные комплексы. – URL: http://studopedia.org/1-101314.html.

4. Чижова, В.П. Допустимые рекреационные нагрузки в охраняемых природных территориях (на примере природного парка «Налычево») / В.П. Чижова, Н.В. Моралева. – URL: http://www.landscape.edu.ru/files/chizhova/chizhova_nalychevo.pdf/.

5. Frank D., Klotz S. Biologisch-okolgische Daten zur Flora der DDR (2. Aufl.) // Wiss. Beitr. Univ. Halle. 1990. 167 s.

К содержанию

УДК 651.01 + 502.33

РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ВНЕДРЕНИЮ СИСТЕМЫ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МЕНЕДЖМЕНТА НА ПРЕДПРИЯТИИ

Л.В. Волкова

Приведены практические рекомендации по организации работ и оптимизации усилий при разработке СЭМ. Предложены алгоритмы и последовательность разработки СЭМ. Даны рекомендации по формированию рабочей группы, выбору консультантов на этапах разработки, внедрения, поддержания и развития в рабочем состоянии системы. Определены задачи рабочей группы, перечень документов, необходимых для разработки, внедрения и функционирования СЭМ. Определен перечень обязательных действий (процедур) с целью своевременных актуализаций и поддержания в рабочем состоянии системы.

Ключевые слова: экология, экологический менеджмент, природоохранное законодательство.

Система экологического менеджмента (СЭМ) – общая часть системы менеджмента в организации, используемая для разработки и внедрения ее экологической политики, целей и управления воздействиями на окружающую среду, или, подсистема управления природоохранной деятельностью организации, направленная на снижение негативно воздействия на окружающую среду.

Внедрение СЭМ в организации обеспечивает:

- соблюдение природоохранного законодательства организацией, поставщиками и подрядчиками;
- поэтапное и постоянное снижение негативного воздействия на окружающую среду;
- управление и контроль процессов производства, связанных с экологическими аспектами;
- идентификацию и сведение к минимуму аварийных ситуаций и экологических рисков;
- сокращение платы за негативное воздействие на окружающую среду, штрафных санкций;
- улучшение системы управления деятельностью организации в целом;
- развитие систем производственного контроля и экологического мониторинга;
- мотивацию персонала к эффективному использованию природных ресурсов и снижению негативного воздействия на окружающую среду.

Основная задача СЭМ – эффективное управление экологическими аспектами, экономия и снижение потребления природных и энергетических

ресурсов, снижение негативного воздействия на окружающую среду: выбросов загрязняющих веществ (ЗВ) в атмосферный воздух, сбросов ЗВ в водоемы, образования отходов производства и потребления.

Учитывая, что экологические аспекты возникают в производстве, технологических процессах и различных операциях, при доставке в производство сырья и материалов, их хранении, при выполнении разгрузочно-погрузочных работ и т.д., при создании рабочей группы для разработки и внедрения СЭМ на предприятии, в нее необходимо включить:

- руководителя предприятия или его заместителя, в зоне ответственности которого находятся вопросы планирования, организации и развития производства, технические, финансовые и человеческие ресурсы. Это может быть заместитель руководителя по производству, по технической политике, по качеству или главный инженер. Этот специалист может быть руководителем рабочей группы;
- линейных руководителей;
- ключевой персонал производственных подразделений;
- экологов;
- специалистов по охране труда, промышленной безопасности, ГО и ЧС;
- представителя руководства по качеству или сотрудника, отвечающего за систему менеджмента качества (при наличии на предприятии системы менеджмента (СМК).

При выборе консультантов (экспертов) по СЭМ необходимо учитывать:

- наличие опыта (не менее 3-х лет) создания, внедрения и подготовки к сертификации СЭМ на предприятиях машиностроения;
- наличие в команде специалистов с базовым техническим и/или экологическим образованием и опытом работы в экологической службе какого-либо машиностроительного предприятия;
- наличие опыта работы в нескольких системах менеджмента: СМК, СЭМ, безопасности труда и т.д.

Рабочая группа по созданию и внедрению СЭМ должна функционировать на постоянной основе, поддерживая и развивая систему.

Задачи рабочей группы – контроль и решение вопросов, связанных с планированием и реализацией природоохранных мероприятий, улучшением системы [1].

Начинать разработку СЭМ целесообразно с изучения стандарта ИСО 14001, справочного приложения А «Руководство по применению настоящего стандарта», ГОСТ Р ИСО 14004-2007 «Системы экологического менеджмента. Общее руководство по принципам, системам и методам обеспечения функционирования», затем повторно ИСО 14001, в котором последовательно представлены:

- область применения (4.1);
- экологическая политика (4.2);

- экологические аспекты (4.3.1);
- законодательные и другие требования (4.3.2);
- целевые и плановые экологические показатели и программы (4.3.3) и т.д.

Разработку основных этапов СЭМ целесообразно проводить в следующей последовательности:

- определение объектов окружающей среды (воздух, вода, почва), на которые может быть оказано влияние производственной деятельности предприятия, «что» используется и «что» образуется в результате деятельности;
- идентификация экологических аспектов и определение степени их значимости, определение прямых и косвенных экологических аспектов;
- установление целевых и плановых экологических показателей;
- определение задач для планирования СЭМ;
- разработка экологических программ и планов.

Область применения СЭМ и экологическую политику целесообразно определять, разрабатывать и уточнять после разработки основных этапов СЭМ.

Дополнительно при разработке СЭМ необходимо обратить внимание на следующие виды деятельности, работ и операций, потенциально имеющие экологические аспекты:

- производство продукции (товаров, работ) и оказание услуг;
- техническое обслуживание и ремонт;
- проектирование, реконструкция и модернизация производства;
- закупка сырья, топлива, материалов, услуг;
- транспортировка грузов, в т.ч. опасных;
- хранение и работа с опасными веществами.

При имеющейся внедренной СМК можно максимально использовать имеющуюся документацию по процессам, добавляя к ней экологические аспекты, способы управления ими. При отсутствии СМК рекомендуется разрабатывать в рамках элемента СЭМ «Экологические аспекты» (4.3.1)

Управление экологическими аспектами осуществляется в соответствии с требованиями по внедрению и функционированию СЭМ стандарта ИСО 14001: «управление операциями» (4.4.6) и «подготовленность к аварийным ситуациям и реагирование на них» (4.4.7).

Учитывая, что на предприятиях имеются внутренние документы, регламентирующие действия в случае возникновения аварийных ситуаций: планы по предупреждению и ликвидации аварийных и чрезвычайных ситуаций, инструкции и т.д., при разработке СЭМ достаточно дополнить указанные документы мерами по устранению экологических последствий и обеспечению экологической безопасности.

С целью организации управления процессами необходимо идентифицировать, планировать и поддерживать в рабочем состоянии процедуры и операции, связанные с экологическими аспектами.

Основными принципами построения СЭМ являются: соблюдение требований природоохранного законодательства и других требований, предотвращение негативного воздействия на окружающую среду и последовательное непрерывное улучшение.

В рамках СЭМ различают внешние и внутренние «другие требования» нормативных технических документов. К внешним требованиям относятся: законы, постановления, государственные стандарты, СанПиНы, отраслевые стандарты, требования заинтересованных сторон (само предприятие, его сотрудники, потребители, владельцы, акционеры и партнеры организации, поставщики, подрядчики, банки, страховые компании, органы власти, государственные контролирующие (надзорные) органы в области охраны окружающей среды, население, общественные организации и СМИ).

К внутренним требованиям относятся: приказы, распоряжения, положения, регламенты, инструкции, стандарты предприятия и другие локальные нормативные акты организации [2].

При установлении экологических целей в СЭМ необходимо обеспечить:

- их взаимосвязь с приоритетными экологическими аспектами и обязательствами экологической политики;
- возможности качественной и количественной оценки (измеримости) через систему соответствующих показателей;
- реальность планируемого уровня.

Целевые и плановые экологические показатели должны характеризовать:

- сокращение потребления ресурсов, уменьшение объемов образования отходов;
- минимизацию или ликвидацию выбросов, сбросов ЗВ в окружающую среду;
- повышение эффективности экологической подготовки персонала;
- увеличение объемов инвестиций в совершенствование производства, технологических процессов и природоохранные мероприятия.

Экологические программы и планы в рамках СЭМ разрабатываются с учетом:

- исходной экологической ситуации на предприятии;
- экологических аспектов;
- целевых и плановых экологических показателей;
- способов достижения экологических показателей;
- распределения ответственности за достижение экологических показателей для каждого подразделения и уровня в рамках организации;
- средств и сроков для достижения экологических показателей;
- приоритетов и действий для достижения целевых и плановых экологических показателей.

В экологические программы и планы могут быть включены следующие мероприятия:

- организационные и организационно-технические мероприятия, в т.ч. по совершенствованию СЭМ;
- технические и технологические действия по предотвращению воздействия на окружающую среду, в т.ч. изменение технологии и оборудования, замена сырья, материалов и т.д.;
- мероприятия и действия «на конце трубы», в т.ч. по очистке выбросов, сбросов ЗВ в окружающую среду, утилизации и переработке отходов.

Для оценки экологических программ и планов необходимо установить показатели экологической эффективности:

- количество используемых сырья, материалов, ресурсов и т.д.;
- количество выбросов, сбросов ЗВ в окружающую среду;
- отходы, произведенные за определенный период (т/год) на определенное количество готовой продукции (т/год);
- количество экологических инцидентов (превышение установленных нормативов воздействия на окружающую среду, залповых выбросов, аварийных разливов и т.д.);
- объемы переработанных отходов;
- объемы инвестиций в охрану окружающей среды [3].

Библиографический список

1. Анисимов, А.В. Экологический менеджмент: планирование, организация, экологическая эффективность / А.В. Анисимов. – Ростов н/Д.: Феникс, 2009. – С. 159–225.

2. Белов, Г.В. Экологический менеджмент: политика, цели / Г.В. Белов. – М.: Логос, 2008. – С. 92–94.

3. Токарева, Г.В. Экология производства: принципы, алгоритмы / Г.В. Токарева // 2013. – № 7. – С. 34–42.

К содержанию

ГЕОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ В г. МИАСС

УДК 550.4.02(470.55)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЕБИТА ПОВЕРХНОСТНЫХ И СКРЫТЫХ ВОДОТОКОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ХИМИЧЕСКОЙ МЕТКИ И ОЦЕНКА ТЯЖЕЛОМЕТАЛЬНОЙ НАГРУЗКИ Р. САК-ЭЛГА ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ КИСЛЫХ РУДНИЧНЫХ ВОД

П.Г. Аминов[1], В.Н. Удачин[1,2], К.А. Филиппова[1], Г.Ф. Лонщакова[1], Л.Г. Удачина[1]

На натурном объекте проведены нетрадиционные исследования по оценке дебитов поверхностных вод с использованием Li химической метки. В отличие от стандартных методов гидрологических оценок, метод позволяет определить вклад скрытых притоков подземных и грунтовых напорных вод. Кроме того, использование Li-метки делает более точной оценку техногенной нагрузки на малые водотоки, в первую очередь для тяжелых металлов. Использование метода проведено на примере р. Сак-Элга, которая находится под влиянием кислых рудничных вод г. Карабаша в Челябинской области.

Ключевые слова: поверхностные воды, химический состав, литий, кислые рудничные воды, техногенез.

Введение

Природные поверхностные водотоки от самых своих истоков постоянно испытывают подпитку за счет впадающих притоков, и это находит свое выражение в увеличении дебита основного водотока. В ряде моментов видимых источников пополнения водотоков бывает недостаточно для объяснения увеличения дебита и в этом случае имеет смысл говорить о невидимых или «скрытых» источниках подпитки. Происхождение таких вод может быть весьма разнообразное (воды затопленных шахт, придонные родники и т.д.), что определяет их физико-химические показатели. Поэтому каждый такой невидимый приток может вносить вклад, как в кислотность, так и в металлоносную нагрузку потока.

Целью работы было установление дебита водотоков, как одной из главных характеристик, определяющих перенос металлов в р. Сак-Элга на территории Карабашского горнопромышленного комплекса (Челябинская область, Южный Урал). Для определения дебита водотоков использовался метод «химического снаряда» (Х-снаряда), предложенный гидрохимиками

[1] Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс.
[2] Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Миассе.

США [6, 9, 10]. В качестве химической метки использовался Li в виде раствора хлорида лития (LiCl). Параллельно с определением особенностей поведения метки в основных гидрологических створах, проведено опробование водотоков с последующим анализом гидрохимических проб для получения данных о химизме главных ионов и металлов в поверхностных водах.

На изучаемом участке наблюдаются лишь два видимых притока: небольшой ручеек из «кислых прудков» (прудки, сформированные над устьями затопленных шахт Сталинского рудника на юго-западной окраине города с дебитом 0,25 л/сек 30.09.2004 г.) и «Рыжий ручей». Основное воздействие на главный водоток оказывают сульфидно-силикатные отходы обогатительной фабрики, работавшей здесь с 1934 г., в результате чего в речку было сброшено около 6 млн. т отходов. И только с 1952 г. было организовано первое изолированное хранилище отходов. Расположенные в долине речки отходы, одним из продуктов преобразования которых, являются кислые воды с pH 3–4, за последние 70 лет «выжгли» все живое в долине р. Сак-Элга [1, 3, 4].

Методика эксперимента

Опробование и анализ. Введение литиевой метки происходило в точке Ф (рис. 1), чуть ниже истока р. Сак-Элга из Богородского пруда. Исследуемый участок водотока был условно разделен на 4 зоны, в пределах которых наблюдаются видимые притоки. Исходя из обозначенных зон, производилось опробование (см. рис. 1). Предварительно, до введения метки, во всех точках отобраны пробы для определения природных концентраций Li.

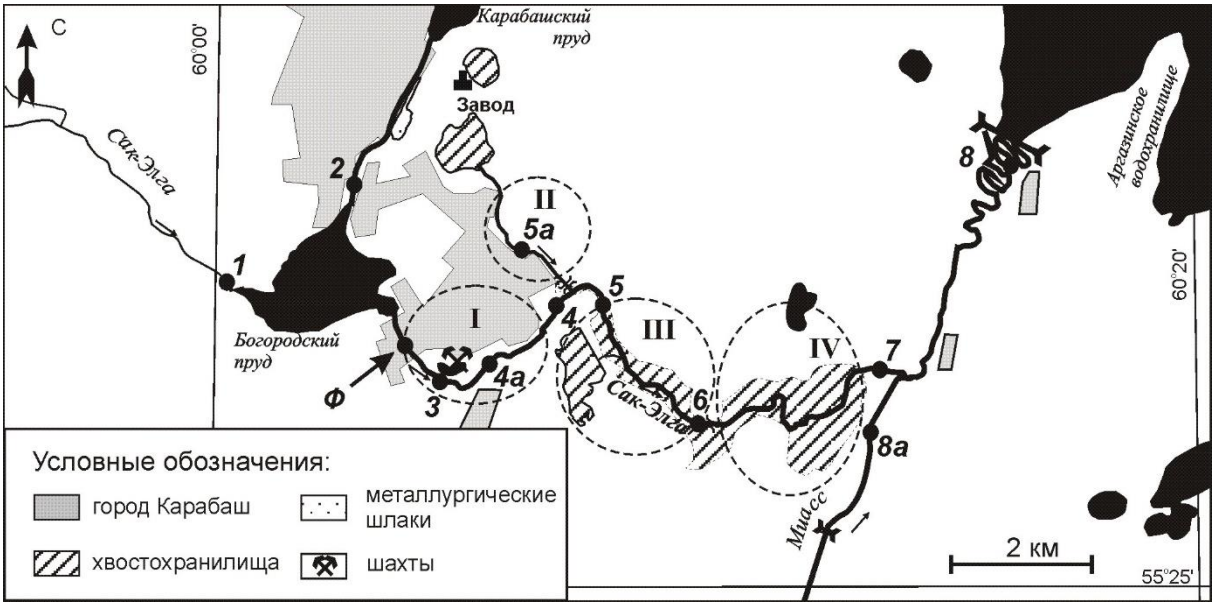


Рис. 1. Схема опробования водораздела р. Сак-Элга, согласно условно выделенным 4 зонам, с потенциальными скрытыми притоками (I – «Кислые прудки», II – «Рыжий ручей», III – «Хвостохранилище Новое», IV – «Шламовая долина р. Сак-Элга»)

В водоток вводили раствор LiCl, с концентрацией Li – 50 мг/л. Эксперимент проводили 13 октября 2004 г. Капельная установка, установленная в центральной части водотока, поддерживала норму введения Х-снаряда 500 мл/мин (0,0083 л/с) [9]. Эксперимент продолжался в течение 14-ти часов, что, с учетом скорости водотока, позволило осуществить опробование на всей протяженности участка исследований. Соли Li (хлориды и бромиды) или Na являются наиболее подходящими индикаторами. Литий работает хорошо в водотоках с низким pH [7]; Cl и Br, напротив, предпочтительны для водотоков с высоким pH. Превышения фоновых концентраций Li и Br в горных водоразделах встречаются редко. Несмотря на то, что в водоток вводятся растворы с повышенной концентрацией соли, концентрация ее в потоке только несколько мг в литре, и не оказывает вредного воздействия на водные организмы. Другие индикаторы, имеют ряд недостатков, являясь неустойчивыми при низких значениях pH и сорбируясь органическим субстратом в зоне гипергенеза. Основные принципы и процедуры методов введения индикатора представлены в работах [8, 11].

Отбор проб проведен в 1,5-литровые емкости из полипропилена, дважды сполоснутые деионизированной водой (установка Millipore, США). Гидрохимические пробы были отфильтрованы через мембранные фильтры Whatman с размером пор 0,45 мкм. Анионный состав определен стандартными аналитическими методами [5]: титриметрия, турбидиметрия, гравиметрия, фотоколориметрия (КФК-2), определение pH, Eh (pH-метр Yokogawa 8221-E), и γ вод (кондуктометр HI-933000). Содержания металлов, включая Li, определены методом атомно-абсорбционной спектрометрии на приборе Perkin-Elmer 3110 в пламенном варианте. Этот метод анализа обеспечивает предел обнаружения микроэлементов в диапазоне 0,1–0,01 мг/л, что является достаточным для анализа многих природных объектов (воды, породы, почвы, растения). Точность метода 1–3 %. Более низкие концентрации элементов определены на атомно-абсорбционном спектрометре Analyst 300 с электротермическим режимом атомизации, с пределом обнаружения по Pb – 0,2 мкг/л, по Cd – 0,02 мкг/л.

Все аналитические исследования выполнены в Южно-Уральском центре коллективного пользования по исследованию минерального сырья, г. Миасс (аттестат аккредитации № РОСС RU.0001.514536).

Определение дебитов. Схема (рис. 2) и основные формулы, использовавшиеся для расчета [9], приведены ниже:

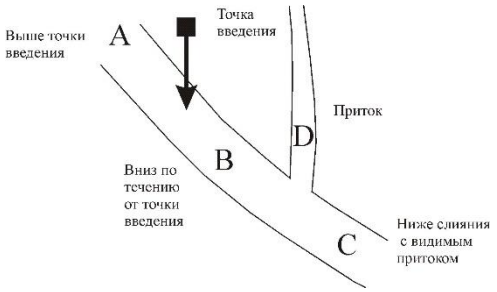


Рис. 2. Схема буквенного обозначения участков опробования для расчета объемов скрытых притоков

Уравнения, определяющие расчетные количества водотоков с использованием Li-метки:

1. Массовый баланс вниз по течению от точки введения Li-метки:

$$M_B = C_B Q_B = C_A Q_A + C_{BB} Q_{BB};$$

$$Q_B = Q_A + Q_{BB},$$

где Q_{BB} – расход раствора хлорида Li, C_{BB} – концентрация Li в растворе, C_B – концентрация на участке B, Q_B – дебит участка B, C_A – концентрация на участке A, Q_A – дебит на участке A.

2. Дебит реки на первом участке вниз по течению от введения Li-метки:

$$Q_B = Q_{BB} (C_{BB} - C_A)/(C_B - C_A).$$

3. Дебит реки на последующих вниз по течению участках с однородными концентрациями фона:

$$Q_C = Q_B (C_B - C_D)/(C_C - C_D);$$

$$Q_C = Q_{BB} (C_{BB} - C_A)/(C_C - C_A),$$

где C_C – концентрация Li на участке вниз по течению,

Q_C – дебит на участке вниз по течению.

Обсуждение результатов

Дебит водотоков определялся по описанной выше методике, с использованием изменения концентрации Li (рис. 3а), вводимого в водную систему.

На графике наблюдается уменьшение концентрации Li от 0,76 до 0,12 мг/л по удалению от точки введения X-метки, что происходит в результате разбавления водами видимых или скрытых притоков (см. рис. 3а). Видно, что на протяжении первых 8000 м снижение концентрации Li небольшое, местами наблюдается повышение концентрации. Это происходит вследствие привноса притоками существенных «естественных» концентрации Li (табл. 1), когда при низких pH в условиях сернокислой среды происходит мобилизация Li из отходов добычи и обогащения руд и переход в водную среду.

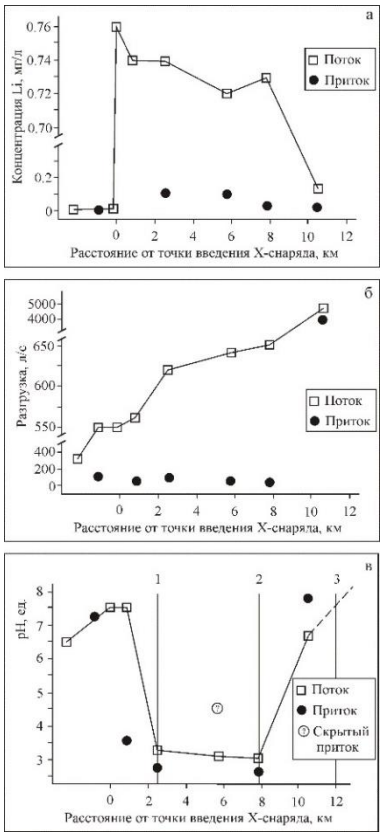


Рис. 3. а) график распределения Li по удалению от точки введения, р. Сак-Элга;
б) график изменения дебита водотока в точках наблюдения, р. Сак-Элга;
в) изменение величины pH водотока по удалению от точки введения:
1 – фоновый участок (до воздействия кислых водотоков),
2 – влияние техногенных объектов, 3 – разбавление водами р. Миасс

Таблица 1

Дебит поверхностных и скрытых водотоков по результатам эксперимента

Место отбора	№ пробы (рис. 1)	Расстояние от точки ввода, м	Li прир., мг/л	Li прир. +введ., мг/л	Рассчитанный дебит, л/с	Дебит (Челобл-гидромет), л/с
р. Сак-Элга	1	–	<0,01	0,01	–	380
р. Серебрянка	2	–	0,03	0,01	–	175
р. Сак-Элга (ввод LiCl)	Ф	0	0,01	0,01	553,3	–
р.Сак-Элга	3	50	0,01	0,76	553,3	–
Воды «Кислых прудков»	4а	950	0,15	0,12	15	–
р. Сак-Элга	4	2450	0,01	0,74	568,5	560
«Рыжий ручей»	5а	2500	0,12	0,13	51,7	53
р. Сак-Элга	5	4200	0,03	0,74	620	–
р. Сак-Элга	6	5750	0,02	0,72	637,7	690
р. Сак-Элга	7	7750	0,02	0,73	647	–
р. Миасс	8а	8250	<0,01	0,01	4127	–
р. Миасс	8	10000	0,01	0,12	4774	–

Дебит водотока Сак-Элга и притока р. Серебрянка до Богородского пруда был взят по ориентировочным неопубликованным данным Челябоблгидромет. В точке введения Li-метки расчет дебита производился по формуле (3), с проверкой массового баланса Li в соответствии с формулой (1, 2). Для последующих участков водотоков при расчете использовались формулы (4, 5). Полученные в результате расчетов данные приведены в таблице 1.

Из таблицы следует, что на всех обозначенных нами и перечисленных ранее участках обнаруживается приток воды в различных объемах. Причем на участке «Кислые прудки» при видимом дебите 0,25 л/сек суммарный скрытый дебит составляет по расчетам 15 л/сек. Можно, с достаточной степенью достоверности, предположить существование двух основных источников дополнительного питания р. Сак-Элга на этом участке – приток хозбытовых городских вод и подземные воды шахтных выработок.

На участке «Рыжий ручей» воды дополнительного притока имеют поверхностное происхождение, они визуально хорошо фиксируются и впадают в р. Сак-Элга объемом 51,7 л/сек (30.09.2004 г.). Рассчитанная величина этого притока хорошо согласуется с данными прямых замеров в этом гидрологическом створе. На участках «Хвостохранилище Новое» и «Шламовая долина» видимых притоков не наблюдается. На этих участках скрытые притоки составляют 17 л/сек и 10 л/сек соответственно (см. табл. 1, рис. 3б).

Таким образом, на исследованном участке р. Сак-Элга (до р. Миасс) пополняется дополнительными водами в размере 106 л/сек, что составляет 19 % от дебита реки в начале участка исследования. Следует отметить, что воды, пополняющие водоток, являются техногенными водами с очень низкими показателями pH (рис. 3в, табл. 2).

Окислительно-восстановительные и кислотно-щелочные условия среды определяют общую картину геохимической обстановки в системе, существо и направленность геохимических процессов. Отображенная в таблице 2 пониженная кислотность определяет физико-химические параметры вод.

Для природных систем немалое значение для процессов «самоочищения» имеет удаленность от источника загрязнения, протяженность водотока и разбавление водами притоков. Поскольку изучаемый нами участок водотока протекает среди хвостов с большим содержанием пирита (pH 3–5 на всем протяжении), то здесь главным фактором снижения концентраций тяжелых металлов является разбавление водами притоков с увеличением показателя pH [2]. Такая закономерность проявляется и для всех типоморфных для данной геотехнической системы металлов (рис. 4).

Таблица 2

Физико-химические параметры поверхностных вод Карабашской ГТС

№	1	2	Ф	5а	4	5	8	7	8а
pH	6,53	7,01	7,21	2,89	7,26	3,32	7,07	3,46	7,93
Eh, мВ	239	255	240	432	250	444	245	545	230
γ, мкСм	102	956	416	3710	475	1149	480	971	349
мг/л (*н.а. – не анализировано)*									
HCO_3	42	85	58	нет	72	нет	110	нет	143
Cl^-	30,1	2,1	14,6	127,6	11,7	16,0	20,7	12,8	21,3
SO_4^{2-}	283	22	130	3560	128	289	50	215	15
Ca	22	13	48	335	53	107	50	106	34
Mg	4,7	30	16	200	19	62	27	20	20
K	1,6	13	5,1	7,5	5,6	5,7	4,4	5,7	3,9
Na	4,9	34	15	27	14	17	13,5	16	12,5
Fe	0,08	1,0	0,2	430	0,01	54	7,7	32,5	0,03
Mn	0,004	2,1	0,2	31	0,3	6,9	1,2	4,4	0,005
Cu	0,02	0,1	0,02	20	0,02	4,1	0,3	2,1	0,01
Zn	0,1	9,8	0,9	60	0,9	12	1,5	5,3	0,1
Ni	0,01	н.а.	0,02	2,1	0,03	н.а.	н.а.	н.а.	0,09
Co	0,004	н.а.	0,01	1,7	0,005	н.а.	н.а.	н.а.	0,003
Pb	0,1	0,01	н.а.	0,8	0,06	н.а.	0,02	0,4	0,01
Cd	0,00002	0,01	0,0002	0,3	0,0002	0,03	0,0003	0,01	0,00001
Ba	0,1	н.а.	0,4	28	0,4	н.а.	н.а.	н.а.	0,2
Sr	0,06	0,3	0,1	1,0	0,1	0,25	0,1	0,2	0,08
Li	<0,01	0,03	0,01	0,1	0,01	0,03	0,01	0,02	н,а,
Al	0,1	0,02	0,02	40	0,02	0,05	0,004	0,05	0,007

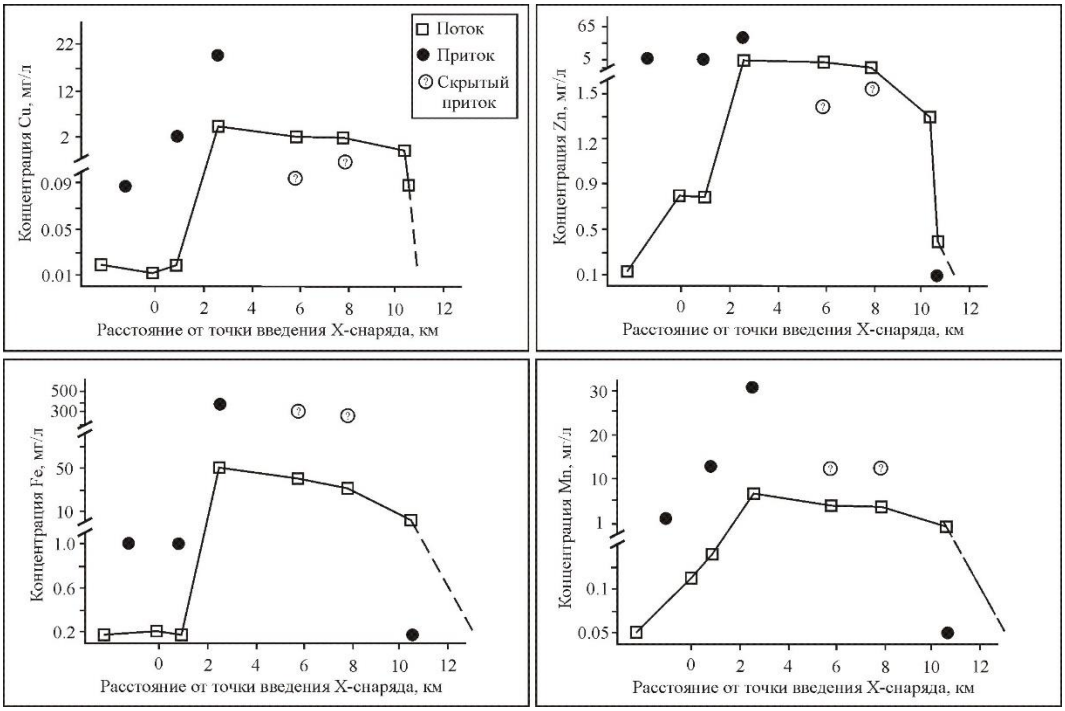


Рис. 4. Изменения концентрации типоморфных техногенных металлов в р. Сак-Элга с удалением от точки введения X-метки

Выводы

Проведенные исследования показали возможность точного определения дебита не только видимых, но и скрытых притоков при помощи Li-метки. Сравнение результатов с неопубликованными данными Челябоблгидромета, полученными классическими приемами гидрологических исследований (метод прямых замеров в основных гидрологических створах) позволяет сделать следующие выводы:

– рассматриваемый метод изучения позволяет точно определить дебит водотока. Расхождения с традиционно применяемым методом составляют не более 10 % отн.;

– метод позволяет выделить скрытые притоки и определить их объемы.

Принимая во внимание возможность искусственного изменения русла р. Сак-Элга в верхнем течении, следует отметить, что согласно полученным данным в исследуемом русле останется более 50 % стока, а это порядка 320 л/с в паводковый период и около 60 л/с в период межени. Причем с концентрациями тяжелых металлов, на порядки превышающими концентрации в сегодняшних условиях, при ультранизких значениях pH.

Исследования выполнены при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 14-17-00691).

Библиографический список

1. Аминов, П.Г. Изучение состава эпифитовзвеси для индикации горнопромышленного техногенеза / П.Г. Аминов // Вестник Оренбургского государственного университета. – 2008. – № 6. – С. 93–100.

2. Аминов, П.Г. Осадкообразование в водотоках, испытывающих воздействие отходов обогащения колчеданных руд Карабашской фабрики / П.Г. Аминов, Г.Ф. Лонщакова // Металлогения древних и современных океанов–2009. Модели рудообразования и оценка месторождений. – Миасс: ИМин УрО РАН, 2009. – С. 319–324.

3. Удачин, В.Н. Геохимия геотехнических систем Южного Урала / В.Н. Удачин, Б. Вильямсон, П.Г. Аминов // Естественные и технические науки. – 2009. – № 6. – С. 298–306.

4. Удачин, В.Н. Химический состав и механизмы формирования кислых рудничных вод Южного Урала / В.Н. Удачин, Б. Вильямсон, Р. Китагава, Г.Ф. Лонщакова, П.Г. Аминов, Л.Г. Удачина // Вода: химия и экология. – 2011. – № 11. – С. 3–8.

5. Фомин, Г.С. Вода. Контроль химической, бактериальной и радиационной безопасности по международным стандартам. Энциклопедический справочник / Г.С. Фомин. – М.: Протектор, 2000. – 839 с.

6. Bencala, K.E. Characterization of transport in an acidic and metal-rich mountain stream based on a lithium tracer injection and simulations of transient storage / K.E. Bencala, D.M. McKnight, G.W. Zellweger // Water Resources Research. – 1990. – V. 26. – Pp. 989–1000.

7. Bencala, K.E. The Stability of Rhodamine WT Dye in Trial Studies of Solute Transport in an Acidic and Metal-Rich Stream / K.E. Bencala, D.M. McKnight,

G.W. Zellweger, J. Goad // Water-Supply Paper 2310. – US Gelogical Survey. – 1986. – Pp. 87–95.

8. Kilpatrick, F.A. Measurement of discharge using tracers / F.A. Kilpatrick, E.D. Cobb // In Techniques of Water-Resources Investigations of the US Gel. Surv. – US Geological Survey. – 1985. – Book 3, chapter A16.

9. Kimball, B. Assessment of metal loads in watersheds affected by acid mine drainage by using tracer injection and synoptic sampling: cement Creek, Colorado, USA / B. Kimball, R. Runkel, K. Walton-Day, K. Bencala // Applied Geochemistry. – 2002. – V. 17. – Pp. 1183–1207.

10. Runkel, R. A simulation-based approach for estimating premining water quality: Red Mountain Creek, Colorado / R. Runkel, B. Kimball, K. Walton-Day, P. Verplanck // Applied Geochemistry. – 2007. – V. 22. – Pp. 1899–1918.

11. Zellweger, G.W. Practical Aspecrs of Tracer-Injection Experiments in Acidic, Metal-Enriched Streams / G.W. Zellweger, K.E. Bencala, D.M. McKnight, R.M. Hirsch, B.A. Kimball. – US Gelogical Survey. – 1988. – Open-file Report 87–764. – Pp. 125–130.

К содержанию

УДК 553.2(470.55)

СЕЛЕНИДЫ В ЗОНАХ СУБМАРИННОГО И СУБАЭРАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ КОЛЧЕДАННЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ УРАЛА

Н.Р. Аюпова[1,2], Е.В. Белогуб[1,2], И.А. Блинов[2]

Приведены сравнительные данные строения зон окисления субмаринного и субаэрального происхождения для некоторых колчеданных месторождений Южного Урала. Охарактеризовано геологическое положение и ассоциации гипергенных селенидов, включая науманнит, тиманнит, клаусталит, и содержащих селен сульфидов. Оценены условия нахождения гипергенных селенидов в обстановке зоны окисления колчеданных руд.

Ключевые слова: колчеданные месторождения, зона окисления, субаэральная, субмаринная, селениды, термодинамические расчеты.

Селен является характерным примесным компонентом колчеданных руд. Считается, что основная часть селена в колчеданных рудах присутствует в изоморфной форме в сульфидных минералах. Близость ионных радиусов селена (Se^{2-} 1,96 Å) и серы (S^{2-} 1,85 Å) сближает их в эндогенных геохимических процессах. Наиболее высокие содержания Se (200–3500 г/т)

[1] Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс.
[2] Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Миассе.

установлены как изоморфная примесь в высокотемпературном гидротермальном халькопирите жильных рудоподводящих зон некоторых колчеданных месторождений [19], а также в трубах современных [16] и древних [8] «черных курильщиков». Аномальные содержания селена, связанные с присутствием его собственных минеральных форм, встречаются в борнитовых ассоциациях рудоподводящих зон, формирование которых связано с рекристаллизацией или воздействием низкотемпературных гидротермальных или метаморфических процессов [18]. В последние годы исследования вопросов образования и минералогии зон окисления сульфидных месторождений Урала как в субаэральных [17], так и в субмаринных [2] обстановках показали, что в низкотемпературных условиях зон окисления происходит формирование селенидов. Самородный селен, тиманнит и Se-содержащий акантит описаны в составе тяжелого концентрата серных сыпучек Гайского месторождения [10]. Известны многочисленные находки селенидов в осадочных породах, в том числе ураноносных [13; 15]. Новообразованные селениды описаны как продукт современного техногенного минералообразования в торфах, испытавших воздействие вод хвостохранилища отходов цианирования золота из руд Ново-Урского золото-колчеданного месторождения (Салаир) [9].

Согласно минералого-экогеохимической систематике [6] селен, наряду с медью, свинцом, кадмием, никелем, кобальтом и ртутью, является наиболее опасным токсикантом. Особо опасными являются окисляющиеся и окисленные колчеданные руды и хвосты их обогащения, где токсичные элементы могут находиться в химически активной форме. В связи с этим, для оценки экологической опасности последствий отработки месторождений необходимы научно обоснованные данные о форме селена в рудах и процессах его перераспределения в зоне гипергенеза. Более того, повышенные содержания селена, также как мышьяка и ртути, отрицательно сказываются на стоимости различных типов руд и промышленных продуктов.

Методы исследований. При полевых исследованиях использован метод рудно-фациального картирования колчеданных залежей, который учитывает пространственно-временные соотношения и эволюцию минеральных типов руд в пределах месторождения [7]. Оптические исследования проводились на микроскопе Olympus BX51. Химический состав минералов определялся с помощью сканирующего электронного микроскопа с энергодисперсионным спектрометром РЭММА 202М и СЭМ VEGA3 Tescan с точностью определения 0,01 % в Институте минералогии УрО РАН, г. Миасс. Для оценки вероятных условий образования селенидов использованы термодинамические данные, полученные ранее [14; 17].

Зоны субмаринного окисления колчеданных руд изучены на Молодежном [2; 5; 7], Талганском [11], Александринском [12], Западно-Озерном [3]

месторождениях. По аналогии с хорошо разработанной колонкой зоны субаэрального гипергенеза, идеализированный разрез зоны субмаринного гипергенеза включает следующие подзоны (сверху вниз): 1) полного окисления (аналогично «железной шляпе»), сложенную тонкозернистым агрегатом, состоящим из гематита, хлорита и реликтовых рудокластов; 2) выщелачивания кварц-баритового состава, образование которой происходило при выщелачивании халькопирита и/или сфалерита; 3) вторичного обогащения пирит-(борнит)-теннантит-халькопиритового состава с реликтами первичного пирита; 4) сфалерит-пирит-халькопиритовые руды, обычно кластогенные, часто с фрагментами палеогидротермальных труб «черных курильщиков». Подзоны представлены стратифицированными горизонтами мощностью от первых до 20–40 сантиметров, либо фрагментами таких горизонтов. Богатая селеном минерализация в ассоциации с самородным золотом приурочена к подзоне сульфидного обогащения, незначительная часть – к подзонам выщелачивания и окисления. Наиболее представительная зона субмаринного окисления распространена на флангах Молодежного и Западно-Озерного месторождений. Основной объем селенидов локализован в новообразованном халькопирите и теннантите. Удлиненные, изогнутые и более сложные выделения селенидов от тонкодисперсного (1–2 мкм) до микроскопического (9–15 мкм) характеризуются незначительными вариациями состава и представлены *клаусталитом PbSe, науманнитом Ag_2Se, селенсодержащим галенитом (Se до 4–8 мас. %), курилитом Ag_8Te_3Se и богдановичитом $AgBiSe_2$*. Самым распространенным минералом селена является клаусталит, который встречается как в виде включений в халькопирите и теннантите (3–4 мкм), так и на контакте этих минералов с баритом (до 40 мкм). В составе клаусталита содержится до 3,54 мас. % Ag. Науманнит встречается гораздо реже и наблюдается замещение его клаусталитом. Минерал, описанный ранее как теллурсодержащая разновидность науманнита [2], при уточнении состава отнесен к курилиту (Ag 66,27–67,79, Te 10,58–17,17, Se 14,65–17,96 мас. %). Курилит образует самостоятельные микровключения или сростки с клаусталитом. Богдановичит также встречается в ассоциации с клаусталитом. Размеры зерен клаусталита всегда намного превышают размеры других селенидов. Следует сказать, что науманнит, курилит и богдановичит в субмаринных фациях колчеданных месторождений Урала, обнаружены впервые.

В ассоциации с селенидами постоянно встречается самородное золото. Крупные изометричные включения самородного золота (Au 74,12–76,55, Ag 23,45–25,88) размером 10–20 мкм приурочены к новообразованному халькопириту. Многочисленные мелкие (1–4 мкм) включения золота содержатся в теннантите. Прожилковое золото (Au 81,29–82,55, Ag 17,51–18,77) образуется в трещинах реликтовых обломков пирита.

Источником селена для образования селенидов в зоне субмаринного окисления могли служить халькопирит палеогидротермальных труб «черных курильщиков» [8], а Ag, Pb, Te и Bi – теллуриды, широко представленные в трубах. Вероятно, минералы Ag_2Te – Ag_8Te_3Se – Ag_2Se отражают временную эволюцию минеральных форм халькогенидов при субмаринном гипергенезе. С растворением колломорфного пирита связано появление нового золота, ассоциирующего с селенидами и новообразованным гесситом.

Зона субаэрального гипергенеза. Обогащенные селеном сульфиды, селениды, селенистые сульфосоли и самородный селен установлены в зонах континентального гипергенеза Гайского, Джусинского, Западно-Озерного, Юбилейного колчеданных месторождений на Южном Урале [17]. В субаэральной гипергенной колонке селениды приурочены, преимущественно, к нижней части подзоны выщелачивания, вблизи ее границы с подзоной вторичного обогащения, а также в подзоне самородной серы, которая не установлена в субмаринных зонах окисления. В последнее время селениды были обнаружены в микропустотах бурых железняков «железной шляпы» на Юбилейном месторождении. По сравнению с описанной выше зоной субмаринного окисления, в условиях континента стратифицированность зон окисления проявлена лучше и мощность подзон значительно больше. Новообразованные селениды образуют идиоморфные и скелетные выделения субмикронного размера, иногда обогащенные селеном зоны наблюдаются в колломорфных почках в составе рыхлых сажистых агрегатов вторичного пирита, что не характерно для неокисленных сульфидных руд.

Минералы изоморфной серии *пирит-джаркенит* ($FeS–FeSe_2$) образуют колломорфные зональные агрегаты размером до 20 мкм и ассоциируют с самородным селеном и высокопробным самородным золотом глобулярной морфологии [20]. *Клаусталит* PbSe размером 3–4 мкм образует включения в колломорфных агрегатах новообразованного селенистого пирита в ассоциации с самородным селеном, джаркенитом и тиманнитом на Западно-Озерном месторождении. На Джусинском месторождении серия клаусталит-галенит от $Pb_{1,08}(Se_{0,52}S_{0,48})_{1,0}$ до $(Pb_{0,97}Hg_{0,01}Cu_{0,01})_{0,99}(Se_{0,52}S_{0,48})_{1,00}$ представлена скелетными разновидностями [17]. *Тиманнит* HgSe в ассоциации с другими селенидами образует ксеноморфные зерна до 2 мкм в кварц-баритовых и серных сыпучках Гайского и Западно-Озерного месторождений [10; 17]. Находки *науманнита* AgSe относительно редки, его микронные выделения установлены в сажистых рудах на Западно-Озерном месторождении, при технологическом изучении золотоносных окисленных руд [17] и в порах бурых железняков Юбилейного месторождения. *Селендсодержащий ютенбогардит* $Ag_{3,05}Au_{0,94}(S_{2,00}Se_{0,01})$ в виде включений в галогенидах серебра описан Н.Б. Сергеевым с соавторами [10] в кварцевой сыпучке Гайского месторождения.

Оценка условий нахождения селенидов в зонах окисления. Находки селенидов и обогащение селеном вторичных сульфидов в зонах окисления

подтверждаются результатами термодинамического моделирования, выполненным для систем Me-S-H_2O и Me-Se-H_2O, где Me=Fe, Hg, Ag, Pb для температуры 25 °С и давления 1 атм, где суммарная активности серы принята 10^{-3} на основании геологических признаков и имеющихся данных о составе вод нижней части зоны окисления, а суммарная активность селена была принята 10^{-5}. Расчеты показали, что в координатах Eh-pH поля устойчивости клаусталита, науманнита и тиманнита шире, чем соответствующих сульфидов за счет увеличения устойчивости последних в более окислительной области, кроме того для образования селенидов в низкотемпературных слабокислых условиях требуются более низкие активности селеноводородной кислоты, чем для соответствующих сульфидов – сероводородной [17]. Теми же авторами на основании изучения изотопного состава серы был сделан вывод о влиянии жизнедеятельности бактерий на формирование восстановительных условий для осаждения гипергенных сульфидов и ассоциирующих с ними селенидов. Эти выводы согласуются с данными об условиях осаждения селенидов при техногенном воздействии вод Ново-Урского хвостохранилища на торф [9].

По-видимому, редкость находок селенидов в зонах окисления обусловлена их малыми размерами и ничтожным содержанием селена в первичных рудах. Обнаружение селенидов в порах бурых железняков нуждается в дальнейшем подтверждении. Недавно гипергенные тиманнит и клаусталит были описаны в бурых железняках Амурского стратиформного месторождения цинка, их присутствие объясняется локальными восстановительными условиями, существовавшими благодаря деятельности микроорганизмов [4].

Заключение. Таким образом, на примере нескольких колчеданных месторождении показано, что в зонах окисления как субмаринного, так и субаэрального, может происходить образование широкого спектра селенидов, включающего науманнит, тиманнит, клаусталит, джаркенит, а также селенсодержащих сульфидов (пирита, халькопирита) и, по-видимому, локальная концентрация селена. Термодинамические расчеты позволили установить области устойчивости этих минеральных парагенезисов. В экзогенных условиях весьма актуальным является анализ условий изменения селенидов с образованием высокотоксичных форм подвижных растворенных селенатов.

Работы поддержаны проектом РНФ № 14-17-00691.

Библиографический список

1. Акинфеев, Н.Н. Влияние селена на перенос и осаждение серебра гидротермальными растворами: термодинамическое описание системы Ag-Se-S-Cl-O-H / Н.Н. Акинфеев, Б.Р. Тагиров // ГРМ. – 2006. – Т. 48, № 5. – С. 460–472.

2. Аюпова, Н.Р. Минералы селена и индия в зоне субмаринного гипергенеза колчеданной залежи Молодежного медно-цинково-колчеданного месторождения, Южный Урал / Н.Р. Аюпова, В.В. Масленников, В.А. Котляров, С.П. Масленникова, Л.В. Данюшевский, Р.Р. Ларж // Доклады РАН. – 2015 (в печати).

3. Аюпова, Н.Р. Сульфидно-магнетитовые руды Западно-Озерного медно-цинково-колчеданного месторождения (Южный Урал) / Н.Р. Аюпова, А.С. Целуйко // Металлогения древних и современных океанов. – Миасс: ИМин УрО РАН, 2013. – С. 139–143.

4. Блинов, И.А. Самородные металлы, селениды, галогениды и ассоциирующие минералы из бурых железняков Амурского и Верхне-Аршинского месторождений (Южный Урал) / И.А. Блинов // Литосфера. – 2015. – № 1. – С. 65–74.

5. Зайков, В.В. Вулканизм и сульфидные холмы палеоокеанических окраин / В.В. Зайков. – М.: Наука, 2006. – 429 с.

6. Иванов, В.В. Экологическая геохимия элементов. Справочник в 6 томах. Т. 3 / В.В. Иванов. – М.: Экология, 1996. – 353 с.

7. Масленников, В.В. Седиментогенез, гальмиролиз и экология колчеданоносных палеогидротермальных полей (на примере Южного Урала) / В.В. Масленников. – Миасс: Геотур, 1999. – 348 с.

8. Масленникова, С.П. Сульфидные трубы палеозойских «черных курильщиков» / С.П. Масленникова, В.В. Масленников. – Екатеринбург-Миасс: УрО РАН, 2007. – 312 с.

9. Мягкая, И.Н. Золото в системе сульфидные отходы и торфяник как модель поведения в геологических процессах / И.Н. Мягкая, Е.В. Лазарева, М.А. Густайтис, С.Б. Заякина, Е.В. Полякова, С.М. Жмодик // Доклады РАН. – 2013. – Т. 453, № 2. – С. 201–206.

10. Сергеев, Н.Б. Золото и серебро в зоне гипергенеза серно-колчеданной залежи Гайского месторождения (Южный Урал) / Н.Б. Сергеев, В.В. Зайков, И.П. Лапутина, О.В. Трофимов // ГРМ. – 1994. – Т. 36, № 2. – С. 169–183.

11. Теленков, О.С. Автоматизированная экспертная система типизации кремнисто-железистых отложений палеогидротермальных полей Южного Урала / О.С. Теленков, В.В. Масленников. – Миасс: ИМин УрО РАН, 1995. – 200 с.

12. Тесалина, С.Г. Александринское медно-цинково-колчеданное месторождение / С.Г. Тесалина, В.В. Масленников, Т.Н. Сурин. – Миасс: ИМин УрО РАН, 1998. – 228 с.

13. Чвилева, Т.Н. Справочник-определитель рудных минералов в отраженном свете / Т.Н. Чвилева, М.С. Безсмертная, Э.М. Спиридонов и др. – М.: Недра, 1988. – 504 с.

14. Яковлева, В.А. Вторичные сульфиды, селениды и арсениды в зоне гипергенеза Западно-Озёрного медно-колчеданного месторождения, Южный Урал / ВА. Яковлева, А.Р. Нестеров, Е.В. Белогуб, К.А. Новоселов // Вестник Санкт-Петербургского Университета. – Серия 7. – 2001. – Вып. 3, № 23. – С. 74–80.

15. Яшунский, Ю.В. Джаркенит $FeSe_2$ – новый минерал / Ю.В. Яшунский, Е.Г. Рябова, М.В. Абрамов, С.Д. Расулова // ЗВМО. – 1985. – Вып. 1. – С. 85–89.

16. Auclair, G. Distribution of selenium in high-temperature hydrothermal sulfide deposits at 13° North, East Pacific Rise / Auclair G., Fouquet Y., Bohn M. // The Canadian Mineralogist. – 1987. – V. 87. – Pp. 577–587.

17. Belogub, E.V. Supergene sulphides and related minerals in the supergene profiles of VHMS deposits from the South Urals / Belogub E.V., Novoselov K.A., Yakovleva V.A., Spiro B. // Ore Geology Reviews. – 2008. – V. 33. – Is. 3–4. – Pp. 239–254.

18. Hannington, M.D. Sulfide mineralogy, geochemistry, and ore genesis of the Kidd Greek deposit. II. The bornite zone / Hannington M.D., Bleeker W., Kjarsgaard I. // Econ. Geol. Monograph. – 1999. – Pp. 225–266.

19. Layton-Matthews, D. Distribution, mineralogy, and geochemistry of selenium in felsic volcanic-hosted massive sulfide deposits of the Finlayson Lake District, Yukon Territory, Canada / Layton-Matthews D., Peter J.M., Scott S.D., Leybourne M.I. // Economic Geology. – 2008. – V. 103. – Pp. 61–88.

20. Yakovleva, V.A. Supergene iron sulphoselenides from Zapadno-Ozernoe copper-zink massive sulfide deposit, South Urals: The new solid solution series between pyrite FeS_2 and dzharkenite $FeSe_2$ / Yakovleva V.A., Belogub E.V., Novoselov C.A. // Mineralogical Magazine. – 2003. – V. 67(2). – Pp. 355–364.

К содержанию

УДК 669.21(470.5)

СОСТАВ ЗОЛОТА ИЗ РОССЫПЕЙ ЮЖНОГО УРАЛА И ИХ КОРЕННЫЕ ИСТОЧНИКИ

В.В. Зайков[1,2], А.Г. Баранников[3]

Дана характеристика состава золота из 11 россыпных зон Южного Урала. Материал основан на результатах рентгеноспектрального анализа зерен. Сделаны выводы о коренных источниках россыпей, которые включают золото-родингитовые, золото-сульфидные, золото-кварцевые, золото-лиственитовые и золото-скарновые месторождения.

Ключевые слова: золото, состав, рентгеноспектральный анализ, коренные источники, минералы, платиноиды.

На территории Южного Урала известно около 500 россыпей, сводная характеристика которых дана в работах В.Н. Сазонова и др. [10], П.В. Казакова и Д.Н. Салихова [9], А.Г. Баранникова [3], Зайков и др. [5]. По шестидесяти россыпям опубликованы сведения о составе золота, базирующиеся на данных добывающих предприятий. Авторы провели изучение состава зерен золота из россыпей, что дополняет имеющуюся информацию и позволяет определить возможные коренные источники.

По генезису россыпи являются аллювиальными, делювиальными, элювиальными и карстовыми. Основная часть промышленных запасов сосредоточена в аллювиальных россыпях. Возраст большинства из них плейстоценовый; менее развиты плиоценовые, миоценовые и мезозойские золотоносные отложения. Морфологически преобладают долинные, террасовые и ложковые

[1] Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Миассе.
[2] Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс.
[3] Уральский государственный горный университет, г. Екатеринбург.

залежи. В мезозойских карстовых залежах выделяются «косые пласты», для которых характерно наклонное залегание отложений [3]. Главными россыпеобразующими формациями являются золото-кварцевая, золото-полисульфидно-кварцевая, золото-сульфидная и золото-колчеданно-полиметаллическая [12].

Изучение вещественного состава руд, анализ разномасштабных карт эндогенной и экзогенной золотоносности, специализированное изучение россыпей и коренных источников, привлечение данных по фазовому составу руд позволило охарактеризовать россыпеобразующий потенциал эндогенного золотого оруденения региона различной формационной природы [2].

Месторождения группируются в 11 россыпных зон, расположение которых показано на рис. 1. Ниже дано краткое описание россыпей с использованием упомянутых выше работ предшественников и авторских данных. Месторождения, в соответствии с пробностью золота, разделены на три группы: I (1000–970 ‰), II (969–900 ‰), III (899–800 ‰). К первой группе относится новообразованное золото, что устанавливается по каймам соответствующего состава. Сведения о добыче золота в россыпных зонах приведены по [8; 13].

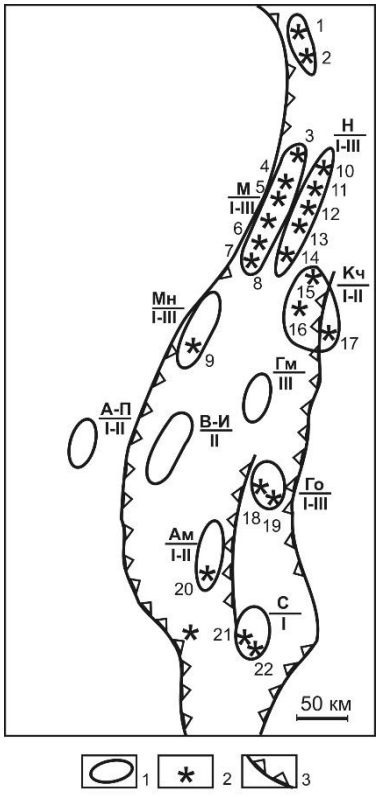


Рис. 1. Схема расположения россыпных зон и россыпей на Южном Урале, по которым имеются сведения о составе золота
1 – россыпные зоны (А-П – Авзянско-Прибельская, М – Миасская, Мн – Миндякскаая, Н – Непряхинская. Кч – Кочкарская, Гм – Гумбейская, В-И – Восточно-ирендыкская. Го – Гогинская, Ам – Амамбайская, С – Суундукская); 2 – места отбора проб на рентгеноспектральный анализ; 3 – фрагменты гипербазитовых поясов

Авзянско-Прибельская россыпная зона **(А-П)** является самой западной и к ней приурочены коренные месторождения Горный прииск и Улюк-Бар. В Авзянской части она включает пять россыпей, из которых сведения о пробности имеются по *россыпи Каменный ключ.* Россыпь имеет протяженность 400 м и ширину 50 м. Долина ручья прорезает северный фланг золото-кварцевого месторождения Горный прииск. Золото крупное, встречались самородки весом до нескольких граммов, пробность золота 926–979 ‰. Авзянская россыпная зона является наиболее крупной на западном склоне Урала, давшей 2340 кг золота.

Прибельская часть включает десять россыпей. *Россыпь Кучанова* разрабатывалась на протяжении 1500 м, а доразведка выявила промышленное содержание на отрезке долины длиной 3000 м, шириной 20–100 м. Золотоносными являются отложения 1-й надпойменной террасы и поймы. Золото в основной массе крупное (0,5–5 мм) плохой окатанности. Пробность высокая – от 950 до 980 ‰.

Кыштымская россыпная зона (К) включает две россыпи, по которым опубликованы сведения о пробности. Маукская россыпь относится к аллювиальному долинному типу четвертичного возраста, имеет длину 15 км при ширине 20–300 м. Золото крупное (0,1–1,5 мм), окатанность средняя. Всего добыто 2,7 т. золота. В россыпи присутствуют кристаллы циркона и оранжевого гиацинта. Кыштымская россыпь относится к тому же типу и имеет длину 1,5 км.

Миасская россыпная зона (М) является наиболее богатой на Южном Урале и располагается на территории Челябинской области и Башкортостана. В северной части она включает 6 россыпей, по которым имеются данные о пробности золота. Россыпи охватывают зону Главного Уральского разлома на протяжении 140 км, в том числе долины рек Миасс, Уй и вершину Урала с притоками. Длина россыпей 1500–17000 м, ширина 30–500 м. Общая добыча золота из россыпной зоны оценена в 125 т. [8; 13] По опубликованным данным золото Миасской россыпной зоны имеет общую пробность 802–920 ‰, а рудного золота в данной структуре – 750–940 ‰ [1].

В Сулейменовской россыпи состав золота в пробах Бр3-1, Бр3-2 (мас. %): Au 91–92, Ag 7–8, Cu 0,2–0,4. Аналогичный состав имеет золото на участке Тараканий Лог, но в пробе МР-1 выявлена высокопробная кайма с содержанием золота 99 %.

Миндякская россыпная зона **(Мн)** имеет протяженность 70 км и включает 7 россыпей, по которым имеются сведения о пробности золота. В пяти россыпях пробность находится в пределах 802–892 ‰, в двух – 898–934 ‰. Зона охватывает верховья р. Урал с правыми притоками. Наиболее крупная Миндякская россыпь имеет протяженность 3 км, ширину – 50–90 м. Золото крупное, хорошо окатанное, форма комковатая, таблитчатая, пластинчатая, присутствуют самородки весом до 10 г. Имеются сведения о том, что из двух

россыпей (Афонинской и Миндякской было добыто около 2 т золота [13]. Во всех россыпях содержатся платиноиды – в количестве 1–2 % по отношению к золоту. В россыпи Куру-Елга состав золота в пробе БР-1 (мас. %): Au 81–83, Ag 17–18, Cu 0,2.

Восточно-Ирендыкская россыпная зона **(В-И)** располагается в бассейнах правых притоков р. Урал (Б. Кизил, Янгелька, Худолаз и Уртазымка). Наиболее крупной является Султановская россыпь, примыкающая к одноименному месторождению. Из нее добыто около 3 т. золота с примесью поликсена, осмия, платины, сульфидов и арсенидов платины. Содержание платиноидов по отношению к золоту 1,3–7,6 %. Рядовая пробность золота 900–930 ‰, но иногда понижается до 648 ‰.

Россыпь многоструйная с шириной струй от 20–40 м до 150–250 м, протяженность 3 км. Мощность горной массы 1–5 м. Золото крупное, встречаются мелкие уплощенные самородки средней и хорошей окатанности. В золотоносных отложениях найден самородок весом 4788 г, названный «Ирендыкским медведем». Он имеет пластинчатую форму, размеры 31х18,5 см, толщину 0,5–1,5 см. Присутствует примесь палладия (0,52–2,87 %), родия (2,11–7,08 %) и иридия (4,95–7,60 %). Содержит (мас. %): Ag 6,6, Pt 0,3, Pd 1,76, Ir 1,17.

Непряхинская россыпная зона **(Н)** включает россыпи Аргазинскую (полигон № 80), Моховое болото, Фамбуловскую, Байрамгуловскую и золотоносные участки Березовский, Шахматовский и Куртмакский. Россыпь Моховое болото имеет длину 1,4 км при ширине 150–350 м. Золото крупное, слабо окатанное, присутствуют самородки весом 15–20 г, редко до 95 г. Средняя пробность 862 ‰. В Байрамгуловской россыпи реликты первичного золота имеют пробность 840 ‰, а кайма – 990 ‰. Такую же высокую пробность имеют знаки золота из упомянутых участков.

Кочкарская россыпная зона **(К)** включает россыпи на территории одноименного рудного района, для которого характерны золото-полисульфидно-кварцевые жилы. Россыпи по рекам Кабанка и Каменка содержат платиноиды. Наиболее обширная информация имеется по Северо-Светлинской россыпи, в которой нововообразованное золото имеет состав (мас. %): Au 88–94; Ag 3–10; Cu 0.1. Отмечена кайма с пробностью 970–990 ‰. На Еленинском и Уйском участках остаточное золото также имеет состав (мас. %): Au 89–94; Ag 5–11; Cu 0,2–0,3. В новообразованном золоте содержание металла 99 %.

Гумбейская россыпная зона **(Гм)** включает россыпи в бассейнах рек Гумбейка и Зингейка. Они приурочены к Балканскому золото-шеелитовому рудному полю и окружающим минерализованным зонам. Имеются данные по составу золота из Фершампенуазской россыпи с пробностью 850–900 ‰.

В Гогинскую россыпную зону **(Го)** входят Бессоновское и Казанское россыпные поля, из которых добыто около 10 т золота [3]. Золотоносными являются аллювиальные, пролювиальные и карстовые отложения.

Нижнемиоценовые россыпи Бессоновского поля распространены на площади длиной 6 км при ширине 0,3–1,3 км. Здесь работали прииски Ионовский I и II, Покровский, Разгуляевский, Амурский, Спасо–Преображенский и др. В центральной и восточной частях россыпной полосы развиты мезозойские золотоносные отложения, сохранившися в глубоком карсте [3]. Окатанность золотин слабая, нередко встречаются сростки с кварцем. Мощность гипергенной каймы достигает 0,1 мм. Пробность 957–980 ‰.

В Казанском россыпном поле длиной 5 км распространены мезозойские и неогеновые золотоносные отложения. В наиболее крупной Владимирской россыпи площадью 0,5х0,8 км золотоносный пласт мелового возраста имеет мощность 1,1 м. Золото представлено комковидными, уплощенными, чешуйчатыми выделениями пробностью 897–950 ‰. Ниже золотоносных пластов залегают карстовые отложения с золотосодержащими «косыми пластами» мощностью до 10 м.

Миоценовые россыпи сосредоточены в полосе длиной 3 км при мощности золотоносного пласта 1–8 м. В верхах разреза наблюдаются «кавардаки», содержащие железистый бобовник. По облику золото во многом идентично металлу из мезозойских отложений. Пробность 960 ‰.

Остаточное золото зафиксировано в пробе 16-1 (мас. %): Au 90, Ag 10, Cu 0,2; новообразованное (мас. %): Au 99, Ag 0,4, Cu 0,2. Аналогично в пробах Л59, 26 – новообразованное золото (99 %). На участке Камышлы-Аят проанализирована зональная золотина (проба 14-1), остаточное золото состав (мас. %): Au 91, Ag 9, Cu 0,2. Оторочка – состав (мас. %): Au 97–99, Ag 0,3–0,5, Cu 0,2–1,9.

Амамбайский россыпной узел **(Ам)** охватывает несколько малых россыпей в правых притоках р. Б. Караганка и прилегающих сухих логах. Источниками золота служили золото-кварцевые месторождения в северной части узла и зоны с прожилково-вкрапленным золото-сульфидным оруденением. Наиболее полная информация имеется по россыпи Александровская III на участке Лисьи Горы. Золотоносным является слой глин с «кавардаками» – гетитовыми бобовинами, который располагается на глубине 0,5–2 м. Размер золотин достигает 12 мм, состав центральных частей зерен РМЕ-1, Тр1-4 (мас. %): Au 94–96; Ag 2–8; Cu 0–0,1. В зерне Тр1-15 содержание золота 91 %. Новообразованное золото образует тонкие (3–10 мкм) высокопробные каймы, с содержанием (97,16–100,00 %). Высокопробная кайма имеет мощность 3–10 мкм, иногда прерывистая или отсутствует.

Суундукский россыпной узел **(С)** включает Михайловскую, Колчинскую, Болотскую и Назаровскую россыпные полосы, протяженностью от 7 до 15 км. Из россыпей этого узла было добыто около 6 т золота [3]. Основная золотоносность связана с меловыми отложениями, заключенными в виде «косых пластов» в карстовых полостях, а также залегающими выше красноцветными миоценовыми глинами с «кавардаками». Менее продуктивны

аллювиально-пролювиальные, аллювиально-делювиальные миоценовые и плиоценовые россыпи. В целом по Суундукскому узлу А.Г. Галимовым указана пробность золота 834–993 ‰ (средняя 943).

В Михайловской россыпи преобладают комковидные, угловатые и чешуйчатые золотины с пробностью от 920 до 993, средняя 937 ‰. В Колчинской россыпи измерен состав золота в пробах № 2 и 11 (мас. %): Au 97–99; Ag 0,1–2; Cu 0,2.

Состав наночастиц золота из Назаровской россыпи (мас. %): Au 86–87, Ag 12, Cu 0.1, кроме этого получены одиночные анализы золота с содержанием Au 97–99 % [4]. Такой же состав измерен в пробах № 6 и 10 (мас. %): Au 98–99, Ag 0,2–0,6, Cu 0,2.

Обсуждение результатов

Богатство рассматриваемой россыпной зоны в отношении благородных металлов обусловлено сочетанием обширного набора россыпеобразующих рудных формаций: золото-родингитовой, золото-кварцевой, золото-лиственитовой, золото-сульфидной, золото-скарновой [12; 10]. Каждой формации характерен определенный набор рудных минералов, которые образуют микровключения в золоте россыпей.

Сравнение микровключений с минералами известных золоторудных месторождений показало, что для всех выделений могут быть подобраны реальные источники и по наличию соответствующих минералов и по пробности золота.

Месторождение Золотая Гора является единственным возможным источником тетрааурикуприда и аурикуприда в Нижне-Карабашской россыпи. Состав золота, находящегося в сростках с тетрааурикупридом и в россыпи одинаков (мас. %): Au 86, Ag 13, Cu 1.

Хромитовые руды Карабашского и Таловского гипербазитовых массивов служили источниками включений платиноидов в зернах золота из Киалимской россыпи. Об этом свидетельствуют включения осмия рутений-иридиевого, выявленные в Карабашском массиве [5]. Пробность идентична в золоте, вмещающем платиноиды, и в россыпи (920–930 ‰). В северной части Таловского гипербазитового массива выявлена хромитовая минерализация [6]. Здесь располагаются Сардаткульское месторождение, в котором присутствуют полосчатые руды, рудопроявления Индаштинское и Тыелгинское. Минералогия этих объектов не изучена и исследования в этом направлении могут быть результативны для выявления коренного платиноидного оруденения.

Золото-сульфидное месторождение Орловское в головке Сулейменовской россыпи [14], могло являться источником микровключений галенита. Минерализация на этом месторождении приурочена к сульфидизированным базальтам с кварц-карбонатными прожилками. Золото связано с галенитом, пиритом, арсенопиритом, халькопиритом.

Золото-сульфидные месторождения Ильинского рудного поля (Муртыкты и Ик-Давлят) поставляли в Поляковскую россыпь галенит, арсенопирит, халькопирит, пирит, пирротин. Тип этих месторождений галенит-арсенопиритовый. В верховьях р. Уй находятся другие возможные источники сульфидов для Поляковской россыпи – месторождения Большой и Малый Каран. Первое относится к золото-сульфидной, второе – к золото-кварцевой формации [14], но в обоих случаях тип минерализации золото-галенитовый.

Одним из источников россыпей Миндякской зоны было одноименное золото–сульфидное месторождение [7]. Минерализация концентрируется в тектонической пластине, сложенной хаотическим нагромождением серпентинитов, пироксенитов, габбро и диабазов.

Источником россыпей Суундукской зоны являются золото-сульфидно-кварцевые жилы близ расположенного Айдырлинского рудного поля. В нем насчитываются сотни жил протяженностью до 1,2 км, из которых добывалось золото, вольфрамит и шеелит. Глубина шахт достигала 187 м (жила Миасская).

Таким образом, выполненное исследование микровключений рудных минералов позволило показать связь конкретных месторождений с россыпями: золото-родингитовым Золотая Гора; Карабашскими колчеданными; золото-сульфидными Муртыкты, Ик-Давлят, Орловским; золото-арсенопиритовыми Бол. и Мал. Каран. Такое заключение оказалось возможным сделать в связи с высокой поисковой и минералогической изученностью рудных полей Южного Урала и выявлением рудных микровключений в россыпном золоте. Ранее выполненные работы на востоке Сибирской платформы и на Аляске приводили к определению лишь возможных типов россыпеобразующих формаций [11; 15].

Россыпные месторождения в условиях использования современных высокопроизводительных технологий отрабатываются за короткий период, поэтому для традиционных рудно-россыпных узлов и районов встает вопрос о перспективах оценки территории на коренное оруденение. Аргументированный ответ может быть получен, если будет дана объективная металлогеническая интерпретация россыпной золотоносности, когда россыпи будут классифицированы по видам и формам связи с первоисточниками.

Авторы признательны В.А. Котлярову, Е.В. Зайковой, М.Е. Романенко, О.Л. Бусловской за помощь при подготовке статьи.

Исследования поддержаны РФФИ (15-05-0311) и Госзаданием Минобрнауки РФ (33.2644.2014).

Библиографический список

1. Альбов, М.Н. Вторичная зональность золоторудных месторождений Урала / М.Н. Альбов. – М.: Госгеолтехиздат, 1960. – 215 с.

2. Баранников, А.Г. О россыпеобразующем потенциале золоторудных формаций Урала / А.Г. Баранников // Геология, поиски и разведка рудных и нерудных полезных ископаемых: Межвуз. научн. темат. сб. – Свердловск: Изд-во СГИ, 1989. – С. 49–53.

3. Баранников, А.Г. Золотоносность Гогинского рудно-россыпного района (Южный Урал) / А.Г. Баранников. – Екатеринбург: Изд-во УГГУ, 2006. – 197 с.

4. Баранников, А.Г. Морфологические разновидности и нанорельеф поверхности самородного золота разновозрастных россыпей Урала / А.Г. Баранников, Б.М. Осовецкий // Литосфера. – 2013. – № 3. – С. 85–105.

5. Благородные металлы в рудах и древних золотых изделиях Южного Урала / В.В. Зайков, А.Д. Таиров, Е.В. Зайкова и др. – Екатеринбург: УрО РАН, 2012. – 232 с.

6. Геология, петрогеохимия и хромитоносность гипербазитовых массивов Южного Урала / Д.Е. Савельев, В.И. Сначев, Е.Н. Савельева, Е.А. Бажин. – Уфа: ДизайнПолиграфСервис, 2008. – 320 с.

7. Знаменский, С.Е. Структурный и литологический контроль золото-сульфидного оруденения месторождения Миндяк (Магнитогорская мегазона Южного Урала) / С.Е. Знаменский, С.В. Мичурин // Металлогения древних и современных океанов – 2012. Гидротермальные поля и руды: материалы восемнадцатой научной молодежной школы. – Миасс: ИМин УрО РАН, 2012. – С. 165–169.

8. Иванищев, А.В. Отчет по теме «Систематизация и разбраковка золоторудных месторождений Свердловской и Челябинской областей» / А.В. Иванищев. – Екатеринбург, Челябинск, 2005.

9. Казаков, П.В. Полезные ископаемые Республики Башкортостан (россыпное золото) / П.В. Казаков, Д.Н. Салихов. – Уфа: Гилем, 2006. – 288 с.

10. Месторождения золота Урала / В.Н. Сазонов, В.Н. Огородников, В.А. Коротеев, Ю.А. Поленов. – Екатеринбург: ИГиГ УрО РАН, 2001. – 622 с.

11. Никифорова, З.С. Типоморфизм россыпного золота как показатель генезиса россыпей и коренных источников (Восток Сибирской платформы) / З.С. Никифорова. – Новосибирск: ИГиМ СО РАН, 2014. – 37 с.

12. Овчинников, Л.Н. Полезные ископаемые и металлогения Урала / Л.Н. Овчинников. – М.: Геоинформмарк, 1998. – 412 с.

13. Петров, Ю.М. Отчет «Составление карты россыпной золотоносности республики Башкортостан» / Ю.М. Петров. – Уфа, 1999.

14. Полезные ископаемые Республики Башкортостан (золото). Часть 1 / Д.Н. Салихов, С.Г. Ковалев, Г.И. Беликова, П.Г. Бердников. – Уфа: Экология, 2003. – 222 с.

15. The application of Microchemical Analysis of alluvial Gold Grains to the Understanding of Complex Local and Regional Gold mineralization: A Case Study in the Irish and Scottish Caledonides / R.J. Chapman, R.C. Leake, G. Moles et al. // Economic Geology. 2000. 95. Pp. 1753–1773.

К содержанию

УДК 553.411(470.5)

АЛЕКСАНДРОВСКОЕ ЗОЛОТОРУДНОЕ ПОЛЕ (ЮЖНЫЙ УРАЛ)

В.В. Зайков [1,2], А.М. Юминов [1,2], В.А. Муфтахов [1,2], М.Е. Романенко [1]

По результатам проведенных работ на территории Александровского поля выделены три золотоносные зоны, насыщенные проявлениями бурых железняков. В центральной части золотоносных зон развиты продукты окисления прожилково-вкрапленных сульфидных руд, а по периферии – в разной степени лимонитизированные породы. Полученные данные указывают на необходимость проведения на участке специализированных поисков на выявленные типы оруденения.

Ключевые слова: Амамбайский участок, Александровское золоторудное поле, золотое оруденение.

Александровское золоторудное поле находится в 1–3 км северо-западнее одноименного поселка (Кизильский район, Челябинской обл.) и располагается на южном фланге Гумбейской островодужной зоны девонского возраста [5; 9]. Оно приурочено к антиклинали, ядро которой сложено вулканогенно-осадочными отложениями гумбейской свиты (D_2gm), а крылья и периклинальное замыкание складки – осадочными отложениями новобуранной свиты (D_2nb).

В пределах поля выделены три линзовидные золотоносные зоны (Северная, Южная и Западная), насыщенные проявлениями бурых железняков, в том числе баритсодержащих (рис. 1). Северная зона выделена по комплексной литогеохимической аномалии Cu+Ba [10], южная – по элювиальной россыпи [4]. С этими зонами совпадают аномалии ВП, фиксирующие прожилково-вкрапленную сульфидную минерализацию [8].

С целью выявления колчеданных залежей в период 1965–1976 гг. специалистами Челябинской ГРЭ в исследуемом районе проводился ряд комплексных геолого-разведочных работ, в результате которых на отдельных участках буровыми скважинами были вскрыты зоны, несущие прожилково-вкрапленную сульфидную минерализацию. Максимальное содержание золота в бурых железняках и сульфидизированных породах достигло 1,2 г/т.

Геофизическими работами было выявлено несколько аномалий ВП, расположенных 3 км севернее пос. Александровский [8]. Размеры аномальных зон достигают 900×600 м и имеют несколько вытянутую в меридиональном направлении форму. Максимальные значения поляризации пород ($\eta_к$) составляет 6,3 %, удельного сопротивления ($\rho_к$) – 600 Ом*м. Отмечается тенденция уменьшения $\rho_к$ до 300 Ом*м на северном окончании участка.

[1] Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Миассе
[2] Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс

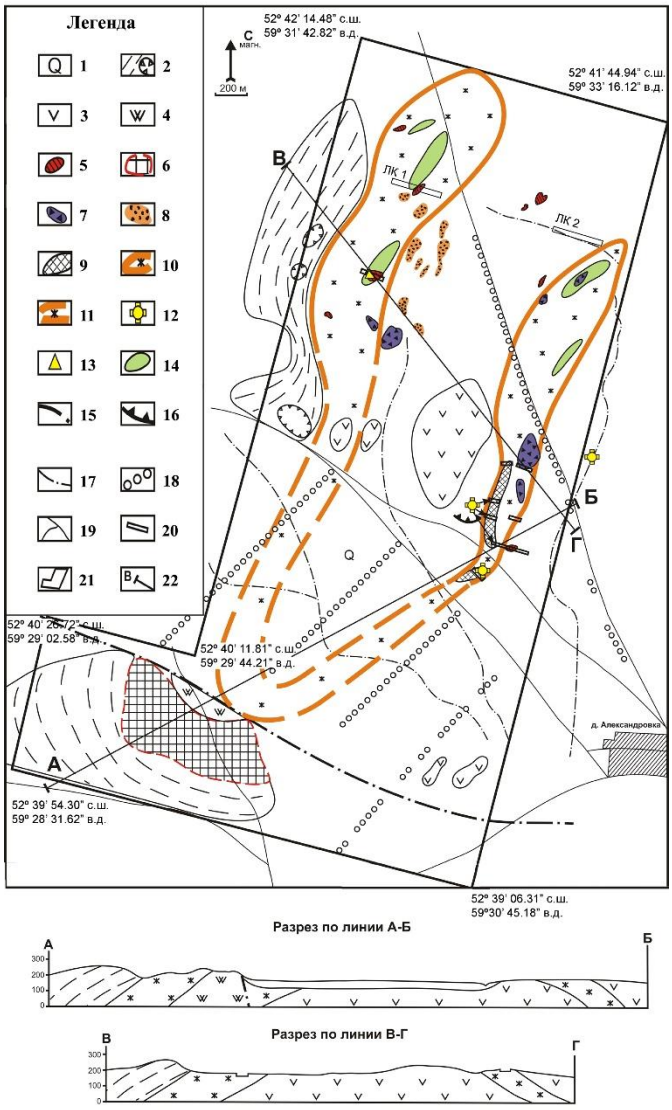


Рис. 1. Схема строения Александровского золоторудного поля

1 – четвертичные отложения, 2 – силициты и алевролиты с контурами карьеров по добыче щебня, 3 – андезибазальты и вулканомиктовые отложения; 4 – метасоматические кварциты; 5 – зона окисления; 6 – высыпки бурых железняков; 7 – скопления обломков кварца; 8 – участки распространения «бобовин»; 9 – контуры старательских выработок; 10 – контуры золотоносных зон установленные; 11 – контуры золотоносных зон предполагаемые; 12 – находки россыпного золота; 13 – проявления золота в зоне окисления; 14 – основные литогеохимические аномалии Cu+Zn+Pb, 0,03–0,1 %; 15 – разломы; 16 –реликты дамбы; 17 – лога; 18 – лесополосы; 19 – дороги; 20 – канавы; 21 – участок оценочных работ; 22 – разрезы

По мнению Г.Ю. Черныша и др., аномалиеобразующие объекты, представлены зоной вкрапленной сульфидной минерализации, а ее верхняя кромка находится на глубине порядка 35–40 м [8].

В 1992–2004 гг. авторами была предпринята попытка уточнения геологической позиции выявленных золотоносных зон [2; 6]. При изучении золотоносной россыпи, приуроченной к Южной зоне, были выявлены находки субрудного золота размером от долей мм до 1,2 см. Неокатанная и слабоокатанная форма золотин свидетельствует о близком расположении коренного источника. Пробность золота варьирует в пределах 900–999 ‰. Примеси представлены серебром (до 10 %) и медью (0–0,3 %). По периферии отдельных золотин, фиксируется выделение новообразованного золота, образующего тонкие (3–10 мкм) высокопробные каймы незначительной мощности.

В это же время на участке были проведены термобарогеохимические исследования гематит-кварцевых построек, расположенных на границе гумбейской и нововоронинской свит. Выявленное сходство состава и температурных режимов минералообразующих растворов с кварцевыми жилами золотоносных зон, послужило основанием для выделения золотоносной гидротермальной системы Лисьи Горы [3], охватывающей Александровское золоторудное поле.

Северная и Южная зоны имеют северо-восточное простирание, причем южные фланги перекрыты четвертичными отложениями. Западная зона образует периклинальное замыкание антиклинали и в целом имеет северо-западное простирание. Она отделена от Северной и Южной зон депрессией шириной 1–1,5 км, заполненной четвертичными отложениями. По южному фасу депрессии проходит разлом северо-западной ориентировки, которым ограничен замок складки. Приподнятым является южный блок, амплитуда перемещения которого составляет примерно 500 м. Предполагается, что депрессия перекрывает южные фланги Северной и Южной золотоносных зон.

В центральной части золотоносных зон развиты продукты окисления прожилково-вкрапленных сульфидных руд, представленными бурыми железняками, охрами и сыпучками. На периферии преобладают в разной степени лимонитизированные породы. Соотношение этих разностей варьирует в пределах 2:1 – 1:2. Данные анализов показали, что в продуктах окисления содержания золота достигает 8 г/т.

Золотоносная зона окисления, вскрытая канавами, сложена красно- и пестроцветными глинистыми продуктами с гетитовым, гематитовым и тодорокитовым обохриванием. На отдельных участках в глинах присутствует обломки бурых железняков размером от первых см до 10–15 см в поперечнике. Бурые железняки в основном сложены гетитом, значительно реже встречаются гематит и барит. Последний образует пленчатые и прожилковидные выделения. В составе глин преобладает каолинит. Глины пронизаны сетью прожилков и содержат гнездовую вкрапленность гематита черного цвета. Возможно, эти прожилки наследуют черты прожилковой сульфидной минерализации. Ориентировка прожилков хаотическая. Характерной особенностью глинистого материала является обилие галлуазита, образующего

волокнистые нарастания на трещинах. Пестроцветные глины образуют отдельные тела мощностью 10–25 м, разделенные нерудными интервалами, и фиксируются на протяжении 250–300 м. На периферии изучаемой зоны наблюдается постепенное уменьшение интенсивности рудной минерализации.

Для выделенных зон характерны кварцевые жилы, среди которых можно выделить два типа. К первому относятся относительно крупные (мощность 2–7 см, в отдельных случаях до 30 см) крутопадающие (аз. падения 285º, угол падения 80º) жилы, сопровождаемые хлорит-серицит-кварцевыми метасоматитами. Породы в значительной мере лимонитизированы и при дезинтеграции на поверхности создают развалы бурых железняков. Жильный кварц темно-серого цвета сливного облика, на отдельных участках серый, разнозернистый. В жилах отмечено присутствие псевдоморфоз лимонита по пириту, замещающих как отдельные зерна, так и кристаллы кубической формы, размером от 1–7 мм.

Второй тип кварцевых жил характеризуются значительно меньшей мощностью 0,5–1 см и иными элементами залегания (аз. падения 305º, угол падения 70º). Жилы группируются в отдельные рои, находящихся на удалении 5–15 м друг от друга, либо образуют одиночные тела, что более распространено на периферии зон. Текстура кварца однородная, реже мелкоблочная, иногда присутствуют друзовые полости. Величина зерен не превышает 0,3 мм. Местами по поверхности минерала фиксируются значительные выделения гидрооксидов железа, что свидетельствует о первичном сульфидном оруденении жилы.

Для оценки прогнозных ресурсов коренных руд и зон окисления Александровское золоторудное поле можно сопоставить с двумя типами промышленного оруденения Урала: золото-сульфидным (Муртыктинская группа, Ильинское рудное поле, Учалинский район) или золото-серебряным (Куросанская группа, Верхне-Уральский район). Оба типа характеризуются прожилково-вкрапленным распределением золотоносных сульфидов и сульфосолей в рудных телах. С первым сближает приуроченность к андезибазальтам и протяженный характер золотоносных зон, в целом совпадающий с залеганием рудовмещающей толщи [1; 7]. Для второго типа характерно наличие серицит-кварцевых метасоматитов в кровле вулканогенной толщи, ассоциацией с гематит-кварцевыми гидротермальными отложениями [5].

Полученные данные свидетельствуют о целесообразности дальнейшего проведения разведочных работ на участке. К первоочередной задаче относится вскрытие выделенных на рудном поле аномалии ВП, которые приурочены к золотоносным зонам (аномалия в южной части южной зоны в пределах элювиальной россыпи золота), а также оконтурить и выделить рудные тела в зонах с прожилково-вкрапленной сульфидной минерализацией. Кроме того, необходимо установить распределение золоторудной минерализации в зоне окисления по всем разновидностям продуктов окисления

(бурым железнякам, охрам, сыпучкам), выделить рудные тела в зоне окисления и установить их соотношение с прожилково-вкрапленной сульфидной минерализацией; установить распределение золота.

Библиографический список

1. Белогуб, Е.В. Минералогия окисленных руд золото-полиметаллического месторождения Ик-Давлят (Южный Урал) / Е.В. Белогуб, К.А. Новоселов, В.А. Котляров, И.Б. Фадина // Записки РМО. – 2006. – Ч. CXX XV, № 5. – С. 35–43.

2. Перспективы золотоносности Южно-Амамбайского участка: отчет по хоздоговорной теме / Институт минералогии УрО РАН; рук. Зайков В.В.; исп. Юминов А.М. [и др.]. – Миасс: ИМин УрО РАН, 2004. – 134 с.

3. Зайков, В.В. Гематит-кварцевые постройки золотоносного поля Лисьи горы – результат гидротермальной деятельности в Магнитогорской палеоостроводужной зоне (Южный урал) / В.В. Зайков, Н.Н. Анкушева // Литосфера. – 2013. – № 5. – С. 53–74.

4. Составление карты девонских металлоносных отложений масштаба 1:200 000 Магнитогорской площади с целью прогноза месторождений цветных и благородных металлов: отчет по хоздоговору / Институт минералогии УрО РАН; рук. Масленников В.В.; исп. Зайков В.В. [и др.]. – ИМин УрО РАН, 1999. – 112 с.

5. Михайлов, И.Г. Золотоносность Восточно-Магнитогорской палеоостровной дуги (Ю. Урал) / И.Г. Михайлов, Т.Н. Сурин, В.В. Зайков // Металлогения древних и современных океанов. Формирование и освоение месторождений в островодужных структурах: Мат-лы XXI научн.школы. – Миасс: ИМИН УрО РАН, 2003. – С. 60–69.

6. Новоселов, К.А. Кобальтсодержащие тодорокитовые охры золотоносного участка Лисьи Горы / К.А. Новоселов, В.В. Зайков, В.А. Котляров // Минералогия Урала-2007: мат-лы V Всерос. совещ. – Миасс: ИМин УрО РАН, 2007. – С. 226–229.

7. Серавкин, И.Б. Разрывная тектоника и рудоносность Башкирского Зауралья / И.Б. Серавкин, С.Е. Знаменский, А.М. Косарев. – Уфа: Полиграфкомбинат, 2001. – 318 с.

8. Отчет о геофизических и геолого-поисковых работах, выполненных Амурской геофизической партией и Магнитогорской КГРП в ЮВ-части Кизильского р-на Челябинской области в 1964–65 гг. / Амурская геофизическая партия, Магнитогорская КГРП; рук. Черныш Г.Ю.; исп. Холоднов Л.А., Корнилов А.А. – Челябинск, 1966. – 254 с.

9. Отчет Субутакского ГСО о результатах геологического доизучения м-ба 1:50 000 групповым методом Субутакской площади в Брединском, Кизильском и Агаповском районах Челябинской области за 1979–84 гг. / Субутакский геологосъемочный отряд; рук. Шалагинов Э.В.; исп. Глызин Ю.С. [и др.]. – Челябинск, 1984. – 186 с.

10. Отчет геохимического отряда Челябинской поисково-съемочной партии по комплексным литогеохимическим поискам медных руд в Субутак-Амамбайской металлогенической зоне в 1971–75 гг. / Челябинская поисково-съемочная партия; рук. Юшков Ю.Н.; исп. Кислицин П.А. [и др.]. – Челябинск, 1975. – 210 с.

К содержанию

УДК 553.68(470.5) + 552.322.2(470.5)

РЕДКОМЕТАЛЛЬНАЯ РУДОНОСНОСТЬ ГРАНИТОИДНОГО СЫРОСТАНСКОГО МАССИВА (ЮЖНЫЙ УРАЛ)

Е.П. Макагонов[1,2], В.А. Муфтахов[1,2]

В работе рассмотрено строение Сыростанского гранитоидного массива. Максимальные концентрации ниобия, иттрия, редкоземельных и радиоактивных элементов приурочены к породам поздней жильной фации – гранитным дайкам и пегматитам. Редкоземельно-редкометалльная минеральная ассоциация Сыростанского массива и ее химические особенности позволяют выделить характерную Nb-Ta-Y-REE-Tn-U-Zr специализацию района. Предполагается, что через Сыростанский массив проходит меридиональный пояс с цепочечно-поясовым распределением редкометалльных проявлений, параллельный Главному гранитному поясу Урала.

Ключевые слова: Сыростанский массив, редкоземельно-редкометалльная минерализация, гранитоидный массив.

Сыростанский гранитный массив вместе с Тургоякским и Атлянским массивами занимают особое положение в структуре Урала. Они находятся границе рифейского Центрально-Уральского поднятия и палеозойской Магнитогорской мегазоны. Он сформировался в ранне-среднекаменноугольное время. Возраст цирконов из габброидов и ассоциирующих с ними гранодиоритов, определенный радиоизотопным $^{207}Pb/^{206}Pb$-методом, составил 334 ± 5 млн лет; прорывающих их гранитов 327±4 млн лет [7]. По некоторым данным возраст гранитоидов Сыростанского массива оценивается в 304±6 млн лет [3].

За длительный период изучения массивов были рассмотрены вопросы формирования главных магматических фаз массива, геохимия пород, состав породообразующих и акцессорных минералов [9, 12, 13, 14, 18].

Вместе с тем практически не отражены вопросы состава поздних даек лейкогранитов, аплитов и пегматитов связанных с редкометалльной и редкоземельной минерализацией.

Строение Сыростанского массива

Сыростанский массив площадью около 70 км^2 имеет овальную форму, вытянутую в северо-западном направлении; залегает в слюдяно-гранатовых, слюдяно-ставролитовых сланцах, кварцитах и мраморах уйташской и уреньгинской свит рифейского возраста (рис. 1).

[1] Южно-Уральский государственный университет (НИУ), филиал в г. Миассе/
[2] Институт минералогии УрО РАН, Миасс/

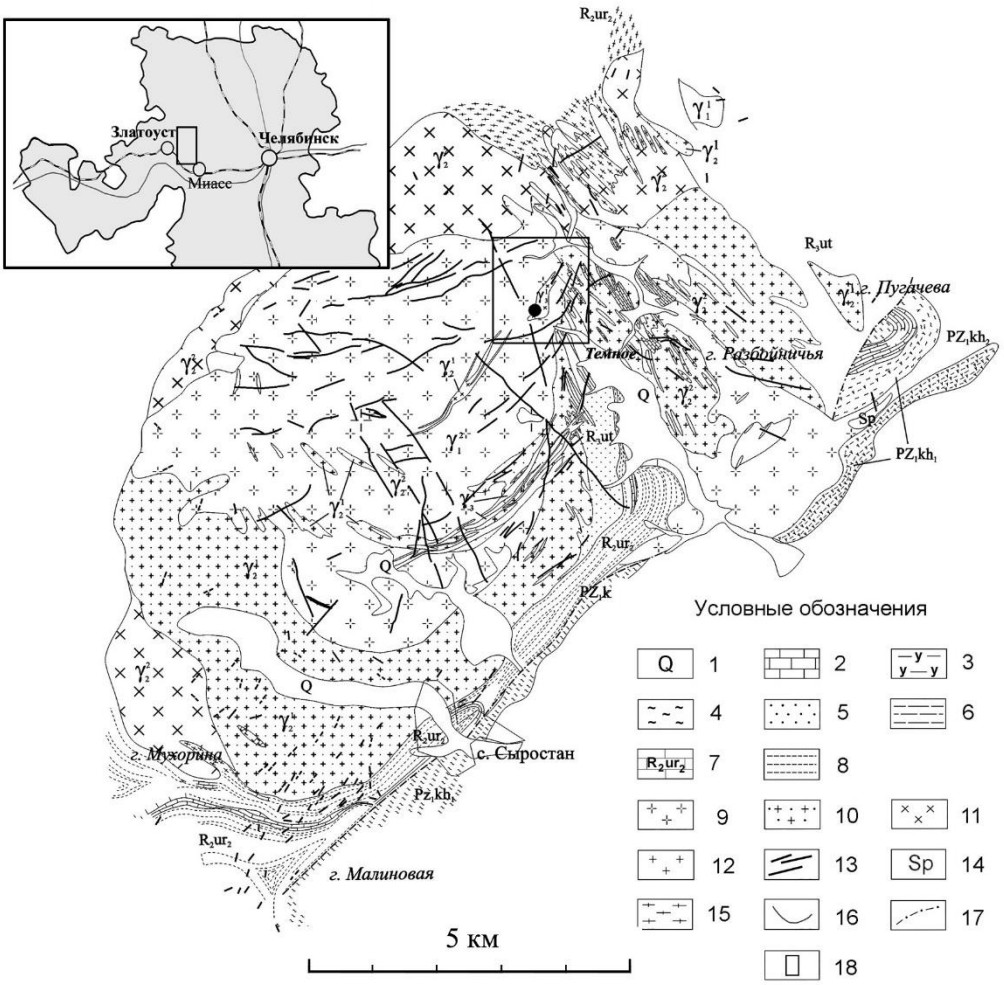


Рис. 1. Геологическое строение Сыростанского гранитного массива (по [4])
1 – четвертичные отложения (Q); 2–4 *нижний палеозой*. Куштумгинская свита (Pz_1kh): 2 – мрамора; 3 – углистые сланцы; 4 – глинистые сланцы; 5–8 *верхний протерозой (PR2);* 5–6 верхний рифей (R_3), уйташская свита (R_3ut): 5 – кварциты; 6 – слюдяно-кварцевые сланцы; 7–8 – средний рифей (R_2), уреньгинская свита (R_2ur_2): 7 – мраморизованные известняки; 8 – слюдяно-кварцевые сланцы; 9 – розовые среднезернистые порфировидные биотитовые граниты (γ_1^1); 10 – мелкозернистые биотитовые граниты, плагиограниты, гранодиориты (γ_2^1); 11 – мелкозернистые гранодиориты, кварцевые диориты, диориты (γ_2^2); 12 – жильные граниты (γ_3^1); 13 – пегматиты и жильный кварц; 14 – серпентиниты (Sp); 15 – гнейсы; 16 – границы комплексов пород; 17 – линии разрывных нарушений; 18 – Участок Темное царство

Массив имеет концентрически-зональное строение. По периферии развиты габброиды, монцониты, монцодиориты, гранодиориты, кварцевые диориты, диориты.

Внутренние части массива сложены розовыми среднезернистыми и порфировидными биотитовыми гранитами.

Поздние жилы гранитов, гранит-порфиров, плагиогранит-порфиров косо секут тела пород предшествующих фаз.

Помимо интрузивных образований на описываемой площади широко распространены кварцевые жилы, часть из которых содержит флюорит, берилл, молибденит, золото. Наибольшее количество жил отмечается в северо-западной и северной частях массива. Постмагматические преобразования незначительные: грейзенизация, серицитизация и альбитизация.

Наибольшее количество тантало-ниобатов содержат пегматиты в северной части массива в урочище Темное Царство.

Строение пегматитов грубозональное: со стороны висячего контакта мелкозернистые граниты при приближении к пегматитовой жиле переходят в среднезернистые. Эндоконтактовая зона сложена крупнозернистыми гранитами графической структуры мощностью до 8 м; далее – блоковая зона кварц-полевошпатового состава и в центре монолитный кварц. Со стороны лежачего бока пегматита оторочка тонкозернистого альбита толщиной 20 см. В экзоконтакте лежачего бока пегматита залегают среднезернистые лейкократовые граниты.

Геохимия и минералогия массива

Сыростанский массив совместно с рядом расположенными Атлянским и Тургоякским массивами относятся к монцодиорит-гранитной формации. Эти массивы выделяются повышенным содержанием стронция [15].

В табл. приведены средние содержания редких и редкоземельных элементов в породах основных магматических фаз Сыростанского массива, вычисленные по данным в [13, 15].

Наименьшее количество Zr, Hf, Be содержится в горнблендитах. Содержание Zr и Hf повышаются в диоритах и анатектических гранитах, а затем уменьшаются при переходе к интрузивным гранитоидам. Содержание Be возрастает к концу формирования массива. Для остальных элементов, приведенных в табл., наблюдается общая тенденция: снижение содержаний элементов по мере формирования главных магматических фаз массива. Ферштатер Г.Б. и др. [15] отмечают четкие аномалии Nb и Ti в породах основного и среднего состава, низкие содержания РЗЭ, в особенности тяжелых, и четкую отрицательную Eu аномалию. В поздних дифференциатах – гранатовых аплитах – наименьшие концентрации РЗЭ и положительная Eu аномалия.

Металлометрические аномалии ниобия расположены в верхней северо-восточной половине массива. Наибольшее количество аномалий выявлено в верховьях р. Малый Сыростан в урочище Темное царство. Обогащены висячие бока крупных гранитных даек. Максимальные концентрации приурочены к гранитным пегматитам. Участки с бериллиевыми аномалиями приблизительно совпадают с ниобиевыми (рис. 2).

В диоритах, гранодиоритах и гранитах обычен акцессорный циркон. В гранитах отмечаются акцессорные минералы: циркон, фергусонит-(Y),

манганколумбит, ильменит, рутил, ильменорутил, самарскит, пирохлор, монацит. В грейзенизированных гранитах добавляются лейкоксен, золото, берилл. Редкие выделения берилла обнаружены были в кварцевых жилах и пегматитах, залегающих в грейзенизированных гранитах.

Таблица 1

Содержание редких и редкоземельных элементов
в породах Сыростанского массива (г/т)

Компоненты	1	2	3	4	5	6	7
Sr	1419,7	1545,0	1105,8	897,0	925,6	661,7	764,0
Be	1,9	1,3	1,8	1,0	2,4	2,1	2,7
Zr	166,6	146,8	178,3	107,2	166,8	147,0	145,0
Hf	4,6	4,6	4,7	2,7	4,9	4,4	3,4
Nb	17,7	13,3	16,7	7,6	12,9	13,7	4,6
Ta	1,1	0,9	1,3	0,5	1,1	1,1	0,2
Y	22,7	20,2	16,7	15,3	9,3	10,6	5,4
La	46,0	42,2	34,5	31,9	45,9	31,1	45,4
Ce	96,7	86,9	83,9	67,6	80,0	69,6	78,1
Pr	11,7	10,6	8,7	8,4	7,9	6,1	7,4
Nd	44,7	40,7	32,5	32,9	25,5	20,5	22,8
Sm	7,3	6,7	5,7	5,3	3,5	3,4	2,7
Eu	2,2	1,9	1,5	1,7	0,8	0,6	0,9
Gd	5,6	5,0	4,4	3,9	2,5	2,6	1,7
Tb	0,8	0,7	0,6	0,6	0,3	0,4	0,2
Dy	4,3	3,9	3,3	3,1	1,4	2,1	1,1
Ho	0,9	0,8	0,6	0,6	0,4	0,4	0,2
Er	2,2	2,0	1,6	1,5	0,9	1,1	0,6
Tm	0,3	0,3	0,2	0,2	0,1	0,2	0,1
Yb	2,0	1,8	1,4	1,3	0,9	1,0	0,6
Lu	0,3	0,3	0,2	0,2	0,1	0,2	0,1
LRE	208,7	189,1	166,8	147,7	163,5	131,2	157,2
TRE	16,4	14,7	12,4	11,3	6,8	7,9	4,5
LRE/TRE	12,7	12,8	13,5	13,0	24,1	16,6	34,9
количество проб	7	5	5	1	5	11	1

Примечание: 1 – габбро мелкозернистое; 2 – габбро среднезернистое; 3 – диорит; 4 – горнблендит; 5–6 – гранитоиды (5 – анатектические, 6 – интрузивные); 7 – адамеллит-порфир [13]

В породах главных фаз массива из минералов, содержащих редкие и редкоземельные элементы, распространен акцессорный алланит-(Ce). Редкие выделения берилла обнаружены были в пегматитах и кварцевых жилах, залегающих в грейзенизированных гранитах. Характеристика акцессорных минералов из главных магматических фаз приводится в работах [13, 15].

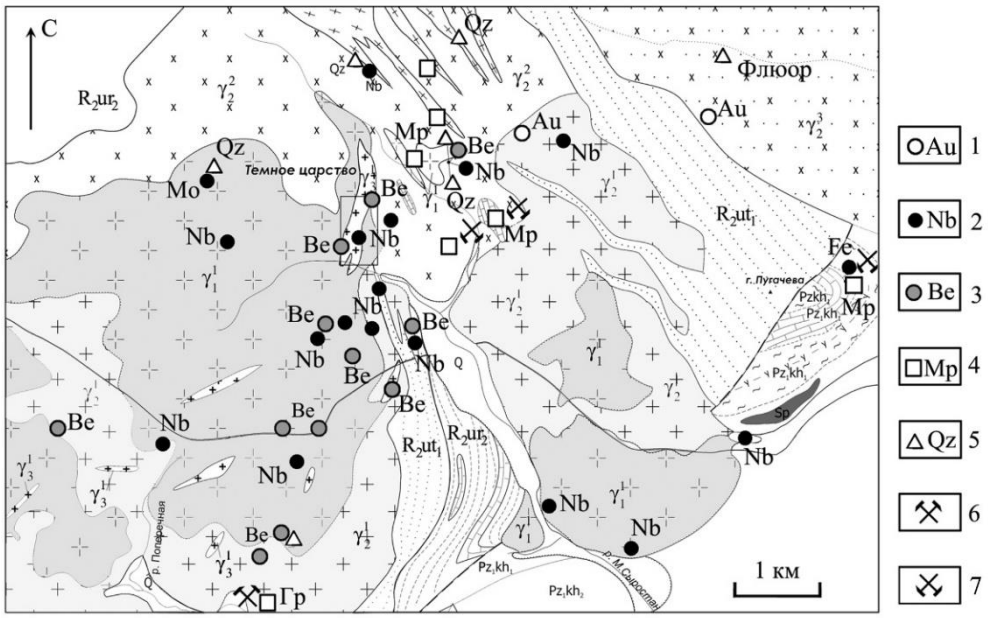


Рис. 2. Проявления и месторождения металлов и неметаллических полезных ископаемых в Сыростанском массиве (упрощенная по [4]):
1 – золота Au; 2 – металлов (ниобий Nb, молибден Mo, железо Fe);
3 – бериллия Be; 4 – строительных материалов (мрамор Мр, гранит Гр);
5 – кварца Qz, флюорита Флюор; 6 – эксплуатируемые; 7 – отработанные

Основная редкометалльная минерализация приурочена к жильным гранитам и пегматитам. Количество Ta и Nb в гранитах достигает самых высоких пределов среди подобных массивов Урала (14 г/т Ta и 80 г/т Nb, соответственно) при минимальных содержаниях Ce и La – 12 г/т [9]. Незначительно возрастает и содержание Be: в гранодиоритах 2,9 г/т, в гранитах 3,3 г/т.

В биотитовых гранитах дайки Темное отмечается редкая вкрапленность ниобатов. В лейкократовых жильных гранитах распределение тантало-ниобатов неравномерное, гнездообразное, содержание в гнездах до 265 г/т.

Наибольшие содержания ниобатов приурочены к блоковой кварц-полевошпатовой зоне. В этой зоне онтогеническими наблюдениями устанавливается неоднократное приоткрывание трещин. Часто первичные тонкие трещины выполнялись биотитом, ильменитом, гематитом и магнетитом. При следующем приоткрывании трещин на пластинки этих минералов и на поверхности стенок трещин в полевом шпате нарастали друзовые агрегаты буровато-красного спессартина, совместно с выделениями циртолита, тантало-ниобатов, мусковита, магнетита. В основании таких агрегатов четко прослеживаются зоны геометрического отбора.

В дальнейшем происходила цементация ранних минеральных ассоциаций полевыми шпатами и кварцем с выделениями тех же минералов, а также рутила, алланита, магнетита. В поздние стадии остаточные пустотки выполнялись кристаллами и агрегатами пирита. В зоне выветривания сульфиды выщелочены и породы приобрели ноздреватый облик и жёлто-коричневый цвет.

В настоящее время в Сыростанском массиве обнаружены следующие минералы редких элементов: алланит-(Ce), циркон (циртолит), титанит, берилл, торогуммит*, ильменит, ильменорутил, фергусонит-(Y), поликраз-(Y)*, эвксенит-(Y)*, самарскит-(Y), рутил, манганоколумбит, ферроколумбит, уранинит*, монацит. Звездочкой отмечены минералы установленные авторами.

Заключение

Представления о механизме формировании массива изменялись. По ранней версии массив сформировался в три этапа: метасоматоз магматической стадии (фации экзоконтактов); расплавление и интрузивное внедрение гранитной магмы и жильных дериватов (биотитовые плагиограниты и граниты, жильные граниты, пегматиты); постмагматическое замещение с микроклинизацией, альбитизацией, грейзенизацией [9, 12]. Граменицкий Е.Н. [1] предполагает магматическое замещение. Ферштатер Г.Б. и др. [13, 15] выделяют группы: субавтохтонную анатектическую с породами гнейсовидной текстуры и интрузивную. В группах одинаковый набор пород: габбро-гранодиорит – гранит – аплит и пегматит.

На Урале Nb-Ta-Ti-Y-REE-Th-U-Zr-минерализация, подобная проявленной в Сыростанском массиве, приурочена к позднепалеозойским гранитам Главного гранитоидного пояса Урала [2, 8, 10, 16, 17]. Сходная минерализация известна в пегматитах Ильменогорского комплекса. Для уральских редкометалльных проявлений характерно цепочечно-поясовое распределение в шовных зонах [5, 8]. Можно предположить, что подобный пояс, параллельный Главному гранитному поясу, проходит и через Сыростанский массив. Этот массив находится на меридиональной линии с повышенным содержанием иттрия. Южнее Сыростана располагается цепь расслоенных интрузий габбро-гранитных ассоциаций Магнитогорской серии, обогащенных редкими землями, иттрием, цирконием [2]. С северной стороны от Сыростана по восточной окраине уфалейского комплекса проходит ряд металлогенических аномалий ниобия и редких земель и полоса пегматитов с фергусонитом, самарскитом-(Y), иттроколумбитом, циртолитом и др. [5].

С другой стороны, Сыростанский массив находится на пересечении широтной Челябинско-Уфалейской структуры, к которой приурочено большинство редкометалльных проявлений Урала [2, 6]. В последнее время пегматиты Ильмен и территории массивов Сыростано-Тургоякской группы выделены в общий позднепермско-раннетриасовый блюмовский комплекс [11]. Основанием для объединения поздних жильных пород из разных зон в один комплекс послужило сходное секущее положение тел поздних магматитов, распространение их не только внутри массивов, но и за их пределами, сходство состава, редкометалльная минерализация и близкий возраст.

Библиографический список

1. Граменецкий, Е.Н. Механизм магматического замещения (на примере контактовой зоны Сыростанского массива на Южном Урале) / Е.Н. Граменецкий // Вестник МГУ. Сер.4. «Геология». – 1990. – № 3. – С. 62–77.

2. Золоев, К.К. Минерагения и месторождения редких металлов, молибдена, вольфрама Урала / К.К. Золоев, В.Я. Левин, С.И. Мормиль. – Екатеринбург: Министерство природных ресурсов РФ, ГУПР по Свердловской обл., ИГиГ УрО РАН, ЩФЩ УГСЭ, 2004. – 336 с.

3. Иванов, К.С. Главный Уральский глубинный разлом как палеозона субдукции Заварицкого–Беньофа: тектоника и петрогенезис важнейших породных комплексов / К.С. Иванов // Чтения А.Н. Заварицкого: тез. докл. науч. конф. – Екатеринбург: ИГиГ УрО РАН, 1998. – С. 75–78.

4. Отчет о геолого-разведочных работах по редким металлам, проведенных в 1966–67 гг. в Центральной части Сыростанского гранитного массива в районе г. Миасс Челябинской области / рук.: Н.Г. Климов, исп.: В.В. Черданцев [и др.]. – Челябинск, 1968. – 134 с.

5. Коротеев, В.А. Минералогия шовных зон Урала / В.А. Коротеев, В.Н. Огородников, В.Н. Сазонов, Ю.А. Поленов. – Екатеринбург: УрО РАН, 2010. – 416 с.

6. Левин, В.Я. Щелочно-карбонатитовые комплексы Урала / В.Я. Левин, Б.М. Роненсон, В.С. Самков. – Екатеринбург: Уралгеолком, 1997. – 274 с.

7. Монтеро, Л. Изотопное датирование Сыростанского гранитоидного массива: вклад в изучение истории развития зоны Главного Уральского глубинного разлома (предварительные данные) / Л. Монтеро, Ф. Беа, Г.Б. Ферштатер, и др. // «Чтения А.Н. Заварицкого». Проблемы петрогенезиса и рудообразования: тез. докл. науч. конф. – Екатеринбург: ИГиГ УрО РАН, 1998. – С. 106–107.

8. Овчинников, Л.Н. Полезные ископаемые и металлогения Урала / Л.Н. Овчинников. – М.: Геоинформмарк, 1998. – 412 с.

9. Овчинников, Л.Н. Длительность и этапы становления Сыростанского гранитного массива (Южный Урал) / Л.Н. Овчинников, Н.И. Тихомирова, С.Н. Вороновский // Докл. АН СССР. – 1973. – Т. 211, № 3. – С. 665–667.

10. Попова, В.И. Редкометалльно-редкоземельные минералы гранитных пегматитов Режевского района на Среднем Урале / В.И. Попова, В.А. Губин, Е.И. Чурин и др. // Записки РМО. – 2013. – № 1. – С. 23–28.

11. Геологическая съемка, геологическое доизучение масштаба 1:200000 листа N-41-VII (новая серия). Миасская площадь: отчет о результатах работ / Рук.: В.И. Петров; исп.: А.Э. Шалагинов, Б.Н. Пунегов и др. – Челябинск, 2004. – 709 с.

12. Тихомирова, Н.И. Редкие и рассеянные элементы в процессе гранитизации (на примере Сыростано-Тургоякского массива, Ю. Урал) / Н.И. Тихомирова // Геохимия. – 1971. – №2. – С. 144–154.

13. Ферштатер, Г.Б. Палеозойский интрузивный магматизм Среднего и Южного Урала / Г.Б. Ферштатер. – Екатеринбург: РИО УрО РАН. – 2013. – 368 с.

14. Ферштатер, Г.Б. Этапы палеозойского интрузивного магматизма Уральского орогена и их геохимическая интерпретация / Г.Б. Ферштатер, А.А. Краснобаев, Ф. Беа и др. // Геодинамика, магматизм, метаморфизм и рудообразование: сб. науч. тр. – Екатеринбург: ИГГ УрО РАН, 2007. – С. 89–120.

15. Ферштатер, Г.Б. Тургоякско-Сыростанская группа гранитоидных массивов зоны Главного Уральского глубинного разлома / Г.Б. Ферштатер, Е.С. Шагалов, Ф. Беа, П. Монтеро // Магматические и метаморфические образования Урала и их металлогения: сб. науч. тр. – Екатеринбург: ИГиГ УрО РАН, 2000. – С. 129–158.

16. Чащухина, В.А. Акцессорные минералы гранитоидов Мурзинско-Адуйского плутона / В.А Чащухина // Вопросы петрологии и геохимии Урала: сб. науч. тр. – Свердловск: УНЦ АН СССР, 1975. – С. 51–58.

17. Чащухина, В.А. Акцессорный поликраз из гранитов Урала / В.А. Чащухина // Минералы месторождений Урала: сб. науч. тр. – Свердловск: УНЦ АН СССР, 1987. – С. 65–67.

18. Шагалов, Е.С. Петрология и геохимия пород Сыростано-Тургоякской группы гранитоидных массивов (Южный Урал): автореф. дис. … канд. г-м. наук / Е.С. Шагалов. – Екатеринбург, 2002. – 30 с.

К содержанию

УДК 553.31 + 553.435

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ЛА-ИСП-МС ДЛЯ РАЗРАБОТКИ МИНЕРАЛОГО-ГЕОХИМИЧЕСКИХ КРИТЕРИЕВ ГЛУБОКОЙ ПЕРЕРАБОТКИ СУЛЬФИДСОДЕРЖАЩИХ РУД МЕСТОРОЖДЕНИЙ ЦВЕТНЫХ, ЧЕРНЫХ И БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

В.В. Масленников[1,2], А.С. Целуйко[1], С.П. Масленникова[2]

Методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой и лазерной абляцией (ЛА-ИСП-МС) проводятся исследования состава сульфидов колчеданных, железорудных и золоторудных месторождений. В ряду колчеданоносных формаций от ультрамафитовых к базальтовым, риолит-базальтовым, базальт-риолитовым и риолит-дацитовым в сульфидах закономерно уменьшаются содержания Fe и Co при возрастании роли летучих компонентов: Sb, As, Tl, Au и Ag. В связи с изменениями состава рудовмещающих пород и последовательным кислотным выщелачиванием определенных элементов-примесей незрелые гидротермальные системы формируют черные курильщики, богатые Fe, Co, а зрелые гидротермальные системы обеспечивают высокую концентрацию Au, Ag, Ba, Pb и Tl. Выделено три главных этапа золотонакопления на золоторудных месторождениях, приуроченных к черносланцевым формациям.

Ключевые слова: Урал, месторождения, сульфиды, элементы-примеси, золотонакопление.

В последние годы сотрудниками геологического факультета на оборудовании Института минералогии УрО РАН и Международного центра по изучению рудных месторождений (CODES, Университет Тасмании) методом масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой и лазерной абляцией (ЛА-ИСП-МС или LA-ICP-MS) проводятся исследования состава ценных и

[1] Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Миассе.
[2] Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс.

токсичных элементов-примесей в сульфидах колчеданных, железорудных и золоторудных месторождений. Эти исследования направлены на решение ряда фундаментальных генетических проблем геохимии рудообразующих процессов. Высокая производительность и необходимая чувствительность метода (мг/т), а также воспроизводимость количественных результатов анализа большинства элементов-примесей в сульфидах подтверждены несколькими специализированными работами [3; 8; 9]. Замечательная особенность метода – диагностика невидимых наноминералов.

Наибольшую информацию о гидротермально-осадочной дифференциации элементов-примесей в сульфидах несут гидротермальные трубы «черных курильщиков», сформированные в широком спектре физико-химических условий. Установлено, что колломорфный пирит, образующий оболочки труб, обнаруженных на колчеданных месторождений уральского типа, по сравнению с другими сульфидами и разновидностями пирита характеризуется повышенными содержаниями большинства из проанализированных элементов-примесей: Mn, Tl, Pb, Ni, Au, Ag, As, Sb, за исключением Se. Сфалерит как в оболочках, так и в каналах труб, традиционно концентрирует Cd, Mn, Fe, иногда Co, Sn, Hg как изоморфные примеси, а также Cu, Pb, As, Sb в виде микровключений сульфидов и сульфосолей. Для высокотемпературного халькопирита, нарастающего на внутренние стенки труб, типичными элементами примесями являются Se, Sn, иногда Te, Bi, Co, Au, Ag. Низкотемпературный халькопирит оболочек труб наследует от замещенного колломорфного пирита низкие содержания Se и повышенные – Mn и Tl. Вместе с тем, содержания элементов-примесей в изученных сульфидах значительно варьируют и находятся в зависимости от составов рудовмещающих формаций.

Элементы-примеси в сульфидах характеризуются закономерными изменениями в ряду колчеданоносных формаций: от ультрамафитовых к базальтовым, риолит-базальтовым, базальт-риолитовым и риолит-дацитовым. В колломорфном пирите последовательно нарастают содержания As, Au, Sb, Tl, Pb, Bi, Ni. В эвгедральном пирите снижаются содержания Co и нарастают содержания Ni и Se. В сфалерите растут содержания Hg, Ag, при заметном уменьшении содержаний Co и Fe. В этом же ряду, в халькопирите черных курильщиков снижаются содержания Se Co и Te, и возрастают содержания Bi, Ag, As, Sb и Pb. Максимальные содержания Te, Bi, Au отмечаются для черных курильщиков середины формационного ряда, ассоциирующих с риолит-базальтовыми и, в меньшей степени, с базальт-риолитовыми формациями. Общий тренд включает уменьшение, содержаний Fe, Co при возрастании роли летучих компонентов: Sb, As, Tl, Au и Ag. Это согласуется с положениями флюидно-магматической модели колчеданообразования, предсказывающей нарастание роли летучих компонентов к концу формаци-

онного ряда. Вместе с тем, эти же данные согласуются с изменениями состава элементов-примесей в рудовмещающих породах, в соответствии с рециклинговой моделью колчеданоносной гидротермальной ячейки. Предполагается, что эволюция гидротермальных систем базальтоидных формаций связана не только с нарастанием роли кислых вулканитов, но и последовательным кислотным выщелачиванием минералов-носителей определенных элементов примесей в ряду: оливин (Fe, Co, Ni) – пироксен (Fe, V) – роговая обманка (Bi) – полевые шпаты (Ba, Pb, Tl). В связи с этим, незрелые гидротермальные системы формируют черные курильщики, богатые Fe, Co, а зрелые гидротермальные системы обеспечивают высокую концентрацию Au, Ag, Ba, Pb и Tl. Скорость «созревания» гидротермальных систем, в свою очередь, находится в зависимости от количества кислых вулканитов.

В целом, для разработки критериев глубокой переработки колчеданных руд необходимо прогнозировать не только концентрации, но и формы нахождения ценных и токсичных химических элементов разновидностей халькопирита, сфалерита и пирита. Лучше всего это делать применительно не только к различным рудно-формационным типам колчеданных месторождений, но и в пределах каждого из типов, различая месторождения по степени гидротермальной и субмаринной гипергенной зрелости.

На месторождения атлантического типа, ассоциирующих с ультрамафитами, промышленные концентрации Au, Co и Ni несут как гидротермальный халькопирит, так и колломорфный пирит (месторождение Дергамышское на Южном Урале). В разрушенных сульфидных постройках и сильно преобразованных в стадию субмаринного гипергенеза кристаллы новообразованного пирита теряют основное количество элементов, которые становятся составляющими собственных минералов – самородного золота, сульфидов, теллуридов и арсенидов Co и Ni (Ишкининское месторождение на Южном Урале). Впрочем, при субмаринном гипергенезе сульфидных труб, борнитизация халькопирита также сопровождается выделением самостоятельных минералов – самородного золота и кобальт – пентландита $(Co,Ni)_9S_8$ (например, гидротермальные трубы полей Рейнбоу, Ашадзе в Атлантике). Все это сказывается на характере трендов импульсов ЛА-ИСП-МС анализа. Принципиально новым является открытие промышленных содержаний Sn (до 0,5%) в сфалерите черных курильщиков и диффузеров, ассоциирующих с ультрамафитами Атлантики. Олово входит в виде изоморфной примеси с состав сфалерита, а также присутствует в виде микровключений касситерита (SnO_2). Появление Sn в сульфидах связано с приносом Sn^{2+} сильно восстановленными гидротермальными флюидами. Следует отметить, что переработка руд месторождений этого типа наименее экологически опасна, поскольку пирит характеризуется низкими содержаниями потенциально токсичных элементов, таких как Tl, Pb, As и Sb.

В рудах незрелых медноколчеданных месторождений кипрского типа, ассоциирующих с базальтами, основное количество элементов примесей (Co, Se, Au, Sn, Te) присутствует, главным образом в виде изоморфной примеси в сульфидах (данные ЛА-ИСП-МС), и в первую очередь, в халькопирите. Основное количество кобальта концентрируется в эвгедральном пирите. В зрелых месторождениях этого типа, наряду с баритом и теннантитом появляется самородное золото (Менез Гвен в Атлантике). Собственно минералы Co встречаются лишь в сульфидных турбидитах.

В рудах медно-цинково-колчеданных месторождений уральского типа появляются многочисленные акцессорные минералы Co, Au, Bi, Ag, Te, As, представленные главным образом теллуридами и сульфоарсенидами, в меньшей степени теннантитом, самородным золотом и галенитом. Самородное золото концентрируется как в халькопирите, так и в сфалерите. Эти минералы появляются как на гидротермальной стадии, так и на стадии субмаринного гипергенеза. С последней стадией связано появление селенидов Ag и Pb, а также сульфидов и оксида Sn.

В рудах колчеданно-полиметаллических месторождений куроко типа теллуриды и сульфоарсениды исчезают, их место занимает электрум-галенит-тетраэдритовая ассоциация. Халькопирит лишён большинства как ценных, так и токсичных элементов-примесей. Все они концентрируются в сфалерите (Au, Ag) и галените. В связи с этим, становится необходимым выделение цинковых концентратов. Колломорфный пирит несет десятые доли процента токсичных элементов, среди которых наиболее опасными являются Tl, As и Sb. Содержания Co в сульфидах крайне низкие. Иногда пирит содержит повышенный Ni, появление которого связано с высокой фугитивностью серы гидротермальных флюидов.

Особое место занимают колчеданно-полиметаллические месторождения алтайского (иберийского) типов, залегающие на риолитах и черных сланцах. Сульфиды этих месторождений, также как и сульфиды месторождений атлантического и кипрского типов, обогащены Sn и Co. Отличительной особенность являются повышенные содержания Bi, As, Sb, Tl – элементов более характерных для месторождений куроко типа.

Применение ЛА-ИСП-МС для изучения типохимизма месторождений черных металлов (железа, марганца) является весьма перспективным. В первую очередь, это касается скарнированнных сульфидно-магнетитовых железорудных месторождений. В качестве примера, в сравнении с колчеданными месторождениями уральского (Сибайское) и атлантического (Дергамышское) типов, приведем данные по типохимизму сульфидов железорудного месторождения Сарбайское (Валерьяновская зона на северо-западе Казахстана).

По данным ЛА-ИСП-МС в *пирротине* скарново-магнетитового месторождения Сарбай отмечаются почти такие же высокие содержания Co, как

в пирите медно-цинково-колчеданного месторождения Сибай и кобальт-медноколчеданного месторождения Дергамыш (табл. 1). Эти содержания близки к минимальным промышленным, однако, этот металл из руд перечисленных месторождений до сих пор не добывается. По сравнению с пирротином Сибая, пирротин сарбайских руд характеризуется гораздо более низкими содержаниями большинства других элементов-примесей. Особенно, это касается Se – индикатора магматогенных высокотемпературных гидротермальных условий. Пониженные содержания Se могут указывать на преимущественное участие морской воды в процессах формирования пирротина скарновых месторождений.

Таблица 1

Элементы-примеси в пирротине скарново-магнетитового (Сарбайское), медно-цинково-колчеданного (Сибайское), кобальт-медноколчеданного (Дергамышское) и золоторудного (Сухой Лог) месторождений (в г/т)

Месторождение	n	V	Cr	Mn	Co	Ni	As	Se	Mo	Ag
Сарбайское	7	0,4	0,1	10	514	48	0,4	7	0,7	1,2
Сибайское	9	0,01	0,6	5	340	0,34	0,3	304	0,26	4,8
Дергамышское	5	0,8	60	11	659	700	107	97	2,6	0,8
Сух.Лог	2	0,04	0,01	10	0,001	414	1,7	10	0,2	0,4
	n	Sn	Sb	Te	Ba	Au	Tl	Pb	Bi	U
Сарбайское	7	0,04	0,1	1,8	0,2	0,008	0,003	0,5	0,2	0,03
Сибайское	9	0,2	0,1	1,2	2,2	0,006	0,03	4	3,4	0,01
Дергамышское	5	0,2	19	0,4	0,5	0,09	0,2	0,9	0,0	0,05
Сух.Лог	2	0,7	1	0,2	0,4	0,02	0,001	2	0,0	0,02

n – количество ЛА-ИСП-МС анализов.

Разновидности *пирита* с высокими содержаниями Co и Ni широко представлены в пирротиновых рудах Дергамышского кобаль-медно-колчеданного месторождения и Сарбайского скарнового месторождения (табл. 2). В аналогичном пирите Сибая содержания Ni гораздо ниже. В скарновых рудах включений Co и Ni минералов в пирите не обнаружено. На Дергамыше встречается редкий пентландит.

Наиболее выраженной особенностью *халькопирита* Сарбайского скарнового железорудного месторождения, являются промышленные средние содержания Ag (табл. 3). Судя по тренду импульсов ЛА-ИСП-МС, Ag входит в состав халькопирита в виде изоморфной примеси. Халькопирит типичных колчеданных месторождений, особенно его высокотемпературные разновидности в «черных курильщиках», не содержит Ag и Au, либо содержит крупные включения теллуридов и самородного золота (например, Яман-Касы) [3]. Наложенный халькопирит колчеданных месторождений, как правило, обеднен Au, за исключением содержащих галенит разновидностей, образовавшихся при замещении колломорфного пирита [3]. Халькопирит

скарновых месторождений, характеризуется низкими содержаниями Se (см. табл. 3), что не свойственно халькопириту пирротиновой ассоциации колчеданных месторождений.

Таблица 2

Элементы-примеси в пирите скарново-магнетитового (Сарбайское), медно-цинково-колчеданного (Сибайское), кобальт-медноколчеданного (Дергамышское) (в г/т)

Месторождение	n	V	Cr	Mn	Co	Ni	As	Se	Mo	Ag
Сарбайское	16	0,2	0,1	7,1	6093	747	20	34	0,8	1,2
Сибайское	9	0,02	0,1	3,2	1280	0,6	21	276	1,3	15
Дергамышское	16	0,15	9,7	1,1	550	577	903	34	0,6	0,01
	2	Sn	Sb	Te	Ba	Au	Tl	Pb	Bi	U
Сарбайское	16	0,03	0,03	3,14	0,37	0,01	0,17	1	0,6	0,02
Сибайское	9	1,06	1,7	76,9	0,7	0,29	0,07	14	1,8	0,01
Дергамышское	16	0,02	250	0,04	0,013	0,04	0,24	0,2	0,01	0,00

n – количество ЛА-ИСП-МС анализов.

Таблица 3

Элементы примеси в халькопирите скарново-магнетитового (Сарбайское), медно-цинково-колчеданного (Сибайское), кобальт-медноколчеданного (Дергамышское) и месторождений (в г/т)

Мест-е	n	V	Cr	Mn	Co	Ni	As	Se	Mo	Ag	Cd
Сарбайское	8	1	0,5	9	6	0,6	1	12	0,25	103	7
Сибайское	7	0,01	0,9	4	29	0,1	10	331	0,05	11	6
Дергамышское	20	0,9	9,4	3	349	315	2	288	0,65	4	14
	2	Sn	Sb	Te	Ba	W	Au	Tl	Pb	Bi	U
Сарбайское	8	0,6	0,1	8	0,7	0,025	0,01	0,19	37,66	7	0,07
Сибайское	7	1,6	1,4	6	4,7	0,01	0,02	0,4	6,5	8,3	0,008
Дергамышское	20	30,1	2,7	15	0,07	0,01	0,24	0,1	23,7	1,2	0,02

n – количество ЛА-ИСП-МС анализов.

Несмотря на значительный прогресс в создании генетических моделей золоторудных месторождений, приуроченных черносланцевым формациям, все еще остаётся много нерешенных вопросов [6]. Основными объектами исследований методом ЛА-ИСП-МС являлись золоторудные месторождения-гиганты, такие как Сухой Лог (Россия), Кумтор (Казахстан), Карлин (США), Бендиго (Австралия), а также Сафьяновское (Урал) [4, 5].

В результате многолетней (2006–2014 г.г.) работы по данным ЛА-ИСП-МС нами выделено три главных этапа мультистадийной минералого-геохимической модели золотонакопления: 1) золото поступает в осадочный бассейн с реками и экстрагируется бактериями или абсорбируется органиче-

ским веществом, глинами и сульфидами железа, 2) богатые органикой металлоносные осадки – отличный источник Au и других элементов (As, Zn, V, Mo, Ag, Ni, Se, Te) по сравнению с магматическими породами; 3) золото концентрируется в поровых флюидах уже на стадиях диагенеза и катагенеза или раннего метаморфизма, а затем переотлагается локально в синтектоническую стадию. Месторождения, испытавшие метаморфизм амфиболитовой и гранулитовой фации показывают черты пострудного преобразования [6].

В целом, валовые содержания Au, As и других элементов-примесей углеродистых отложениях нельзя назвать слишком высокими, хотя их содержания существенно превосходят кларки магматических пород [6]. Содержания Au, определенные нами в органическом веществе вмещающих углеродистых алевропелитов золоторудного месторождения провинции Карлин, составляют 4,6 г/т, что значительно выше, чем в черных сланцах в целом. ЛА-ИСП-МС анализ тонкозернистого и фрамбоидального диагенетического пирита, сформированного на нескольких золоторудных месторождениях черносланцевой ассоциации, показывает максимальные содержания элементов-примесей (г/т): As (20400), Au (152), Mo (2700), V (4500), Zn (3400), Cu (4200), Se (4200), Ni (9600), Pb (4100), Co (3100), Sb (1200), Ba (670), Tl (440), Ag (340), Bi (68), Te (68), U (35) W (27). Большинство этих элементов присутствует в структуре пирита, другие (V, Cr, Ba, U и W) связаны с микровключениями оксидов и силикатов в пирите. Наши данные показывают, что содержания золота в диагенетическом пирите золоторудных месторождений обычно находятся в интервале 0,1–12 г/т. Методом ЛА-ИСП-МС доказано, что существуют корреляции между содержаниями золота и мышьяка в диагенетическом пирите [5]. На месторождении Сухой Лог, например, маломышьяковистый диагенетический пирит (As 580 г/т) содержит немного Au (0,6 г/т). На этом же месторождении высокомышьяковистый пирит (As 3600 г/т) концентрирует 6 г/т Au. У многих исследователей не оставляет сомнений, что к промышленным концентрациям золота (1–50 г/т) приводят последующие процессы преобразования органического вещества и раннедиагенетического пирита [1; 4; 5]. Дальнейшие деформации и сопутствующий метаморфизм сопровождаются перекристаллизацией исходного пирита с образованием крупных кристаллов эвгедрального пирита, содержащих включения самородного золота, халькопирита, сфалерита, галенита и пирротина. Псевдоморфный пирротин характеризуется минимальными содержаниями Au и других элементов-примесей, по сравнению с исходным пиритом [7] и пирротином колчеданных и скарновых месторождений (см. табл. 1). Отложению золота, теллуридов, молибденита, шеелита, арсенопирита, блеклых руд способствует снятие тектонических напряжений, с образованием трещин и кливажа, заполняющихся прожилками альпийского типа.

Полученные данные по типохимизму пирита должны учитываться при обогащении руд. В частности в перспективе необходима селективная переработка фрамбоидального пирита (p-тип), содержащего упорное золото, и эвгедрального пирита (n-тип), концентрирующего «гравитационное» золото. Эта же проблема касается пиритовых хвостохранилищ колчеданных месторождений.

Работы проводились в рамках Программы Президиума УрО РАН (проект № 1511523) и в соответствии с договором о сотрудничестве между Институтом минералогии УрО РАН и Международным центром по изучению рудных месторождений (CODES, Университет Тасмании).

Библиографический список

1. Буряк, В.А. Метаморфические процессы и рудообразование / В.А. Буряк. – М.: Недра, 1982. – 212 с.

2. Масленников, В.В. Метод рудно-фациального анализа в геологии колчеданных месторождений: учебное пособие / В.В Масленников, В.В. Зайков. – Миасс: Имин УрО РАН, 2006. – 224 с.

3. Масленникова, С.П. Сульфидные трубы палеозойских “черных курильщиков” (на примере Урала) / С.П Масленникова, В.В. Масленников. – Екатеринбург-Миасс: УрО РАН, 2007. – 312 с.

4. Large, R.R. Multistage sedimentary and metamorphic origin of pyrite and gold in the giant Sukhoi Log deposit, Lena gold province, Russia / R.R. Large, V.V. Maslennikov, F. Robert, et al // Economic Geology. – 2007. – V. 102. – Pp. 1233–1267.

5. Large, R.R. Gold and trace element zonation in pyrite using a laser imaging technique: implications for the timing of gold in orogenic and Carlin-style sediment-hosted deposits / R.R. Large, L.V. Danyushevsky, H. Hillit, et al // Economic Geology. – 2009. – V. 104. – Pp. 635–668.

6. Large, R.R. A carbonaceous sedimentary source-rock model for Carlin-type and orogenic gold deposits / R.R. Large, S.W. Bull, V.V. Maslennikov et al // Economic Geology. – 2011. – V. 106. – Pp. 331–358.

7. Thomas, H.V. Pyrite and pyrrhotite textures and composition in sediments, laminated quartz veins, and reefs at Bendigo gold mine, Australia: Insights for ore genesis / H.V. Thomas, R.R. Large, S.W. Bull, et al // Economic Geology. – 2011. – V. 106. – Pp. 1–31.

8. Danyushevskiy, L.V. Routine quantitative multi-element analysis of sulphide minerals by laser ablation ICP-MS: Standart development and consideration of matrix effect / L.V. Danyushevskiy, P. Robinson, S. Gilbert, et al // Geochemistry: Exploration, Environment, Analysis. – 2011. – V. 11. – Pp. 51–60.

9. Maslennikov, V.V. Study of Trace element zonation in vent chimneys from the Silurian Yaman-Kasy volcanic-hosted massive sulfide deposits (Southern Urals, Russia) using laser ablation-inductively coupled plasma mass spectrometry (LA-ICP-MS) / V.V. Maslennikov, S.P. Maslennikova, R.R. Large, et al // Economic Geology. – 2009. – V. 104. – Pp. 1111–1141.

К содержанию

УДК 553.43(470.5) + 553.21(470.5)

БАРИТОВАЯ МИНЕРАЛИЗАЦИЯ ИЗ РУД САФЬЯНОВСКОГО КОЛЧЕДАННОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ (СРЕДНИЙ УРАЛ): АНАЛИЗ УСЛОВИЙ ОБРАЗОВАНИЯ

Н.П. Сафина[1,2], Н.Н. Анкушева[1,2]

В работе рассмотрены условия образования барита из колломорфных и обломочных пиритовых руд палеозойского Сафьяновского месторождения (Средний Урал). Гидротермальный барит из первичных колломорфных руд отлагался из подвергшихся фазовой сепарации умеренно-температурных флюидов ($T_{гом}$ 162–184 °С) с соленостью 1,6–4,5 мас. % NaCl-экв. Барит в обломочных рудах образован в результате катагенеза из низкосоленых (1,4–5,4 мас. % NaCl-экв.) среднетемпературных ($T_{гом}$ 130–170 °С) флюидов.

Ключевые слова: Урал, колчеданные руды, барит, морфология, элементы-примеси, флюидные включения, изотопия серы.

Барит является широко распространенным жильным минералом в рудах как древних колчеданных месторождений, так и современных океанических гидротермальных систем. Особенности его морфологии, химического и изотопного составов, а также состава флюидных включений отражают условия образования минерала и сосуществующих с ним сульфидов. В работе представлены результаты изучения барита из серноколчеданных колломорфных и обломочных руд палеозойского Сафьяновского месторождения (Средний Урал).

Сафьяновское месторождение находится в Режевском рудном районе на Среднем Урале и залегает в породах риолит-дацит-андезит-базальтового комплекса девонского возраста, сформировавшегося в задуговом палеобассейне (рис. 1а) [3; 7]. На месторождении выявлено более 10 этажно расположенных рудных линз мощностью до 40 м, разделенных прослоями вулканогенно-осадочных пород мощностью от нескольких сантиметров до 10 и более метров в центральных частях и углеродсодержащих алевропесчаников мощностью до 5 см – на выклинках (рис. 1б).

Главная рудная линза залегает субвертикально и имеет треугольную форму в поперечном разрезе. В целом, месторождение отличается низкой степенью метаморфизма окружающих пород и руд [7], хорошей сохранностью сульфидной постройки [4], что позволяет сопоставлять объект с современными аналогами.

[1] Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Миассе.
[2] Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс.

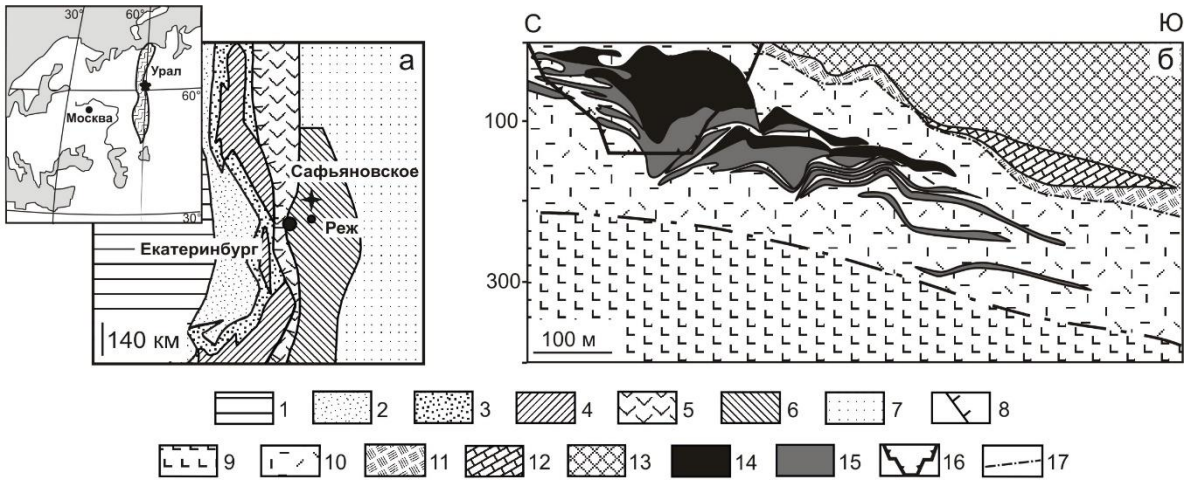


Рис. 1. Положение Сафьяновского медноколчеданного месторождения в основных структурах Урала (а), геологический разрез (б) (по [2; 6] с упрощениями):

1 – осадки Западно-Европейской платформы; 2 – пермская моласса Предуральского краевого прогиба; 3 – осадки Западно-Уральской мегазоны; 4 – метаморфические комплексы Центрально-Уральской мегазоны; 5 – островодужные комплексы Тагило-Магнитогорской зоны; 6 – Восточно-Уральская мегазона; 7 – осадки Восточно-Уральской плиты; 8 – Главный Уральский разлом; 9 – туфы порфировых базальтов и андезибазальтов; 10 – риодациты, их лавокластиты и ксенолавокластиты, чередующиеся с вулканогенно-осадочными породами; 11 – базальты; 12 – известняки; 13 – серпентинизированные ультрамафиты; 14 – массивные сульфидные руды; 15 – прожилково-вкрапленные руды; 16 – контуры карьера; 17 – тектонические границы

Текстурно-структурные и минералогические особенности руд

В колломорфных и тонкозернистых рудах Сафьяновского месторождения, залегающих в кровле сульфидной постройки, отмечается преобладание дисульфидов железа, барита и кварца (рис. 2а).

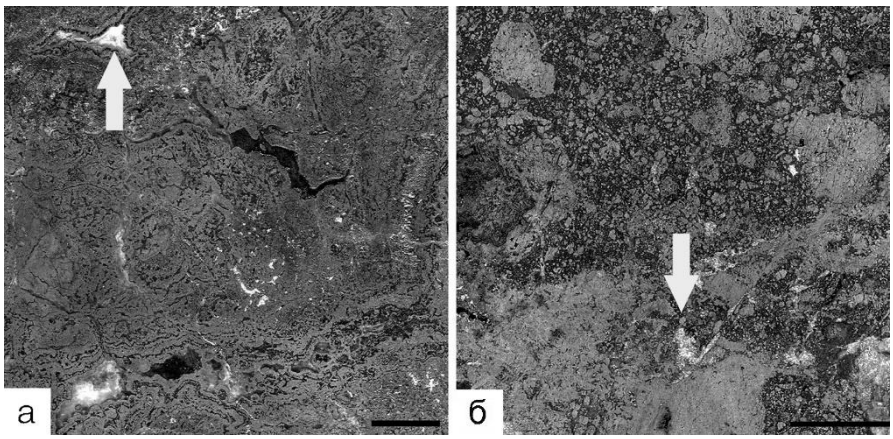


Рис. 2. Колломорфные серноколчеданные руды (а) и сульфидные брекчии (б) Сафьяновского месторождения с гнездами барита (показано стрелками)

Барит представлен таблитчатыми кристаллами размером до 0,5 мм с хорошо проявленной спайностью, и ассоциирует с поздним кварцем, замещающим пирит-марказитовые агрегаты (рис. 3а).

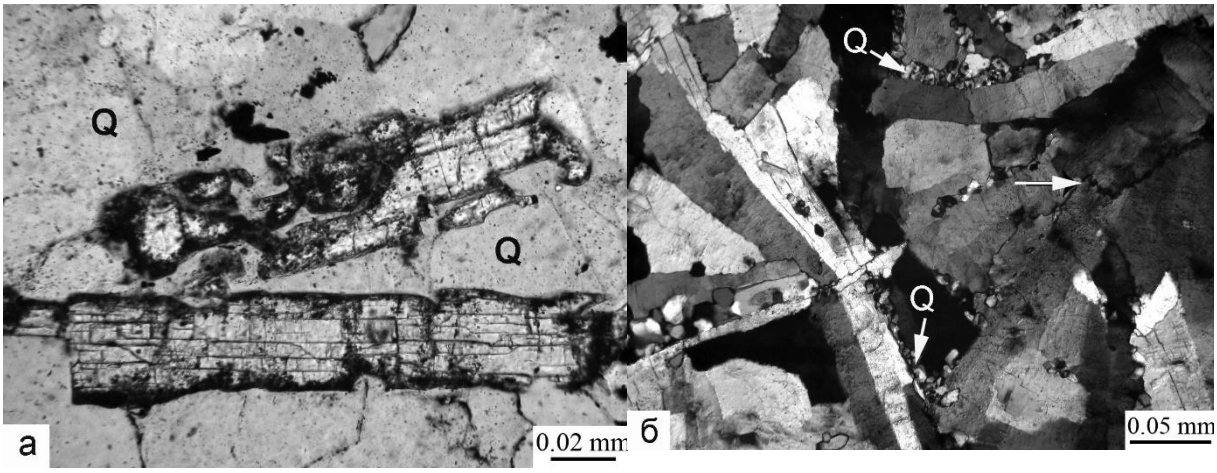


Рис. 3. Агрегаты барита в колломорфных рудах (а)
и сульфидных брекчиях (б) в ассоциации с кварцем (Q). Отраженный свет.
На рис. б стрелкой показаны стилолитовые швы

Пиритовые брекчии Сафьяновского месторождения образованы в результате разрушения ранних колломорфных и тонкозернистых руд, их перемещения на фланги построек и цементации. В составе брекчий преобладают пирит и марказит, в меньшем количестве присутствуют сфалерит, галенит, кварц и барит, редко встречаются халькопирит и теннантит. Барит в этом типе руд является поздним минералом по отношению к обломкам сульфидных руд (рис. 2б). Он характеризуется сростками таблитчатых кристаллов размером до 0,25 мм с признаками наложенных деформаций и наличием стилолитовых швов по границам изогнутых кристаллов (рис. 3б).

Химический и изотопный состав баритов

По данным микрозондового и ИСП-МС анализов, стронций является главной примесью в составе изученных баритов. Барит из колломорфных руд содержит меньше SrO (до 0,83 мас. % по данным микрозондового анализа и 2529 г/т Sr по данным ИСП-МС) (табл. 1, 2).

Таблица 1

Средний химический состав баритов Сафьяновского месторождения, мас.%

Оксиды	Колломорфные руды (n = 7)	Обломочные руды (n = 3)
SrO	0,57 (0,25)	0,35 (0,61)
SO_3	34,27 (0,34)	34,42 (0,11)
Сумма	99,89	99,83

Примечание: анализы выполнены на растровом электронном микроскопе РЭММА-202М (аналитик В.А. Котляров, ИМин УрО РАН); n – количество анализов, в скобках – стандартное отклонение.

В барите обломочных руд содержания SrO выше (до 1,05 мас. % по данным микрозондового анализа и 3095 г/т Sr по данным ИСП-МС), меньше CaO (0,03–0,11 мас.%), который не установлен в барите обломочных руд.

По сравнению с баритом из колломорфных руд барит из обломочных руд обогащен некоторыми микропримесями Cu, Zn, Pb, Ga, Sc, Sb, As, Hg, Bi, Mn, Zr, U и Sr (табл. 2). Повышенные содержания Ni характерны для барита колломорфных руд (15,1 и 7 г/т). Содержания Ge, Se, Cd, Te, Co, ниже или сходны в двух разновидностях баритов.

Таблица 2

Элементы примеси в баритах Сафьяновского месторождения (по данным ИСП-МС), г/т

Элементы	Колломорфные руды	Обломочные руды
Cu	142	201
Zn	171	293
Pb	15	136
Ga	н.о.	0,3
Ge	0,1	0,1
As	н.о.	2
Se	0,2	0,3
Cd	н.о.	1
Sc	0,6	4
Sb	1	6
Te	0,02	0,1
Hg	н.о.	3
Bi	0,03	0,4
Co	0,1	0,1
Ni	15	7
Mn	1	8
Zr	н.о.	1
U	0,1	0,3
Sr	2529	3095

Примечание: н.о. – элемент не обнаружен.

Средний изотопный состав серы в баритах Сафьяновского месторождения составляет (‰): +22,9 (σ 1,5) и +21,2 (σ 0,2) для колломорфных руд, и +28,1 (σ 0,9) для обломочных руд.

Термобарогеохимические исследования

В баритах были изучены первичные флюидные включения (ФВ). ФВ 10–40 мкм в барите из колломорфных и брекчиевых руд Сафьяновского месторождения характеризуются формой «негативного кристалла», иногда со сглаженными углами. По фазовому составу ФВ выделяются однофазные газовые и жидкостные, двухфазные (жидкость + газ) с объемом газового пузырька 20–30 %.

Температуры гомогенизации двухфазных ФВ в барите колломорфных руд Сафьяновского месторождения составляют 162–184 °С. Температуры гомогенизации двухфазных ФВ в барите обломочных руд варьируют от 130 до 170 °С. На основании температур плавления последнего кристаллика льда, концентрации солей в растворах изученных баритов составляют (мас. % NaCl-экв.): 1,6–4,5 (колломорфные руды), 1,4–5,4 (обломочные руды). Температуры эвтектики ФВ в барите колломорфных руд варьируют от –21,7 до –22,3 °С. Согласно [1], такие температуры эвтектики соответствуют солевым системам $NaCl–Na_2CO_3–H_2O$. Температуры эвтектики в барите обломочных руд изменяются от –22,0 до –22,3 °С, что соответствует солевой системе с преобладанием NaCl.

Обсуждение результатов и выводы

В результате изучения гидротермального барита из колломорфных руд палеозойского Сафьяновского месторождения установлено, что барит отлагался из низко- до умеренно-температурных флюидов, подвергшихся фазовой сепарации, о чем свидетельствует их соленость (как выше, так и ниже морской воды) [10].

В обломочных рудах Сафьяновского месторождения кристаллизация барита связывается с катагенетическими процессами. Главным отличием между катагенетическим и гидротермальным баритом является морфология. Для гидротермальных разновидностей характерны отдельные недеформированные кристаллы и их радиально-лучистые агрегаты. Катагенетический барит представлен таблитчатыми разностями с признаками деформаций и стилолитовыми швами, что свидетельствует о стесненных условиях роста и увеличении давления в условиях катагенеза [8].

Химический состав изученных баритов не информативен при определении условий образования минерала, так как содержания элементов, в частности Sr, характеризуются значительными вариациями. Причинами вариаций Sr может быть как различное содержание Sr во флюиде, так и разная степень смешения флюида с морской водой. Для катагенетического барита в обломочных рудах Сафьяновского месторождения повышенные содержания Sr также могут быть связаны с присутствием обломков вмещающих пород. В пользу последнего свидетельствуют повышенные содержания Zr (до 1 г/т), U (до 0,3 г/т) и Sc (до 4 г/т).

Накопление в составе барита элементов-примесей может быть связано с микровключениями других минералов (сфалерит, халькопирит, галенит, блеклые руды) и отражать химический состав ассоциирующих с ним сульфидов. Так, по данным [5] в обломках колломорфного пирита содержатся повышенные концентрации – As, Mn, Sb; в сфалерите – Hg.

Изучение изотопного состава баритов отражает различные источники сульфат-иона. Изотопный состав серы гидротермального барита из ранних колломорфных руд соответствует сульфату серы девонской (+23 до +24 ‰,

[9]) морской воды. Для барита из брекчий Сафьяновского месторождения характерны повышенные значения сульфат иона. Это, скорее всего, является результатом термохимической сульфат-редукции при катагенетическом преобразовании осадка, которая может происходить при температурах до 180 °С в отличие от бактериальной сульфат-редукции [12]. Этому также не противоречат температуры гомогенизации изученного барита, которые сопоставимы с температурами катагенеза (до 200 °С) [8].

В целом, условия образования барита в каждом изученном случае различные, но совпадающие с условиями образования сосуществующих сульфидов. В колломорфных гидротермальных рудах обилие пирита и марказита указывает на низко- и среднетемпературные условия минералообразования с преобладанием в растворе Fe над халькофильными металлами и высокой активностью серы [11]. Осаждение барита в цементе брекчий происходило после формирования диагенетического пирита (фрамбоидов и метакристаллов), и его агрегаты были подвержены деформациям в результате захоронения и уплотнения осадков на стадии катагенеза. Различные генетические типы барита различаются по концентрациям элементов-примесей. В составе пиритовых брекчий за счет барита увеличиваются концентрации Cu, Zn, Pb – технофильных элементов, а также Sb, As, Hg – токсичных элементов, оказывающих при переработке руд существенное влияние на окружающую среду.

Авторы благодарят И.Ю. Мелекесцеву (ИМин УрО РАН, г. Миасс), П. Нимиса (Университет г. Падуя, Италия) за обсуждение результатов исследований; С.А. Садыкова, В.А. Котлярова (ИМин УрО РАН) и Д.А. Киселеву (ИГиГ УрО РАН) за выполнение анализов.

Исследования поддержаны РНФ (проект № 14-1700691).

Библиографический список

1. Борисенко, А.С. Изучение солевого состава растворов газово-жидких включений в минералах методом криометрии / А.С. Борисенко // Геология и геофизика. – 1977. – № 8. – С. 16–18.

2. Коровко, А.В. Отчет по поисковым работам по оценке промышленной значимости Каменско-Сафьяновской меднорудной зоны Восточно-Уральского прогиба / А.В. Коровко. – ОАО СУГРЭ, Верхняя Пышма, 2004.

3. Коротеев, В.А. Геологическое положение и состав сульфидных руд Сафьяновского месторождения (Средний Урал) / В.А. Коротеев, Р.Г. Язева, В.В. Бочкарев, В.П. Молошаг, А.В. Коровко, Ю.С. Шереметьев. – Екатеринбург: ИГГ УрО РАН, 1997. – 49 с.

4. Масленников, В.В. Литогенез и колчеданообразование / В.В. Масленников. – Миасс: ИМин УрО РАН, 2006. – 384 с.

5. Масленников, В.В. Токсичные элементы в колчеданообразующих системах / В.В. Масленников, Н.Р. Аюпова, С.П. Масленникова и др. – Екатеринбург: РИО УрО РАН, 2014. – 340 с.

6. Пучков, В.Н. Палеогеодинамика Южного и Среднего Урала / В.Н. Пучков. – Уфа: Даурия, 2000. – 145 с.

7. Язева, Р.Г. Геология и рудные парагенезисы Сафьяновского колчеданного месторождения в среднеуральском ретрошарьяже / Р.Г. Язева, В.П. Молошаг, В.В. Бочкарев // Геология рудных месторождений. – 1991. – Т. 33. – № 4. – С. 76–58.

8. Япаскурт, О.В. Аспекты теории постседиментационного литогенеза / О.В. Япаскурт // Литосфера. – 2005. – № 3. – С. 3–30.

9. Claypool, G.E., Holser, W.T., Kaplan, I.R. et al. The age curves of sulphur and oxygen isotopes in marine sulphates and their mutual interpretation // Chemical Geology. – 1980. – V. 28. – Pp. 199–260.

10. de Ronde, C.E.J., Faure, K., Bray, C.J. et al. Hydrothermal fluids associated with seafloor mineralization at two southern Kermadec arc volcanoes, offshore New Zealand // Mineralium Deposita. – 2003. – V. 38. – Pp. 217–233.

11. Hannington, M.D., Scott, S.D. Sulfidation equilibria as guides to gold mineralization in volcanogenic massive sulfides: Evidence for sulfide mineralogy and the composition of sphalerite // Economic Geology. – 1989. – V. 84. – Pp. 1978–1995.

12. Machel, H.G. Bacterial and thermochemical sulfate reduction in diagenetic settings – old and new insights // Sedimentary Geology. – 2001. – V. 140. – Pp. 143–175.

К содержанию

ФИЛИАЛ В г. УСТЬ-КАТАВ

УДК 519.72 + 378.016:51

ВОСПРИЯТИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ

Н.Г. Козлова

Рассмотрены некоторые психологические аспекты восприятия информации на занятиях по математике.

Ключевые слова: предметность и целостность восприятия, адекватность образа, интерактивное обучение.

В преподавании математики имеются как логические, так и психологические аспекты восприятия информации. Разумеется, невозможно создать идеальные условия обучения, но можно сделать их наиболее благоприятными для обучающегося и для преподавателя.

Восприятие – система перцептивных, то есть чувственных действий человека по отношению к окружающей среде. Овладеть ими без обучения и практики невозможно. Перцептивное действие обеспечивает сознательное выделение некоторых сторон ситуации, воспринимаемой чувствами. Полученная сенсорная информация преобразуется. В результате строится образ, адекватный предметному миру. Критерии адекватности образа обусловлены прошлым опытом человека и текущими условиями существования. Генетическая связь перцептивных действий с практическими проявляется в их внешнедвигательном характере: в движении глаз, прослеживающих видимый контур, в движениях рук, в непрерывном сравнении оригинала с восприятием, в проверке и коррекции образа. С развитием перцептивных действий происходит сокращение моторных компонент опознания, строится ряд сенсорных эталонов, что превращает процесс построения образа в более простой процесс опознания. Поэтому актуально представление определения, теоремы, решения задачи в виде схемы, диаграммы, графика или таблицы. Формирование отражения, его проверка и коррекция происходит в процессе активного взаимодействия человека с отраженной реальностью.

Восприятие – предметно. С помощью органов чувств человек получает сведения о внешнем мире, соотносит эти сведения с самими предметами. Отрыв от предметного отражения ситуации нарушает нормальную работу восприятия. Поэтому одна из главных задач математического образования – обучение соотнесению предмета исследования с математической моделью. Например, используя макеты многогранников, детали различной формы и измерительные инструменты, такие как транспортир, циркуль, линейка, штангенциркуль, можно на занятии измерить углы, диаметры круглых отверстий, линейные размеры предмета; по результатам измерений вычислить

длины дуг, окружностей, тригонометрические функции углов, площади поверхностей, объемы тел; представить результаты измерений и расчетов в различных единицах измерения. Отчеты о практической работе, оформленные в виде презентаций или видеороликов, можно обсудить на занятии и использовать их в дальнейшем. Любая тема в математике дает возможности представить ее предметно. При изучении рядов – это видеоролики об электрических машинах с описанием их работы рядами Фурье и изложением роли пятой составляющей рядов. Векторная алгебра дает возможность рассмотреть определенное количество задач теоретической механики. Здесь есть, где развернуться: провести эксперимент реальный и виртуальный, составить уравнение сил в векторной форме и в проекциях; найти скорости, ускорения, законы движения аналитическими и (или) численными методами, например, воспользовавшись средствами системы Mathcad или написав программу на Pascal или Visual Basic.

Человек воспринимает внешний мир как нечто целостное: зрительное восприятие дополняется звуками, прикосновениями. Условия восприятия многообразны. С другой стороны, окружающий мир имеет стабильные, постоянные свойства и отношения. Всю свою жизнь человек развивает способность выделять относительно неизменную структуру свойств предметов в изменчивом потоке сведений. Здесь мы говорим о главном и второстепенном, об утверждении и следствии. При построении математической модели важно выделить главное и отбросить второстепенное. Например, при записи уравнения движения лодки по озеру в одних случаях надо учитывать сопротивление воздуха, а в других – нет; при построении математической модели движения электрона, последний рассматривают иногда как частицу, иногда как поле.

Рассмотрим психологические аспекты восприятия информации на занятиях по математике.

Аудитория должна быть такой, чтобы в ней было комфортно: свежий воздух, чистые окна и пол, удобный стол, возможность беспрепятственно выйти из аудитории, доступность методической литературы в виде плакатов, печатных изданий, в Интернете.

Известно, что первое утверждение влияет сильнее, чем все последующие. Читая лекцию, проводя практическое занятие, преподаватель зачастую выступает перед студентами как первооткрыватель. Уверенный голос преподавателя, четкие формулировки тем, определений, теорем заставляет слушателей быть сосредоточенными. Концентрация внимания незамедлительно сказывается на восприятии информации. Если выдавать студентам посильные задания, ставить проблемный вопрос и подводить аудиторию к ответу, применять систему подготовительных упражнений, задавать уточняющие вопросы в процессе решения, то определение, формулировка и доказательство теоремы легче запоминаются, быстрее доходит их смысл.

В результате начинает строиться цепочка: мне понятно, о чем здесь говорят, поэтому я, возможно, не зря пришел учиться именно сюда. Ссылки на авторитеты, исторические личности, примеры успешных людей, окончивших данное учебное заведение и работающих по специальности – усиливают мотивацию получения образования.

Обучение математике предполагает многократное повторение одних и тех же фактов. Информационная волна создается с помощью множества источников информации, достигается большим количеством комментариев одного и того же утверждения, повторением его в разных контекстах. Привыкание к новому понятию происходит постепенно от полного неприятия до полного осознания. Для прорыва психологической защиты можно воспользоваться специально подобранными видеорядами, в которых особое место отведено необычным свойствам объекта исследования, сравнению аналитических и численных методов решения с применением и без применения компьютерных технологий.

Важное значение при обучении имеет эмоциональный резонанс. Интерактивное обучение позволяет каждому студенту включиться в активный процесс познания. Работа в малых группах и творческие задания, обучающие игры и социальные проекты, дискуссии и тренинги – все это пробуждает интерес к учебе, позволяет сформировать жизненные позиции, запомнить и понять учебный материал, порадоваться своим успехам и успехам своих сокурсников. Даже самый слабый студент сможет гордиться: профессионально сделанным видеороликом или презентацией, умением общаться и сглаживать конфликты, хорошей памятью и т.д.

Библиографический список

1. Леонтьев, Д.А. Психология смысла / Д.А. Леонтьев. – М.: Смысл, 2003.
2. Величковский, Б.М. Психология восприятия / Б.М. Величковский, В.П. Зинченко, А.Р. Лурия. – М.: Издательство Московского университета, 1973.

К содержанию

УДК 510 + 577

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ВЯЗКОСТИ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В.И. Сафонов, О.А. Миняева

Выполнен статистический анализ экспериментальных зависимостей вязкости биологических систем от концентрации и температуры. Установлены границы применимости и определены численные значения коэффициентов уравнения Эйнштейна для описания указанных зависимостей.

Ключевые слова: вязкость биологических систем, аппроксимирующие функции.

Современные медицина и фармация используют в своем арсенале множество лекарственных препаратов, произведенных из биологических объектов. Это препараты крови и плазмы крови, препараты, содержащие определенный набор аминокислот, биологически активные добавки, включающие лецитин, витамины, ферменты, энзимы и т.д. Из литературных данных [1] известно, что структура биологических жидкостей характеризуется наличием дальнего порядка, т.е. помимо согласованного взаимного расположения и ориентации близко расположенных групп и сегментов молекул (ближний порядок) проявляется согласованное действие молекул определенного функционального назначения. При этом молекулы биологических жидкостей не только перемещаются на определенные расстояния, но и принимают необходимую пространственную ориентацию [1–3]. Это отражается на коллигативных и вязкостных свойствах биологических жидкостей. В связи с этим, **целью данного исследования** являлось определение границ применимости уравнения Эйнштейна для зависимостей вязкости растворов биологических жидкостей.

Материалы и методы исследования

В качестве модельных систем для математического анализа изучали концентрационные зависимости вязкости растворов альбумина для инфузий, растворов иммуноглобулина нормального и интерферона альфа лейкоцитарного человеческого, а также концентрационные и температурные зависимости вязкости водных растворов соевого лецитина. Вязкость растворов определяли при помощи капиллярных вискозиметров серии ВПЖ-1 (диаметр капилляра 0,54 мм) и ВПЖ-2 (диаметр капилляра 0,73 мм). Термостатирование при различных температурах осуществляли при помощи термостата ТС-1/80 СПУ и холодильной камеры.

Результаты и их обсуждение

Для коллоидных растворов и растворов высокомолекулярных веществ, не взаимодействующих с молекулами растворителя [3] линейная зависимость

вязкости раствора от концентрации растворенного вещества описывается уравнением Эйнштейна: Эйнштейна: $\frac{\eta}{\eta_o} = \eta_{отн} = 1 + \alpha \cdot C$, где η – вязкость раствора, мПа·с; η_o – вязкость растворителя, мПа·с; С – объемная доля растворенного вещества; α – коэффициент пропорциональности, учитывающий форму частиц в растворе ($\alpha = 2{,}5$ для сферических частиц; $\alpha > 2{,}5$ для эллиптических удлиненных частиц). Белки являются высокомолекулярными веществами, содержащими в структуре молекулы полярные гидрофильные группы, поэтому отдельные молекулы белка, и белковые глобулы активно взаимодействуют с растворителем. Это должно отражаться на функциональных зависимостях вязкости от концентрации и температуры. Для водных растворов альбумина и интерферона альфа лейкоцитарного человеческого найдено пропорциональное увеличение относительной вязкости с ростом содержания белка (рис. 1), что позволяет описывать данные закономерности уравнением, аналогичным уравнению Эйнштейна $\eta_{отн} = \kappa + \alpha \cdot C$ [4]. Рассчитанные с использованием метода наименьших квадратов значения коэффициентов κ и α для альбумина и интерферона альфа лейкоцитарного человеческого представлены в табл. 1.

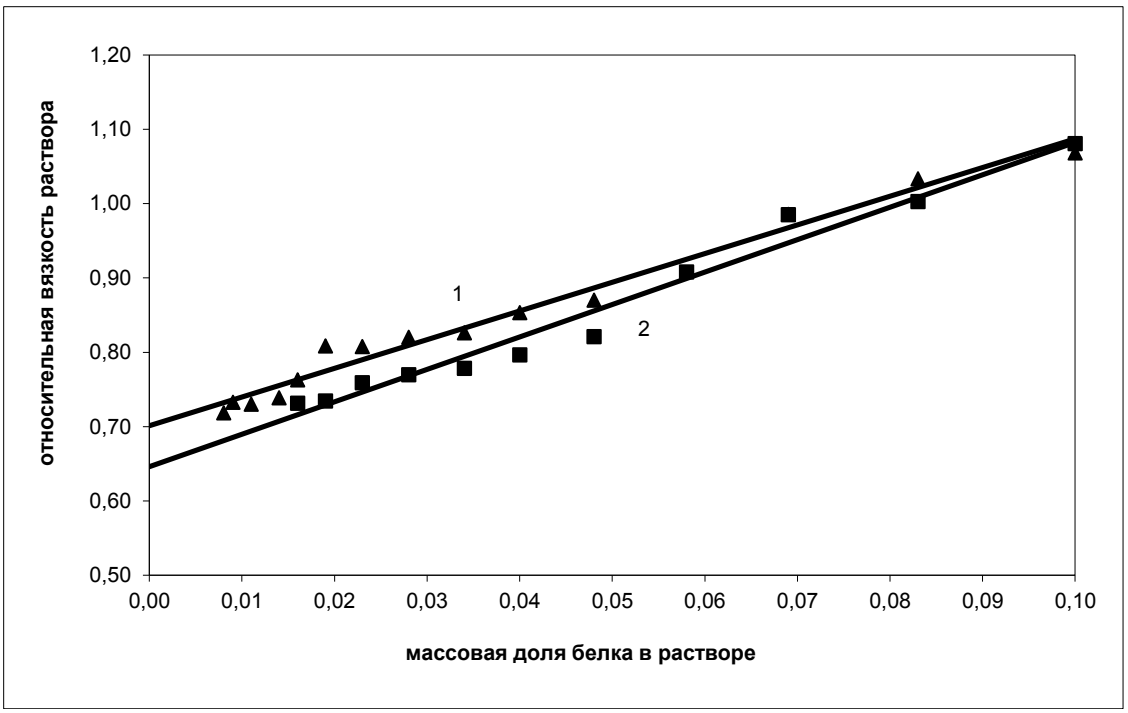


Рис. 1. Относительная вязкость растворов интерферона альфа лейкоцитарного человеческого (1) и альбумина (2) с различной массовой долей белков

Таблица 1

Значения коэффициентов в уравнении $\eta_{отн} = \kappa + \alpha \cdot C$ для концентрационных зависимостей относительной вязкости водных растворов белков

Белок	Альбумин	Интерферон
Коэффициент κ	0,645	0,701
Коэффициент α	4,366	3,856
Коэффициент корреляции	$R = 0{,}99$	$R = 0{,}991$

Как следует из приведенных экспериментальных результатов, значения коэффициентов α для белков стремятся к четырем, т.е. превышают величину 2,5, которая является пограничной и, исходя из теоретических положений [3], отражает форму частиц вещества в растворе. В водных растворах с концентрацией белков до 10 % однозначно доказано существование только глобулярной сферической конформации макромолекул альбумина и интерферона альфа лейкоцитарного человеческого [5, 6], а исследования вязкостных свойств растворов этих белков дают вытянутую эллипсообразную форму частиц.

Непротиворечиво объяснить кажущееся противоречие можно путем допущения, что коэффициенты κ и α имеют иной физический смысл, чем коэффициенты классического уравнения Эйнштейна. Значения коэффициентов κ меньше единицы свидетельствуют о том, что вязкость растворов белков ниже, чем вязкость чистой воды, при незначительных концентрациях белка. Значение коэффициента α определяется как формой частиц вещества в растворе, так и уровнем сольватации белковых макромолекул в глобуле. Оба коэффициента κ и α отражают влияние молекулярной массы белка и уровня взаимодействия белковых макромолекул между собой и с растворителем на вязкость биологической системы в целом.

В случае анизодиаметричности белковых глобул линейная корреляция между концентрацией и вязкостью нарушается [7]. Данный эффект обнаружен при детальном изучении коллигативных свойств водных растворов иммуноглобулина нормального. В диапазоне концентраций иммуноглобулина нормального 5–6 % происходит изменение формы белковых глобул: из сферической глобулярной конформации глобулы переходят в эллиптическую глобулярную конформацию, что соответствующим образом отражается на коллигативных свойствах растворов [7].

По литературным данным [3] вязкость растворов высокомолекулярных веществ возрастает с увеличением асимметрии их частиц и с увеличением молекулярной массы. Поэтому для водных растворов иммуноглобулина нормального (3,5–4 %) значения кинематической, динамической и относительной вязкости выше, чем для растворов альбумина и интерферона соответствующих концентраций. При концентрации от 6 % и выше вязкость растворов иммуноглобулина нормального возрастает быстрее, чем это определено

по линейному закону. И в целом зависимость вязкости от концентрации иммуноглобулина нормального удовлетворительно аппроксимируется полиномом второй степени [7].

Лецитины (холинфосфоглицериды) в живом организме являются основополагающим веществом для формирования межклеточного пространства, нормального функционирования нервной системы, нормальной рабочей деятельности мозговых клеток, служит одним из основных материалов печени. Смесь лецитинов и кефалинов содержится во всех без исключения животных и растительных тканях и почти во всех жидкостях животного организма. Так из лецитина состоит 50 % печени, 1/3 мозговых изолирующих и защитных тканей, окружающих головной и спинной мозг. Лецитины обеспечивает избирательную проницаемость и транспортную функцию клеточных мембран (участвуют в транспорте питательных веществ, витаминов и лекарств к клеткам), являются мощным, естественным для живого организма, антиоксидантом, и предупреждают образование высокотоксичных свободных радикалов. Транспортная функция лецитинов основана на поверхностно-активных и эмульгирующих свойствах молекул. Агрегация лецитинов в нормально функционирующем живом организме сопровождается формированием ламеллярных бислоев, внутри которых аккумулируются водорастворимые и жирорастворимые биологически активные вещества и вода (рис. 2). Указанные свойства лецитинов позволяют использовать их как компонент ультраэмульсий [8].

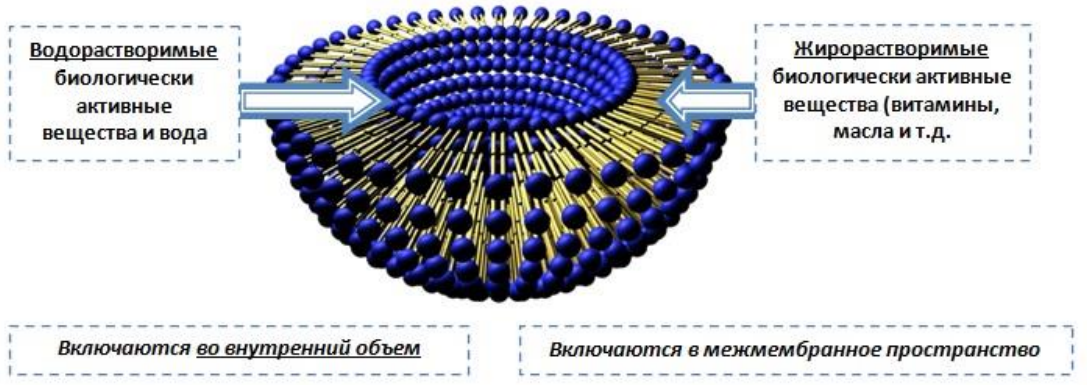


Рис. 2. Структура ламеллярных бислоев, образованных молекулами лецитинов и включение в них различных биологически активных веществ

Образование ламелей лецитинов в растворе должно определенным образом отражаться на вязкости биологической системы. Если лецитин является компонентом жидкой лекарственной формы, то вязкость данной лекарственной формы при хранении и при попадании в организм человека будет изменяться под воздействием различных температур. При этом возможна

перестройка ламеллярных образований. Поэтому были детально изучены концентрационные зависимости вязкости растворов лецитина соевого при разных температурах.

Как следует из данных, приведенных в табл. 2, зависимость относительной вязкости раствора от массовой доли лецитина подчиняется линейному закону вплоть до концентрации лецитина 2–2,5% и в этом же диапазоне концентраций практически не зависит от температуры в интервале от 8°С до 30°С. Близость коэффициента κ к единице свидетельствует о применимости классического уравнения Эйнштейна к описанию вязкости водных растворов лецитина в указанном интервале концентраций. Ламеллярные структурные образования, характерные для агрегированного лецитина, характеризуются выраженной анизодиаметричностью, что находит отражение в экспериментально найденных значениях коэффициента α. Эти значения намного превышают величину 2,5 и аналогичные коэффициенты, найденные для растворов белков.

Таблица 2

Коэффициенты в уравнении $\eta_{отн} = \kappa + \alpha \cdot C$
и коэффициенты корреляции для зависимостей относительной вязкости водных растворов лецитина (С ≤ 2,5 %) при различных температурах

Температура	Коэффициент κ	Коэффициент α	Коэффициент корреляции
30 °С	1,078	33,346	$R = 0{,}998$
25 °С	1,033	38,327	$R = 0{,}997$
16 °С	0,998	40,066	$R = 0{,}994$
8 °С	1,069	35,391	$R = 0{,}997$

При концентрациях лецитина выше 2,5 % отклонения от линейной концентрационной зависимости становятся существенными, фиксируются температурные изменения вязкости, а экспериментальные данные удовлетворительно аппроксимируются полиномом второй степени (табл. 3) [9].

Таблица 3

Значения полиномиальных коэффициентов
для математического описания зависимостей относительной вязкости водных растворов лецитина (С ≥ 2,5 %) при различных температурах

Температура	Коэффициенты полинома второй степени $\eta_{отн} = a + b \cdot C + c \cdot C^2$		
	a	***b***	***c***
30 °С	1,129	23,305	362,827
25 °С	1,158	13,864	875,665
16 °С	1,099	19,204	794,961
8 °С	1,222	6,025	1042

Выводы

1. Определены границы применимости уравнения Эйнштейна для описания зависимостей вязкости биологических систем от концентрации и температуры. Статистически установлена линейная зависимость между относительной вязкостью раствора и массовой долей растворенного вещества для альбумина и интерферона альфа лейкоцитарного человеческого (при концентрации белка до 10 %) и лецитина соевого (при концентрации менее 2,5 %).

2. Полиномиальная зависимость относительной вязкости от концентрации вещества в биологической системе найдена для водных растворов иммуноглобулина нормального (при концентрации белка до 10 %) и лецитина соевого (при концентрации 2,5–5 %).

3. Установлено, что в биологических системах, включающих молекулы белков и лецитина, в значения коэффициентов в уравнении Эйнштейна заложена не только форма частиц вещества в растворе, но и способность молекул к агрегации, ассоциации и сольватации.

Библиографический список

1. Принципы структурной организации белков / Г. Шульц, Р. Ширмер; под ред. Е.М. Попова. – М.: Мир, 1999. – 355 с.

2. Иммуноглобулины / Р. Поляк, Р. Кату; под ред. Г. Литмена, Р. Гуда. – М.: «Мир», 2001. – 495 с.

3. Физическая и коллоидная химия: учеб. для фармац. вузов и факультетов / под ред. проф. А.П. Беляева. – М.: ГЭОТАР-Медиа, 2008. – 700 с.

4. Миняева, О.А. Концентрационные зависимости вязкости белковых систем и рефрактометрический анализ растворов белков / О.А. Миняева, Д.И. Ботова, Е.С. Нелюбина // Современные проблемы науки и образования. – 2014. – № 6. – С. 1797.

5. Миняева, О.А. Определение молекулярных параметров и коллигативных свойств водных растворов альбумина / О.А. Миняева, Е.А. Евсельева, Е.В. Симонян // Современные проблемы науки и образования. – 2013. – № 6. – С. 1023.

6. Миняева, О.А. Коллигативные свойства растворов интерферона альфа лейкоцитарного человеческого / О.А. Миняева, Д.И. Ботова, Е.С. Нелюбина // Современные проблемы науки и образования. – 2014. – № 5. – С. 800.

7. Миняева, О.А. Совершенствование способов контроля качества белка в препаратах иммуноглобулина / О.А. Миняева, Е.В. Симонян, Е.А. Евсельева, Е.С. Позднякова, А.Р. Музафарова, О.Т. Саедгалина // Современные проблемы науки и образования. – 2014. – № 1. – С. 364.

8. Медведев, С.А. Эффективность применения лецитиновой ультраэмульсии противотуберкулезных препаратов в лечении впервые выявленных больных туберкулезом легких / С.А. Медведев, С.Л. Нарышкина // Сибирское медицинское обозрение. – 2009. – № 6. – С. 41–45.

9. Корн, Г. Справочник по математике / Г. Корн, Т. Корн. – М.: Наука, 1978. – 831 с.

К содержанию

УДК 53

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ «МЕХАНИКИ» НЕТРАДИЦИОННЫМ МЕТОДОМ

Т.С. Чернова

Рассмотрено понятие «сложное движение». Показано решение физической задачи в среде Mathcad. Представлено графическое движение точки в пространстве с использованием линейного преобразования координат и их векторной формы представления.

Ключевые слова: физика, сложное движение, Mathcad, анимация, качественные и вычислительные задачи.

Физика является базовым общеобразовательным предметом при подготовке студентов по специальностям. Не смотря на то, что решению физических задач на занятиях уделяется, немало времени, все же многие испытывают затруднения. Это объясняется тем, что данный вид занятий сложен сам по себе, а также недостатками в подборе и методике решения задач.

Решение физических задач – одно из важнейших средств развития мыслительных и творческих способностей студентов. В зависимости от характера и методов исследований различают:

1. Качественные задачи – это задачи, в которых устанавливают зависимость между физическими величинами. Вычисления в таких задачах можно не производить.

2. Вычислительные задачи – это задачи, в которых результат решения получен с помощью математических вычислений. Такие задачи, как правило, можно решать различными путями.

Рассмотрим один из нетрадиционных методов решения задачи с помощью среды Mathcad: сложное движение точки: *«Дверь с точкой, движущаяся по кругу или по прямой».*

Пусть тело движется относительно подвижных осей OXYZ, которые совершают одновременно переносное относительно неподвижных осей. Таким образом, движение тела называют сложным.

Задача состоит в том, чтобы найти зависимость между характеристиками относительного, переносного и абсолютного движений. Основными характеристиками тела являются его поступательные угловые скорости и ускорения.

Пусть тело участвует одновременно в двух направлениях, направленное в одну сторону вращения относительно параллельных осей. Результирующее движение является мгновенным вращением с абсолютной угловой скоростью $\omega = \omega_1 + \omega_2$ относительно мгновенной оси, параллельной данным. С течением времени мгновенная ось меняет свое положение, описывая цилиндрическую поверхность.

Пусть вращения направлены в разные стороны, то мгновенная скорость движения точки определяется уравнением $\omega = \omega_1 - \omega_2$. Возможна пара

вращений. Это случай когда происходит вращение вокруг параллельных осей, но сами вращения направлены в разные стороны.

Таким образом, движение будет поступательным (или мгновенно поступательным) движением со скоростью, направленной перпендикулярно плоскости, проходящие через векторы угловых ускорений. Направление вектора линейной скорости определяется так же, как в статике определялось направление момента пары сил.

Следовательно, пара сил при вращении эквивалентна поступательному движению с линейной скоростью (v), равной моменту пары сил угловых скоростей (ω) вращений. Примером такого движения является поступательное движение велосипедной педали относительно рамы велосипеда.

Задача: «Дверь с точкой, движущаяся по кругу или по прямой»

1. Определим координаты точки в подвижной и неподвижной системе отсчета в векторной форме (рис. 1).

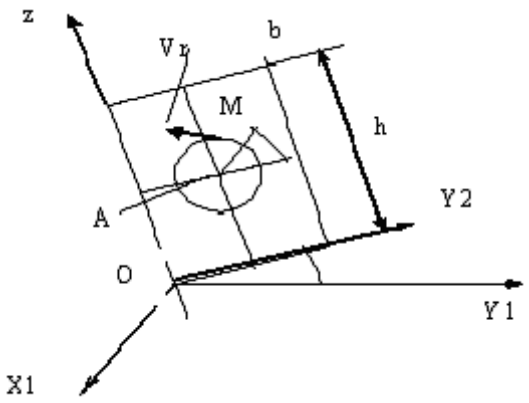
2. Графическое представление траектории движения точки (рис. 3).

3. Выразим угловые скорости относительного и переносного движений точки в векторной форме.

4. Выразим линейные скорости относительного и переносного движений точки в векторной форме (рис. 2).

5. Представим уравнения ускорений точек тела в векторной форме.

6. Графическое представление скоростей и ускорений точки для своего варианта.



$b := 2 \quad h := 2 \quad r0 := 1$

$S(t) := \frac{\pi}{8} \cdot r0 \cdot t^2 \qquad \omega z(t) := \frac{\pi}{2}$

Зададим пределы, шаг изменения переменной времени

$t0 := 4 \quad t := 0.001, \frac{t0}{72} .. t0$

Угол поворота рамки $\alpha(t) := \omega z(t) \cdot t$

Угол относительного поворота точки

$rm(t) := ra + \rho(t) \qquad \phi(t) := \frac{S(t)}{r0}$

Решение:

1. Выразим радиус-вектор т. M, движущейся по кругу в неподвижной системы отсчета

$$ra := \begin{pmatrix} 0 \\ .5 \cdot b \\ .5 \cdot h \end{pmatrix} \qquad \rho(t) := r0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \cos(\phi(t)) \\ \sin(\phi(t)) \end{pmatrix}$$

Рис. 1. Условие задачи

2. Выразим вектор относиетльной угловой скорости и линейной скорости точки.

$$\omega rx(t) = \frac{d}{dt}\phi(t) \qquad \omega rx(t) := \frac{\pi}{4}\cdot t \qquad \omega r(t) := \begin{pmatrix} \omega rx(t) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad Vr(t) := \omega r(t) \times \rho(t)$$

$$Mat = \begin{pmatrix} \cos(x,x1) & \cos(x,y1) & \cos(x,z1) \\ \cos(y,x1) & \cos(y,y1) & \cos(y,z1) \\ \cos(z,x1) & \cos(z,y1) & \cos(z,z1) \end{pmatrix} \qquad m1(t) := \begin{pmatrix} \cos(\alpha(t)) & \sin(\alpha(t)) & 0 \\ -\sin(\alpha(t)) & \cos(\alpha(t)) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

или матрицу обратного преобразования координат

$$mo1(t) = \begin{pmatrix} \cos(x1,x) & \cos(x1,y) & \cos(x1,z) \\ \cos(y1,x) & \cos(y1,y) & \cos(y1,z) \\ \cos(z1,x) & \cos(z1,y) & \cos(z1,z) \end{pmatrix} \qquad mo1(t) := \begin{pmatrix} \cos(\alpha(t)) & -\sin(\alpha(t)) & 0 \\ \sin(\alpha(t)) & \cos(\alpha(t)) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

3. Радиус-вектор т. М в неподвижной системы отсчета. $rm1(t) := \left(rm(t)^{T}\cdot m1(t)\right)^{T}$

или $rm1(t) := mo1(t)\cdot rm(t) \qquad ra1(t) := mo1(t)\cdot ra$

Рис. 2. Решение задачи

Представим траекторию движения точки (рис. 3):

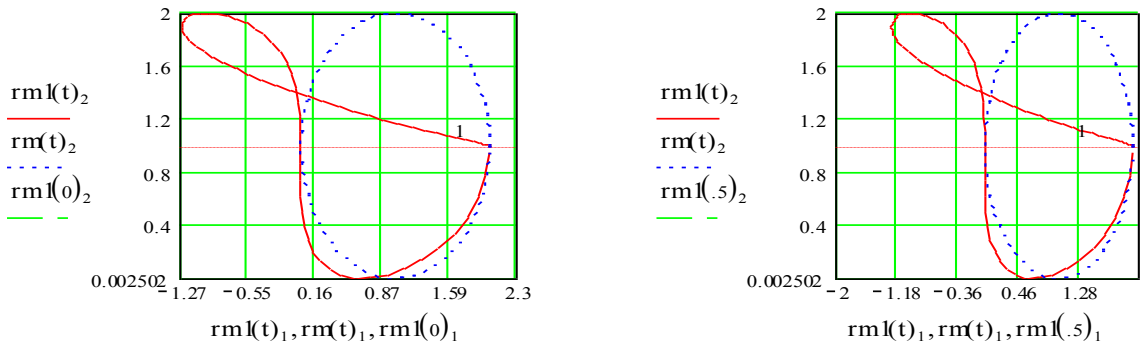


Рис. 3. Траектория движения

4. Выразим вектор переносной угловой скорости и ускорения подвижной системы отсчета.

$$\omega z(t) := \frac{d}{dt}\alpha(t) \qquad \omega e(t) := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \omega zx(t) \end{pmatrix} \qquad \varepsilon e(t) := \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \left(\frac{d^2}{dt^2}\phi(t)\right) \end{bmatrix}$$

5. Выразим вектор углового ускорения т. M в подвижной системе координат.

$$\varepsilon e(t) := \begin{pmatrix} \frac{d^2}{dt^2}\alpha(t) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

6. Выразим вектор относительной линейной скорости т. M в подвижной и неподвижной системах отсчета (рис. 4).

$$Vr(t) = \frac{d}{dt}rm(t) \qquad Vr(t) := \omega r(t) \times \rho(t) \qquad Vr1(t) := \left(Vr(t)^T \cdot m1(t)\right)^T$$

$$Vr1(t) := mo1(t) \cdot Vr(t)$$

7. Выразим вектор переносной и абсолютной линейной скорости т. M в неподвижной системе отсчета.

$$Ve1(t) := \omega e(t) \times rm1(t) \quad V1 := Ve1(t) + Vr1(t).$$

8. Выразим вектор углового и переносного ускорения в проекциях на оси подвижной и неподвижной системах отсчета.

$$\varepsilon e(t) := \begin{pmatrix} \frac{d^2}{dt^2}\alpha(t) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$Ar(t) = \begin{pmatrix} \frac{d^2}{dt^2} \cdot rm(t)_0 \\ \frac{d^2}{dt^2} \cdot rm(t)_1 \\ \frac{d^2}{dt^2} \cdot rm(t)_2 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad Ar(t) := \omega r(t) \times Vr(t) + \varepsilon r(t) \times \rho(t)$$

$$Ar1(t) := \left(Ar(t)^T \cdot m1(t)\right)^T$$

$$\varepsilon e(t) := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{d^2}{dt^2}\alpha(t) \end{pmatrix} \qquad Ae1(t) := \omega e(t) \times Ve1(t) + \varepsilon e(t) \times rm1(t)$$

Рис. 4. Решение задачи

Создадим анимацию (рис.5, рис. 6). Пусть число фрагментов анимации Fra := 72; переменная времени $t2 := \frac{t0}{Fra} \cdot FRAME$ дискретные величины I := 0 .. Fra j:= 0 .. 1.

1. Создадим траекторию т. M $M(t) := rm1(t)$

2. Создадим контура т. M и т. A $A2 = ra1(t2)$

$M2 := rm1(t2)$

3. Составим радиус-вектор т. M в неподвижной системе координат

$rm1(t) := \left[(rm(t))^T \cdot (m1(t))\right]^T$ или $ra1(t) := mo1(t) \cdot ra$ $rm1(t) := mo1(t) \cdot rm(t)$

5.Создадим контуры кольца

$$\rho_i := r0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \cos\left(\omega z(t2) \cdot t0 \cdot \frac{i}{Fra}\right) \\ \sin\left(\omega z(t2) \cdot t0 \cdot \frac{i}{Fra}\right) \end{pmatrix} \quad \rho 1_i := \left(\rho_i^T \cdot m1(t2)\right)^T \quad Ko_i := A2 + \rho 1_i$$

6.Создадим контур вектора - aM $am_j := A2 + (M2 - A2) \cdot j$

Рис. 5. Фрагмент анимации

7.Матрицы пофрагментного относительного и переносного вращений

$$Mr := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\phi(t2)) & \sin(\phi(t2)) \\ 0 & -\sin(\phi(t2)) & \cos(\phi(t2)) \end{pmatrix} \quad Me1 := \begin{pmatrix} \cos(\alpha(t2)) & \sin(\alpha(t2)) & 0 \\ -\sin(\alpha(t2)) & \cos(\alpha(t2)) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$Mor := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\phi(t2)) & -\sin(\phi(t2)) \\ 0 & \sin(\phi(t2)) & \cos(\phi(t2)) \end{pmatrix} \quad Moe := \begin{pmatrix} \cos(\alpha(t2)) & -\sin(\alpha(t2)) & 0 \\ \sin(\alpha(t2)) & \cos(\alpha(t2)) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

8.Контур треугольника с его относительным и переносным поворотом

$$tre(t1) := r0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \cos\left(\frac{2\pi}{3} \cdot t1\right) \\ \sin\left(\frac{2\pi}{3} \cdot t1\right) \end{pmatrix} \quad t1 := 0..5$$

$Tr(t1) := \left(tre(t1)^T \cdot Mr\right)^T$

$Tre(t1) := A2 + \left(tr(t1)^T \cdot Me1\right)^T$

или $T1(t1) := A2 + Moe \cdot Mor \cdot tre(t1)$

$$zve(t1) := r0 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \cos\left(\frac{2\pi}{5} \cdot t1\right) \\ \sin\left(\frac{2\pi}{5} \cdot t1\right) \end{pmatrix} \quad t1 := 0..5$$

$Zve(t1) := \left(Zve(t1)^T \cdot Mr\right)^T$

$Zv(t1) := A2 + \left(Zve(t1)^T \cdot Me1\right)^T$

или $Z1(t1) := A2 + Moe \cdot Mor \cdot zve(t1)$

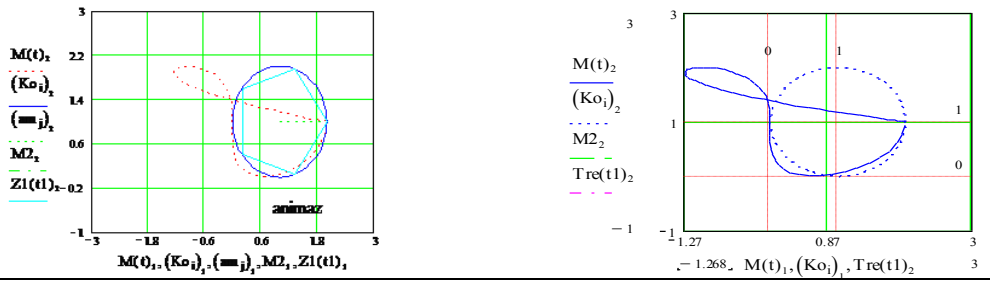


Рис. 6. Фрагмент анимации

Таким образом, применение в учебном процессе компьютеров позволяет существенным образом изменить методику изучения некоторых вопросов не только курса физики, но и математики, экономики и т.д., связанных с выполнением громоздких, многократно повторяющихся вычислительных процедур. А так же решением систем уравнений, построением графиков и поверхностей, наглядным представлением полученных результатов в решении задачи. Возможность применения методов компьютерного моделирования в процессе изучения дисциплины дает определенные преимущества.

Библиографический список

1. Майер, Р.В. Решение физических задач с помощью пакета MathCAD / Р.В. Майер. – Глазов: ГГПИ, 2006. – 37 с.
2. Кирьянов, Д.В. MathCAD 12: наиболее полное руководство / Д.В. Кирьянов. – СПб.: БХВ–Петербург, 2005. – 562 с.
3. Гурский, Д. Mathcad для студентов и школьников. Популярный самоучитель / Д. Гурский, Е. Турбина. – СПб.: Питер, 2005.
4. Очков, В. MCS (Mathcad Calculation Server) на занятиях по математике, физике, информатике / В. Очков // Компьютерные учебные программы и инновации. – 2008. – № 3. – С. 187–194.

К содержанию

ББК 4448.026: Ю925.131
УДК 378.025.7 + 159.955 – 057.87

РАЗВИТИЕ АЛГОРИТМИЧЕСКОГО СТИЛЯ МЫШЛЕНИЯ ПРИ ОБУЧЕНИИ СТУДЕНТОВ ВУЗА

Л.Ю. Филатова, А.С. Филатова

Рассмотрены понятия алгоритмическое мышление, оперативное мышление, операционный стиль мышления, алгоритмический стиль мышления. Показана необходимость развивать алгоритмический стиль мышления у студентов вуза в нашем современном мире.

Ключевые слова: мышление, алгоритмическое мышление, оперативное мышление, операционный стиль мышления, алгоритмический стиль мышления.

Мышление – самая высокая ступень познания, процесс отражения окружающего реального мира. Мышление способствует получению знаний об объектах, свойствах и отношениях окружающего мира, которые воспринимаются интуитивно или по аналогии.

Алгоритмическое мышление – это система определенным образом построенных мыслительных действий, которые способствуют при решении как теоретических, так и практических задач.

Алгоритмический стиль мышления обладает теми же свойствами, которыми обладает сам «алгоритм»: точностью, понятностью, определенностью, универсальностью, результативностью. Он позволяет решать задачи, возникающие в любой сфере человеческой деятельности, и не только в программировании или математике. Алгоритмическое мышление не обязательно связано только с вычислительной техникой, так как само понятие алгоритма, возникло задолго до появления первых ЭВМ. Решая большинство задач, даже жизненных и бытовых, человек сначала мысленно строит ход решения поставленной задачи с применением алгоритмического подхода, а затем уже приступает к ее практической реализации.

Алгоритмическое мышление очень помогает освоению новых знаний и навыков в процессе обучения, как в школе, так и в вузе. Способность мыслить точно, последовательно, становится одним из важных признаков информационной культуры человека в современном мире информационных компьютерных технологий.

Вот некоторые умения и навыки, которые требуются в процессе образовательной деятельности студентов вуза:

- умение планировать свою деятельность;
- умение разбивать каждый этап плана на более простые действия;
- умение анализировать результат своей деятельности;
- умение быстро находить нужную информацию;
- перерабатывать и усваивать большие потоки информации;
- умение выделять главное и второстепенное

Эти умения и навыки необходимы при освоении не только современных профессий, связанных с информационной деятельностью, но и для многих других профессий.

В 1985 году академиком А.П. Ершовым было введено понятие «операционный стиль мышления». Ершов считал, что таким стилем мышления должен обладать выпускник школы, который начнет свою трудовую деятельность в эпоху информатизации и компьютеризации. *Операционный стиль мышления* включает в себя следующие умения и навыки:

- осуществлять поиск информации, необходимой для описания объектов, процессов, явлений и систем;
- умение создавать информационные и математические модели для описания объектов, процессов, явлений и систем;
- умение составлять алгоритм решения любой задачи из разных предметных областей;
- умение строить компьютерные модели для компьютерного решения поставленной задачи;

– умение анализировать результат решения поставленной задачи, находить ошибки и исправлять ошибки.

Под алгоритмическим стилем мышления можно понимать систему мыслительных методов и приемов, направленных на решение задачи с использованием информационно-коммуникационных средств. К таким методам можно отнести:

– четкая постановка задачи;

– разбиение задачи на элементарные действия, т.е. составление алгоритма решения задачи;

– пошаговая реализация элементарных действий;

– использование выработанного алгоритма для решения подобных задач;

– умение создавать информационные модели;

– умение организовать поиск информации.

В настоящее время алгоритмический стиль мышления, а также операционный стиль мышления и связанные с ним компетенции необходимы не только профессиональным программистам или представителям смежных специальностей, они должны формироваться у каждого члена информационного общества.

Алгоритмический стиль мышления поможет студенту четко спланировать не только сами действия, но и правильно выбрать информационные, технические ресурсы при решении разнообразных задач в процессе обучения и задач реальной жизни. При этом появляется возможность выбрать наиболее целесообразный, оптимальный план действий в зависимости от сложившихся обстоятельствах.

Нахождение наиболее оптимального решения при заданных условиях, применение наиболее оптимального алгоритма – вот те навыки, которыми должны обладать современные студенты.

Алгоритмический стиль мышления должен формироваться подсознательно для решения не только теоретических, но и практических задач, в основе которого лежит создание эффективного плана действий. Поэтому алгоритмический подход важен не только при обучении информатики или программированию, а является одним из главных в процессе обучения студентов вуза вообще с тем, чтобы студенты быстро и оперативно ориентировались в современном мире.

Библиографический список

1. Газейкина, А.И. Стили мышления и обучение программированию студентов педагогического вуза / А.И. Газейкина // Информационные технологии в образовании. – 2006.

2. Ершов, А.П. Школьная информатика: (концепции, состояние, перспективы) / А.П. Ершов, Г.А. Звенигородский, Ю.А. Первин. – Новосибирск: Препринт ВЦ СО АН СССР, 1979. – 51 с.

3. Стась, А.Н. Развитие алгоритмического мышления в процессе обучения будущих учителей информатики / А.Н. Стась, Н.Ф. Долганова // Вестник ТГПУ. – 2012. – № 7. – С. 241–243.

4. Жужжалов, В.Е. Специфика обучения программированию при подготовке студентов-информатиков / В.Е. Жужжалов // Вестник МПГУ. – 2006 – №1.

5. Кнут, Д. Алгоритмическое мышление и математическое мышление / Д. Кнут. – URL: http:// www.philosophy.ru/library/.

К содержанию

УДК 004.75

ОБЛАЧНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

С.Н. Юдин, Н.И. Шурупов

В данной статье рассмотрены «Облачные вычисления», подразделение облачных систем, разновидности моделей облачных служб, минусы и плюсы облачных вычислений, и возможность применения этих систем в процессе обучения студентов вузов.

Ключевые слова: облако, облачные вычисления.

«Облачные вычисления» – информационно-технологическая концепция «вычислительного облака», в рамках которой разнообразные программы, выполняя свои задачи, выдают результаты работы в окно веб-браузера на удаленном персональном компьютере пользователя, а необходимые для работы приложения и их данные находятся на сервере в интернете.

Сама концепция «облачных вычислений» зародилась ещё в 60-х годах, когда Джон Маккарти поделился предположением, что в недалеком будущем вычисления на персональных компьютерах будут производиться с помощью «общенародных утилит». Однако идея облачных вычислений непосредственное развитие получила только в 2007. Это было связанно с быстрым развитием каналов связи и растущей в геометрической прогрессии потребности, как бизнеса, так и обычных пользователей, в горизонтальном масштабировании своих информационных систем. По оценке International Data Corporation рынок облачных вычислений уже к 2009 году составил $17 млрд – около 5 % от рынка информационных технологий в целом, но уже в 2014 году суммарные затраты организаций на инфраструктуру и услуги, связанные с облачными вычислениями, оцениваются почти в $175 млрд. На 2014 год большинство крупнейших ИТ-вендоров на мировом рынке, включая Google, Microsoft, HP, Intel, SAP, IBM, Oracle и другие, имеют в своей линейке решения облачных вычислений.

Рассмотрим более подробно подразделение облачных систем, а также перечислим разновидности моделей облачных служб.

Существуют следующие модели развёртывания:
– частное облако (Privatecloud);
– коммунальное облако (Communitycloud);
– публичное облако (Publiccloud);
– гибридное облако (Hybridcloud).

Частное облако (Privatecloud). Создает среду виртуализации на своих собственных серверах, принадлежащих либо самой организации, либо сервис-провайдеру управляемых услуг. Сервер находится в центре обработки данных. Такая структура подходит для компаний, которые либо чувствуют, что им необходимо иметь полный контроль над всеми аспектами их инфраструктуры, либо сделали внушительные финансовые вложения в развитие собственной IT-инфраструктуры.

Коммунальное облако (Communitycloud) представляет собой инфраструктуру, специально подготовленную для эксклюзивного использования определенной группой пользователей от организаций со сходными или общими проблемами. Облако при этом может находиться в собственности, обслуживании и управлении у одной или нескольких организаций в сообществе, располагаться у третьей стороны, как на территории, так и за пределами самой организации.

Публичное облако (Publiccloud) представляет собой инфраструктуру, подготовленную для свободного использования широкой публикой. Оно может находиться в собственности, обслуживании и управлении у научных, правительственных и деловых организаций в любых их сочетаниях. Располагается такое облако на территории облачного провайдера.

Гибридное облако (Hybridcloud) – структура, представляющая собой соединение нескольких различных инфраструктур облаков, имеющих уникальные объекты, но связанных между собой собственными или стандартизированными технологиями, позволяющими переносить данные или приложения между собой.

Существую следующие модели облачных служб: программное обеспечение как услуга (SaaS), платформа как услуга (PaaS), инфраструктура как услуга (IaaS). Далее остановимся на каждой модели более подробно.

Программное обеспечение как услуга (SaaS). При такой модели облачной службы все необходимое потребителю ПО разворачивается на основе Web, благодаря чему программное обеспечение оказывается полностью доступным через Web-браузер. Большим плюсом систем SaaS является то, что для пользователей не имеет значения, где установлено программное обеспечение, какую операционную систему оно использует и на каком языке оно написано – PHP, Java или NET. И самое главное – нет необходимости самостоятельно устанавливать что-либо и где-либо.

Платформа как услуга (PaaS). Разворачивается в облачной инфраструктуре потребительских приложений, реализованных с помощью языков программирования, библиотек, служб и средств, поддерживаемых провайдером услуг. Потребитель при этом не управляет базовой инфраструктурой облака, в том числе сетями, серверами, операционными системами и системами хранения данных, но имеет контроль над развернутыми приложениями и, возможно, некоторыми параметрами конфигурации среды хостинга.

Инфраструктура как услуга (IaaS). Эта модель предоставляет возможность потребителю систем обработки, хранения, сетей и других фундаментальных вычислительных ресурсов для развертывания и запуска произвольного программного обеспечения, которое может включать в себя операционные системы и приложения. При этом потребитель не имеет права управления базовой инфраструктурой облака, но может контролировать операционные системы, системы хранения, развернутые приложениями, а также осуществляет ограниченный контроль выбора сетевых компонентов (например, хост с сетевыми экранами).

Кроме моделей облачных служб и систем облачных вычислений немалую роль в инфраструктуре облака играет физическая безопасность данных. Физическая безопасность определяет, каким образом осуществляется управление физическим доступом к серверам, поддерживающим вашу инфраструктуру. Облачная среда все еще может иметь ограничения по физической безопасности. В конце концов, физические серверы все-таки существуют, и они где-то стоят и работают. Кроме запланированных рабочих моментов, могут происходить и сбои в работе. Восстановление после тривиальных сбоев и процесс аварийного восстановления в облачной инфраструктуре почти неотличим один от другого. В результате этого, даже если вся ваша облачная инфраструктура будет разрушена, при правильном подходе вы сможете восстановить ее в полном объеме либо на внутренних серверах, либо в центре обработки данных провайдера управляемых услуг, либо прибегнув к услугам другого облачного провайдера. При этом сам процесс восстановления можно провести за считанные часы или даже минуты. В мировой практике «облачных» вычислений известны случаи, когда потребитель в течение длительного времени не мог получить доступ к приложениям. А банальное «отключение Интернета» по вине провайдера может сделать работу с «облачными» ресурсами невозможной в принципе.

Очевидно, что перед началом проектов, связанных с выносом тех или иных ИТ-сервисов в «облака», заказчикам следует оценить подобные риски, провести тщательную инвентаризацию приложений, и только затем принимать решения о том, как выстраивать свое «облачное» ИТ-будущее.

Облачные вычисления снижают требования к вычислительной мощности ПК, обладают высокой скоростью обработки данных, явно снижают за-

траты на аппаратное и программное обеспечение, на обслуживание и электроэнергию. Экономят дисковое пространство, т.к. и данные, и программы находятся в интернете, но имеют зависимость сохранности пользовательских данных от компаний, предоставляющих услугу.

«Облака» в свою очередь можно широко использовать в обучение, в том числе и в обучение в высших учебных заведениях. Плюсом является мобильность облачных вычислений, а так же то, что отпадает необходимость в использование различных носителей информации при копировании учебных данных, таких как экзаменационные вопросы, электронные учебники и прочее. Достаточно поместить свою информацию в «облако», студентам выдать ссылку на него и они смогут в любой момент, находясь где угодно, скачать необходимые данные. У нас в филиале активно используются облачные вычисления в ряде дисциплин входящих в цикл обучения студентов.

Библиографический список

1. Риз, Д. Облачные вычисления / Д. Риз; пер. с англ. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 288 с. – URL: http://tadviser.ru/a/58062.

К содержанию

НАУКА ЮУрГУ

Материалы 67-й научной конференции

СЕКЦИИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Текстовое электронное издание

14,4 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 03.07.2015.
Тираж 100 экз. Заказ 371.

454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76