

МНС

2016

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ – 2016**

**Красноярск
2016**

Министерство образования и науки РФ
Сибирское отделение РАН
Сибирский федеральный университет
Институт вычислительного моделирования СО РАН
Институт систем энергетики им. Л. А. Мелентьева СО РАН
Институт физики СО РАН

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ-2016

МАТЕРИАЛЫ
ДЕВЯТНАДЦАТОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
7 – 9 октября 2016 года

Красноярск 2016

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

Моделирование неравновесных систем: Материалы XIV Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2016. –168 с.

В сборнике представлены материалы XIV Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем» (МНС–2016), проходившего в городе Красноярске 7–9 октября 2016 г.

Проблема моделирования неравновесных систем – одна из важнейших современных научных проблем на стыке математического моделирования, физики, химии, биологии, социальных наук. Важнейшим итогом конференции является обмен последними результатами в различных областях моделирования и исследования неравновесных моделей, описывающих самые различные конкретные системы в области химии, биоинформатики, экологии, генетики, биофизики, социологии, демографии, теории управления сложными системами, теории управления рефлексивными системами, политологии. Среди главных достижений конференции – формирование целостного взгляда на подходы в моделировании неравновесных систем различной природы среди участников этой конференции, распространение опыта и новейших методов моделирования и анализа таких систем на более широкие области применимости.

Материалы предназначены для научных работников, преподавателей, студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

Редакционная коллегия:

Садовский Михаил Георгиевич – ответственный редактор

Сенашова Мария Юрьевна – ответственный за выпуск

© ИВМ СО РАН, 2016

© Коллектив авторов, 2016

ISBN 978-5-906455-10-9



9 785906 455109

ВЫДЕЛЕНИЕ В СЛОЖНОМ ПРИРОДНОМ ОБЪЕКТЕ ЗОН, ВЕЩЕСТВО КОТОРЫХ РАВНОВЕСНО ПО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМ ПАРАМЕТРАМ С ВЕЩЕСТВОМ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ (НА ПРИМЕРЕ ОЗ. БАЙКАЛ)

Астраханцева О.Ю.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, e-mail: astra@igc.irk.ru

Одной из основных проблем в моделировании неравновесных природных систем является выделение в изучаемом сложном открытом иерархическом объекте зон, вещество которых равновесно по физико-химическим параметрам с веществом окружающей среды.

Идея о локальном термодинамическом равновесии была впервые высказана И. Пригожиным (1960). Классическая неравновесная термодинамика рассматривает термодинамические переменные как локальные в пространстве величины. Заслугой неравновесной термодинамики является установление того факта, что самоорганизация является общим свойством открытых систем. При этом именно неравновесность служит источником упорядоченности. Этот вывод послужил отправной точкой для идей, выдвинутых представителями Брюссельской школы во главе с И. Пригожиным (1960).

Цель данной статьи – на примере сложного открытого иерархического объекта – вод озера Байкал – показать метод выделения в озере зон или районов, вещество вод которых равновесно по физико-химическим параметрам с веществом окружающей среды.

Если вещество вод озера Байкал в целом неравновесно по физико-химическим параметрам с параметрами вещества окружающей среды и по условиям формирования новообразованного продукта является мегасистемой, необходимо установить условные границы входящих в нее взаимодействующих систем, вещество которых по физико-химическим параметрам находятся в равновесии с веществом окружающей среды. Если каждую систему в мегасистеме называть резервуаром, то динамику мегасистем можно называть “резервуарной” динамикой. Для выделения в веществе оз. Байкал зон со стабильными термодинамическими параметрами, обменивающихся веществом и энергией с окружающей средой, и, соответственно, стабильными физико-химическими процессами, необходимо оценить состояние вещества озера, а вернее, параметры изменения этого состояния как по акватории озера, так и в глубину. По теории И. Пригожина (1960) стационарное неравновесное состояние системы можно охарактеризовать теми же параметрами, что и равновесное: температурой, давлением, химическими потенциалами компонентов системы, но не с постоянными для всей системы значениями, а зависящими от координат и времени.

Для выделения зон – объемов вещества вод озера с постоянными физико-химическими параметрами в масштабе исторического времени, использованы следующие принципы и методы:

– *системный подход*. К озеру Байкал, как к макросистеме, применим метод познания свойств внутренней среды, законов движения энергии и массовой формы ее выражения (вещества) через температуру, давление и химический состав вещества его вод, т.е. через общее взаимодействие вещества вод озера с веществом окружающей среды. К закрытой макросистеме “вещество вод оз. Байкал – вещество потоков окружающей среды”, применимы законы термодинамики, которые позволяют оценить физико-химическое состояние ее вещества;

– понятие “состояние вещества вод оз. Байкал”. Состояние вещества вод оз. Байкал с точки зрения характера геохимической среды (температура, давление, химический со-

став компонентов, Eh, pH, минерализация) есть отражение характера общего взаимодействия вещества оз. Байкал с веществом окружающей среды, следовательно, анализ целостности и однородности свойств изучаемого химического взаимодействия вещества вод оз. Байкал и вещества окружающей среды (химических потоков) зависит от однородности общего взаимодействия вещества озера с веществом окружающей среды и оценка состояния вещества вод оз. Байкал означает учет всех взаимодействий, т.е. учет всех физико-химических характеристик системы как результата этих взаимодействий. Взаимодействия – обмен массовым и безмассовым веществом. Оз. Байкал является партнером Земли по массе при силовом воздействии друг на друга, т.е. озеро испытывает физическое (гравитационное) взаимодействие с Землей, партнером с химическими потоками в плане материального (химического) обмена веществом и энергией и партнером с атмосферой по обмену веществом (фотоны) и тепловой энергией. Тепловой энергетический баланс вод оз. Байкал как результат обмена теплом и влагой с окружающим его пространством исследован в работе [3], где установлено, что структура теплосодержания вещества вод оз. Байкал упорядочена именно таким образом – в пять резервуаров (Южный, Селенгинский, Средний, Ушканьеостровский, Северный);

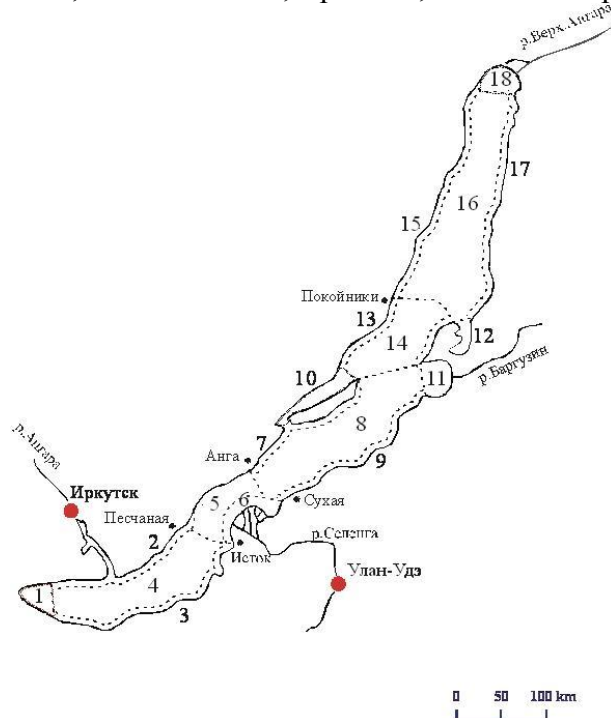


Рис. 1. Схема районов оз. Байкал (на основании распределения величины теплосодержания вещества вод оз. Байкал по акватории озера) [3].

Южный Байкал: 1) южная оконечность; 2) северо-западный прибрежный район; 3) юго-восточный прибрежный район; 4) центральный район. Селенгинский район: 5) северо-западный прибрежный район; 6) юго-восточный прибрежный район. Средний Байкал: 7) северо-западный прибрежный район; 8) центральный район; 9) юго-восточный прибрежный район; 10) Малое Море; 11) Баргузинский залив; 12) Чивыркуйский залив. Ушканьеостровский район: 13) северо-западный прибрежный район; 14) центральный район. Северный Байкал: 15) северо-западный прибрежный район; 16) центральный район; 17) юго-восточный прибрежный район; 18) северная оконечность.

– закон транзитивности термического равновесия. На неизменность в масштабах исторического времени макроскопических величин – температуры, давления, объема, энтропии, т.е. на состояния локального термодинамического равновесия в веществе вод оз. Байкал (на постоянство тепловых, химических и силовых балансовых характеристик по обмену массовым и безмассовым веществом с веществом окружающей сре-

ды), указывают состояния теплового равновесия вещества вод пяти крупных районов (резервуаров) оз. Байкал. Состояние термодинамического равновесия вещества вод резервуаров в свою очередь указывает на состояние частных (физического, теплового и химического) равновесий этих резервуаров с веществом окружающей среды и на стабильные в масштабах исторического времени физико-химические характеристики вещества в этих резервуарах. Следовательно, согласно закону транзитивности, состояние теплового равновесия вещества вод пяти крупных районов (резервуаров) оз. Байкал указывает на состояние физического и химического равновесий вещества вод резервуаров с веществом окружающей среды;

– *метод многорезервуарности* или метод введения системы, состоящей из подсистем, когда рассматриваются состояния ограниченных равновесий и использованы представления локально-равновесной термодинамики. На основе принципов термодинамики в веществе вод озера Байкал рационально выделены зоны с наиболее вероятными состояниями с точки зрения характера геохимической среды и, соответственно, свойствами, физико-химические параметры которых равновесны таковым же параметрам окружающей среды. Использована теория И. Пригожина (1960) о стационарном неравновесном состоянии системы;

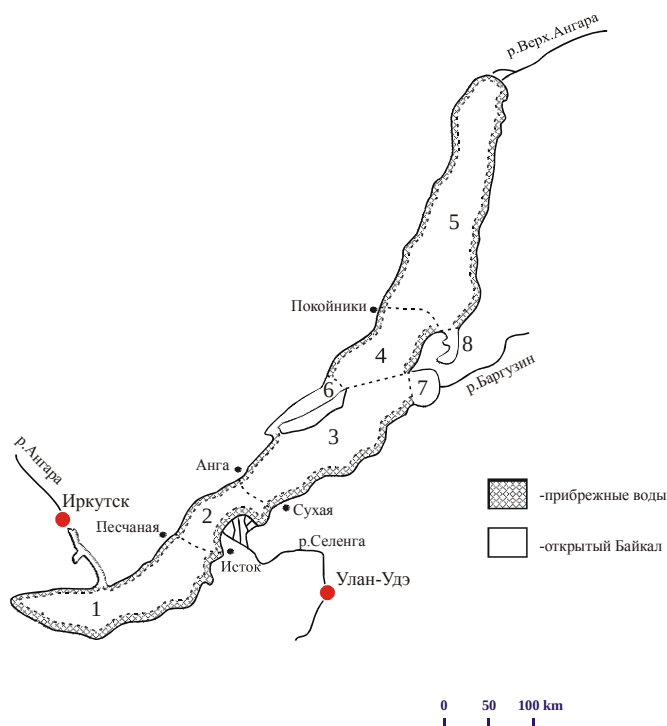


Рис. 2. Схема зональности геохимических состояний вещества вод оз. Байкал (схема пространственно локализованных зон-резервуаров в веществе вод оз. Байкал естественных физико-химических равновесий с веществом окружающей среды, со стабильными физико-химическими параметрами в масштабе исторического времени): 1) Южный; 2) Селенгинский; 3) Средний; 4) Ушканьеостровский; 5) Северный; 6) Малое Море; 7) Баргузинский залив; 8) Чивыркуйский залив. Резервуары 1) – 5) разделены на прибрежные воды и открытый Байкал.

– *нулевой закон термодинамики* – закон термического равновесия доказывает равенство внешних условий (окружающей среды) в системах-резервуарах озера Байкал по различию температурных характеристик вод резервуаров. Каким фактором вызвано это неравенство внешних условий и внутренних состояний систем-резервуаров озера

Байкал? Геохимический тип состава вещества вод оз. Байкал определяют климатические и геолого-структурные факторы. Климат контролирует биологическую продуктивность озера и условия формирования вещества в озере. М.М. Кожов составил схему районирования оз. Байкал по горизонтальному распределению планктона [6], где он отделяет прибрежные воды и места впадения крупных рек в озеро от открытых вод, но биологическая продуктивность открытых вод оз. Байкал одинакова на всем протяжении озера. Проявления и влияние климата однородно по акватории озера, и не климат является причиной различия (неоднородности) теплового или энергетического обмена, а другой фактор – геолого-структурный, т. е. резкая расчлененность дна озера, которая обуславливает резкое различие глубин и объемов вод озера по его акватории и, соответственно неоднородность градиентов масс вещества вод озера и гидростатических давлений. Резкая расчлененность дна озера обуславливает неоднородность взаимодействия гравитационного поля вещества вод озера Байкал и гравитационного поля Земли. На основе существующих схем районирования озера Байкал по тепловому балансу [6] и гидродинамическим характеристикам [1], представляется возможным проведение районирования вещества вод озера Байкал по состоянию характера его геохимической среды с выделением по горизонтали озера пяти резервуаров со стационарным режимом распределения индивидуальных стабильных физико-химических характеристик: 1) Южный, 2) Селенгинский, 3) Средний, 4) Ушканьеостровский и 5) Северный резервуар (рис. 2). Из отдельных заливов – Малое Море, Баргузинский и Чивыркуйский заливы. Вещество вод каждого резервуара разделено на вещество вод прибрежной зоны и вещество вод открытого Байкала.

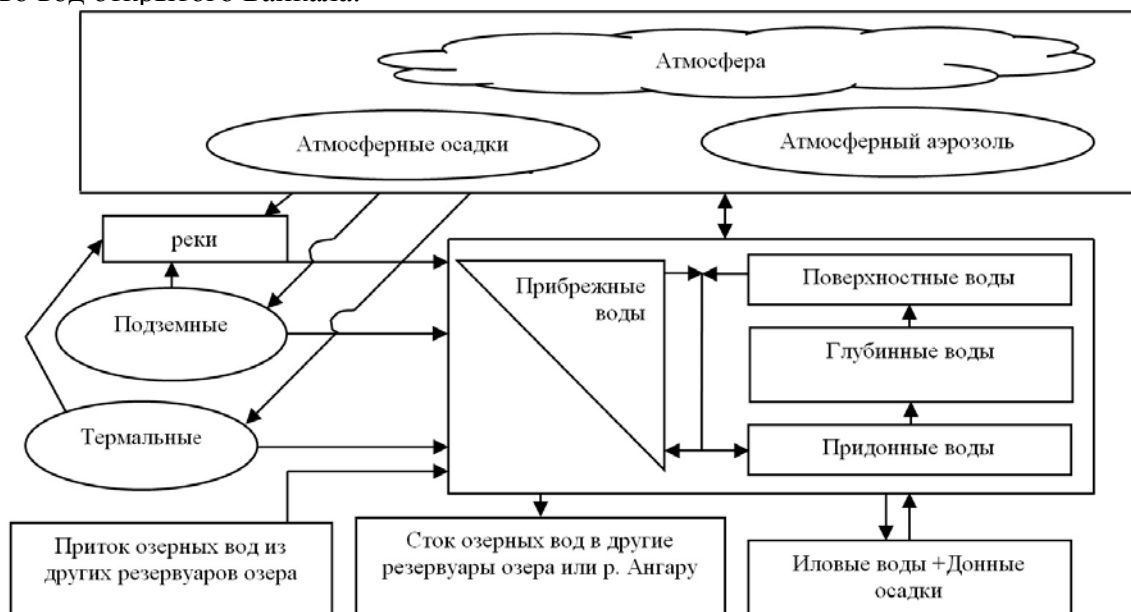


Рис. 3. Схема химического взаимодействия в системе “вещество вод резервуара оз. Байкал – вещество окружающей среды (потoki)”.

Многие исследователи делили вертикальную структуру вод оз. Байкал на три области: поверхностную, глубинную, придонную: по температурным признакам [4, 5, 10, 17], по динамическим скоростям течений [2, 5], по гидрохимическим [12], гидробиологическим [11], по оптической структуре вод на примере показателя ослабления светового излучения [14]. Доля каждой из зон составляет примерно 0.3; 0.5 и 0.2 от полной глубины соответственно [2, 15, 16]. Соотношение размеров прибрежной зоны и открытой части озера приблизительно 1:10 [7]. Открытый Байкал – воды озера за пределами прибрежной полосы (рис. 2, 3). Модель движения вещества (компонентов) в глобальной мегасистеме “вещество вод оз. Байкал – вещество потоков окружающей среды” представляется как совокупность последовательно связанных потоками водного раствора

химических реакторов – резервуаров. Учитывая схему течений в резервуарах оз. Байкал [14, 16], вещество каждого резервуара можно представить как химический реактор (рис. 4).

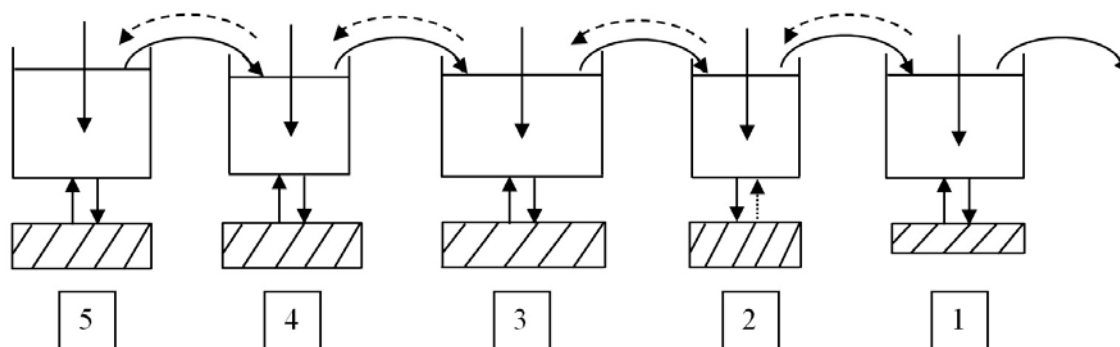


Рис. 4. Схема протекания процесса взаимодействия вещества вод оз. Байкал и вещества потоков в глобальной мега-системе “вещество оз. Байкал – вещество потоков окружающей среды” как совокупность последовательно связанных потоками водного раствора химических реакторов – резервуаров: 1- вещество Южного резервуара, 2 – вещество Селенгинского резервуара, 3 – вещество Среднего резервуара, 4 – вещество Ушканьеостровского резервуара, 5 – вещество Северного резервуара.

Учитывая схему течений в резервуарах оз. Байкал (рис. 5) [14, 16], вещество каждого резервуара можно представить как химический реактор (рис. 6).

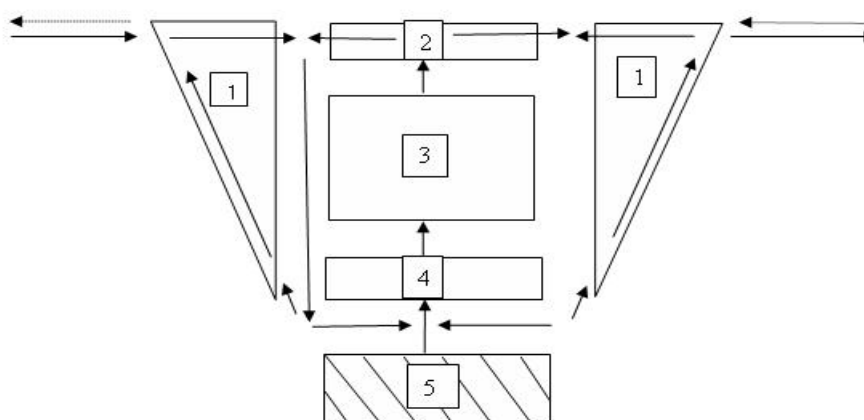


Рис. 5. Схема течений в резервуарах оз. Байкал [13, 15]: 1 – прибрежные воды; 2 – поверхностные; 3 – глубинные; 4 – придонные воды; 5 – донные отложения.

Развитие вещества вод оз. Байкал, как системы взаимодействия его с веществом окружающей среды, определяется внешними условиями: неоднородностью сил гравитации, направленными к центру Земли (неоднородностью градиента давления), тепловым потоком (температура (климат)), химическими потоками (реки, взвесь рек, дождь+снег, аэрозоль, подземные воды, минеральные воды, приток озерных вод из других резервуаров озера, поток из донных отложений, поток в донные отложения, сток озерных вод в другие резервуары озера и в реку Ангару). Все эти факторы определяют систему как состоящую из неравновесных друг с другом резервуаров, но равновесных с веществом окружающей среды, т.е. находящуюся в постоянстве своего состояния – как стационарную систему.

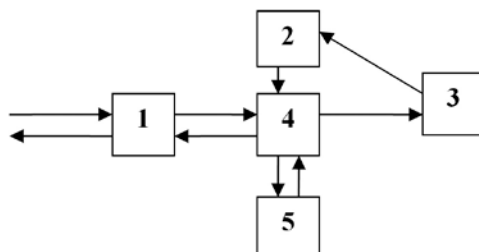


Рис. 6. Схема взаимодействия вещества подсистем и вещества потоков в системе “вещество резервуара оз. Байкал – вещество потоков окружающей среды” как химический реактор: 1- вещество прибрежных вод, 2 – вещество поверхностных вод, 3 – вещество глубинных вод, 4 – вещество придонных вод, 5 – вещество донных отложений.

Гравитационное и тепловое взаимодействия окружающей среды с веществом подсистем резервуаров сильно различается по вертикали озера, следовательно, различаются и физико-химические свойства подсистем, которые зависят от этих взаимодействий, т.е. условия протекания процессов, разные. Мегасистема “вещество вод оз. Байкал – вещество окружающей среды” упорядочена или самоорганизована в вещество подсистем с различающимися состояниями, со стабильными в масштабе исторического времени индивидуальными физико-химическими характеристиками, условиями формирования конечных продуктов химических реакций и энергетическим балансом, обменивающиеся потоками вещества и энергии (прибрежные воды, поверхностные воды, глубинные воды, придонные воды) вещества пяти резервуаров озера, находящихся в равновесии по физико-химическим параметрам с веществом внешней среды: “вещество вод Южного резервуара – вещество окружающей среды”, “вещество вод Селенгинского резервуара – вещество окружающей среды”, “вещество вод Среднего резервуара – вещество окружающей среды”, “вещество вод Ушканьеостровского резервуара – вещество окружающей среды”, “вещество вод Северного резервуара – вещество окружающей среды” (рис. 2).

Разработка метода выделения из сложного эволюционирующего и иерархического объекта – части физического мира – системы “вещество вод озера Байкал – вещество потоков окружающей среды” систем термодинамического типа и введение составной системы “мегасистема “вещество вод озера Байкал – вещество потоков окружающей среды””, когда рассматриваются состояния ограниченных равновесий и используются представления локально-равновесной термодинамики, позволило сделать следующие **выводы**.

1. Химическое взаимодействие компонентов вещества вод озера Байкал с компонентами вещества потоков природной составляющей окружающей среды – природная, стационарная мегасистема, состоящая из пяти резервуаров – пространственно локализованных объемов вещества вод озера, физико-химические параметры которых находятся в состоянии равновесия (равенства) с таковыми же параметрами окружающей среды, т.е. постоянны в масштабе исторического времени (периоде нескольких десятков лет), и открытых по отношению к веществу потоков окружающей среды. Важным фактором, определяющим локализацию равновесных состояний вещества вод озера, является разновеликое силовое (гравитационное) взаимодействие вещества вод озера Байкал и вещества Земли по акватории озера из-за морфологических характеристик – резкой расчлененности дна.

2. Анализ целостности и однородности свойств изучаемого химического взаимодействия вещества вод оз. Байкал с веществом потоков окружающей среды зависит от однородности общего – термодинамического (физического, теплового, химического) взаимодействия вещества вод озера с веществом окружающей среды и подход к данно-

му исследованию означает учет всех физико-химических характеристик системы как результата всех взаимодействий.

3. Разновеликое взаимодействие гравитационных полей вещества вод озера Байкал и вещества Земли по акватории озера из-за его морфологических характеристик – резкой расчлененности дна обуславливает индивидуальность приходной и расходной статей в энергетических балансах и, соответственно, самих энергетических балансов резервуаров. Индивидуальность энергетического потенциала каждого резервуара объясняет индивидуальность отклика вещества резервуаров на поступление компонентов вещества потоков окружающей среды и, соответственно, параметры геохимической среды в резервуарах как результат этих процессов.

Список литературы

1. Базикалова А.Я., Верещагин Г.Ю., Леванидова И.М. и др. Байкал (научно-промысловый очерк). – Иркутск: Библиотека Лимнол. ин-та СО АН. – 1946. – 7 с.
2. Верболов В.И. Проблема изучения гидродинамики глубокого водоема (на примере Байкала) // Кружоворот вещества и энергии в водоемах. Гидрология и климат. – Листвянка на Байкале. – 1977. – С. 199-203.
3. Верболов В.И., Сокольников В.М., Шимараев М.Н. Гидрометеорологический режим и тепловой баланс оз. Байкал. – М. Л.: Наука. – 1965. – 373 с.
4. Верещагин Г.Ю. Основные черты вертикального распределения водных масс на Байкале // Академику В.И. Вернадскому к 50-летию научной и педагогической деятельности. Часть вторая. М. – 1936. – С. 1207-1230.
5. Вотинцев К.К. Некоторые итоги гидрохимических исследований оз. Байкал // Изв. Сиб. отд. АН СССР. – 1958. – № 2. – С. 6-12.
6. Кожов М.М. Вертикальное распределение планктона и планктоноядных рыб оз. Байкал // Вопросы ихтиологии. – Вып. 2. – 1954. – С. 7-20
7. Ли М.Е., Неуймин Г.Г., Шерстянкин П.П. Некоторые черты динамики вод Байкала по материалам гидрооптических наблюдений. Течения и диффузия вод Байкала. Л.: Наука. – 1970. – С. 136-145.
8. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. – М.: Изд-во иностр. лит-ры. – 1960. – 160с.
10. Россолимо Л.А. Температурный режим озера Байкал. Труды Байкальской лимнол. станции. Т. 16. М.: Изд-во АН СССР, Вост.-Сиб. Филиал. – 1957. – 561 с.
11. Тарасова Е.Н., Вотинцев К.К. Взвешенное органическое вещество и доля взвешенного органического углерода в водах Байкала // Взаимодействие между водой и седиментами в озерах и водохранилищах. - Л.: Наука. – 1984. – С. 61-72.
12. Толмачев В.А. О сезонных колебаниях растворимого кислорода на Больших глубинах Байкала // Докл. АН СССР. – 1957. – Т. 113. – № 2. – С. 395-398
13. Шерстянкин П.П. Присклоновые фронты показателя ослабления света на Байкале в зимний период // Докл. АН СССР. – 1991. – Т. 321. – № 5. – С. 1087-1090.
14. Шерстянкин П.П. Оптические структуры и фронты океанического типа на Байкале. Дис.... д-ра физ.-матем. наук (в форме научного доклада). ИО РАН, М. – 1993. – 37 с.
15. Шерстянкин П.П. Байкал, питьевая вода, устойчивое развитие: сегодня и в XXI веке // Химия в интересах устойчивого развития. – 1997. – № 5. – С.443-451
16. Шерстянкин П.П., Куимова Л.Н. Термобарическая устойчивость и неустойчивость глубоких природных вод озера Байкал // Докл. АН СССР. – 2002. – Т. 385. – № 2. – С. 247-251.
17. Шимараев М.Н. Элементы теплового режима озера Байкал. – Новосибирск: Наука, СО. – 1977. – 148 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАРЯДА В НЕСИММЕТРИЧНОМ N-P-ПЕРЕХОДЕ

Н.М. Богатов

Кубанский государственный университет, bogatov@phys.kubsu.ru

Теория полупроводниковых приборов с р-п-переходами, построенная Шокли [1], непрерывно совершенствуется. Популярность получили модели, описывающие два предельных случая: резкий р-п-переход, плавный р-п-переход с линейным распределением примесей [2, 3]. Для р-п-переходов с реальным профилем примесей разработаны численные модели.

Ключевым положением теории является существование области пространственного заряда (ОПЗ), в которой концентрация электронов и дырок много меньше концентрации легирующих примесей [1]. Учет концентрации носителей заряда позволяет более точно рассчитать размер ОПЗ [2, 3]. В случае сильно несимметричных, а также сверхмелких р-п-переходов используются численные модели [4, 5].

Правильное описание р-п-перехода необходимо для решения прикладных задач и определения параметров области объемного заряда реальных полупроводниковых структур [6]. В работах [7, 8] изучалось влияние поверхностного заряда на изменение потенциального барьера структур с мелким р-п-переходом.

В работах [9, 10] с помощью численного моделирования показано, что в мелком, несимметричном, диффузионном р-п-переходе присутствуют 3 области: 1 – эмиттер, содержащий плотность положительного заряда меньшую, чем концентрация ионизированных доноров; 2 – область, обогащенная электронами, в которой концентрация электронов превышает концентрацию ионизованных примесей; 3 – область, обедненная электронами и дырками, содержащая плотность отрицательного заряда, созданного ионизированными акцепторами.

Цель работы – рассчитать плотность заряда в резком несимметричном р-п-переходе, используя численное решение уравнения Пуассона.

Рассмотрим планарный резкий п-р-переход (рис. 1). ОПЗ расположена при $-d_n \leq x \leq d_p$. Концентрации ионизованных доноров $N_D(x)$ и акцепторов $N_A(x)$ задаются в виде ступенчатых функций:

$$N_A(x) = \begin{cases} 0, & -w_n \leq x < 0 \\ N_A, & 0 \leq x \leq w_p \end{cases}, \quad N_D(x) = \begin{cases} N_D, & -w_n \leq x \leq 0 \\ 0, & 0 < x \leq w_p \end{cases}. \quad (1)$$

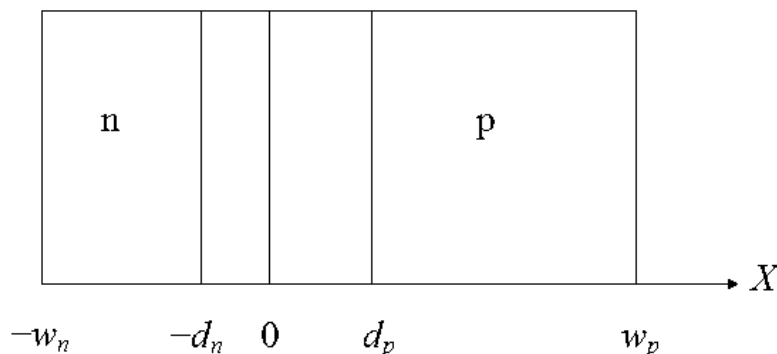


Рис.1. Схема n-p-перехода.

Концентрации электронов $n(x)$, дырок $p(x)$ определяются по формулам [2]:

$$n(x) = N_c e^{\frac{F - E_g + q\phi(x)}{kT}}, \quad p(x) = N_v e^{\frac{-F - q\phi(x)}{kT}}, \quad (2)$$

где N_c – эффективная плотность электронных состояний в окрестности дна зоны проводимости, F – электрохимический потенциал (уровень Ферми), отсчитанный от вершины валентной зоны в точке $x = w_p$, q – элементарный заряд, $\varphi(x)$ – потенциал внутреннего электрического поля, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, N_v – эффективная плотность электронных состояний в окрестности вершины валентной зоны, E_g – ширина запрещенной зоны.

Потенциал внутреннего электрического поля является решением уравнения Пуассона [2]:

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) = -\frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} (p(x) - n(x) + N_D(x) - N_A(x)), \quad (3)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость вещества, ε_0 – диэлектрическая постоянная.

Дополнительным условием для уравнения (3) является условие общей электро-нейтральности [2]:

$$\int_{-w_n}^{w_p} (p(x) - n(x) + N_D(x) - N_A(x)) dx = 0. \quad (4)$$

В общем случае заряд распределен по всей длине полупроводника при $-w_n < x < w_p$, так что параметры d_n , d_p не входят в уравнения явно. В рассматриваемой структуре плотность заряда на внешних поверхностях отсутствует, поэтому

$$p(-w_n) - n(-w_n) + N_D = 0, \quad (5)$$

$$p(w_p) - n(w_p) - N_A = 0. \quad (6)$$

Для идеальной плоскопараллельной структуры из (4 – 6) следует

$$\left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=-w_n} = \left. \frac{d}{dx} \varphi(x) \right|_{x=w_p} = 0. \quad (7)$$

Подставим (1), (2) в (3) и проинтегрируем полученное уравнение, получим при $-w_n \leq x \leq 0$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\frac{d}{dx} \varphi \right)^2 &= \frac{kT}{\varepsilon \varepsilon_0} \left(N_v \exp \left(\frac{-F - q\varphi}{kT} \right) \right) + \\ &+ \frac{kT}{\varepsilon \varepsilon_0} \left(N_c \exp \left(\frac{F - E_g + q\varphi}{kT} \right) \right) - \frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} N_D \varphi + C_1, \end{aligned} \quad (8)$$

при $0 \leq x \leq w_p$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\frac{d}{dx} \varphi \right)^2 &= \frac{kT}{\varepsilon \varepsilon_0} \left(N_v \exp \left(\frac{-F - q\varphi}{kT} \right) \right) + \\ &+ \frac{kT}{\varepsilon \varepsilon_0} \left(N_c \exp \left(\frac{F - E_g + q\varphi}{kT} \right) \right) + \frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} N_A \varphi + C_2. \end{aligned} \quad (9)$$

Начало отсчета потенциала выбирается произвольно, положим $\varphi(w_p) = 0$.

Равенства (7) дают граничные условия для уравнений (8), (9). Используя (7) и (8), получим при $-w_n \leq x \leq 0$:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d}{dx} \varphi \right)^2 = \frac{kT}{\varepsilon \varepsilon_0} \left[N_v \exp \left(\frac{-F}{kT} \right) \left(\exp \left(\frac{-q\varphi}{kT} \right) - \exp \left(\frac{-q\varphi(-w_n)}{kT} \right) \right) + \right.$$

$$+ N_c \exp\left(\frac{F - E_g}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{q\varphi}{kT}\right) - \exp\left(\frac{q\varphi(-w_n)}{kT}\right) \right) - \frac{q}{kT} N_D (\varphi - \varphi(w_n)) \right]. \quad (10)$$

Используя (7) и (9), получим при $0 \leq x \leq w_p$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left(\frac{d}{dx} \varphi \right)^2 &= \frac{kT}{\varepsilon \varepsilon_0} \left[N_v \exp\left(\frac{-F}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{-q\varphi}{kT}\right) - 1 \right) + \right. \\ &\quad \left. + N_c \exp\left(\frac{F - E_g}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{q\varphi}{kT}\right) - 1 \right) + \frac{q}{kT} N_A \varphi \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

Для структуры, представленной на рис.1, функция $\varphi(x)$ является монотонно убывающей. Преобразуем уравнение (10), используя (2) и (5), к виду

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \varphi &= - \sqrt{\frac{2kT}{\varepsilon \varepsilon_0}} \left[2N_v \exp\left(\frac{-F - q\varphi(-w_n)}{kT}\right) \left(\cosh\left(\frac{q(\varphi - \varphi(-w_n))}{kT}\right) - 1 \right) + \right. \\ &\quad \left. + N_D \left(\exp\left(\frac{q(\varphi - \varphi(-w_n))}{kT}\right) - 1 - \frac{q}{kT} (\varphi - \varphi(-w_n)) \right) \right]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (12)$$

Преобразуем уравнение (11), используя (2) и (6), к виду

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \varphi &= - \sqrt{\frac{2kT}{\varepsilon \varepsilon_0}} \left[2N_c \exp\left(\frac{F - E_g}{kT}\right) \left(\cosh\left(\frac{q\varphi}{kT}\right) - 1 \right) + \right. \\ &\quad \left. + N_A \left(\exp\left(\frac{-q\varphi}{kT}\right) - 1 + \frac{q\varphi}{kT} \right) \right]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Функция $\varphi(x)$ непрерывна на границе $x = 0$:

$$\begin{aligned} \varphi(x) \Big|_{x=0} &= \varphi(x) \Big|_{x=+0} = \varphi(0), \\ \frac{d}{dx} \varphi(x) \Big|_{x=0} &= \frac{d}{dx} \varphi(x) \Big|_{x=+0}. \end{aligned} \quad (14)$$

Подставив (12) и (13) в (14), используя (5) и (6), найдем $\varphi(0)$:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \frac{N_D \varphi(-w_n)}{(N_D + N_A)} - \frac{kT(N_D - N_A)}{q(N_D + N_A)} - \\ &\quad - \frac{2kT}{q(N_D + N_A)} \left[N_v \exp\left(\frac{-F - q\varphi(-w_n)}{kT}\right) - N_c \exp\left(\frac{F - E_g}{kT}\right) \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

В (15) значение F является корнем уравнения (6), а $\varphi(-w_n)$ – корнем уравнения (5).

При заданных N_c , N_v , E_g , q , k , T , ε , ε_0 , N_D , N_A , w_n , w_p , находим потенциал внутреннего электрического поля $\varphi(x)$ при $-w_n \leq x \leq 0$ как численное решение уравнения (12) с граничным условием $\varphi(-w_n)$, а при $0 \leq x \leq w_p$ как численное решение уравнения (13) с граничным условием $\varphi(w_p) = 0$.

Рассчитанная зависимость $\varphi(x)$ и формулы (2) использовались для определения плотности заряда

$$\rho(x) = p(x) - n(x) + N_D(x) - N_A(x). \quad (16)$$

Рассчитана плотность заряда в кремниевом п-р-переходе при $T = 300$ К. Параметры N_c , N_v , E_g , ε для кремния приведены в [3]. Распределение плотности заряда в резком, несимметричном п-р-переходе показано на рис. 2.

Плотность заряда $\rho(x)$ нормирована на значение N_D в п-области и на значение $-N_A$ в р-области для сопоставления структур с различным уровнем легирования на одном графике. В области, обедненной носителями заряда, $n, p \ll N_D$, $n, p \ll N_A$, поэтому

$$\frac{\rho(x)}{N_D} \approx 1, \quad \frac{|\rho(x)|}{N_A} \approx 1. \quad (17)$$

В квазинейтральной области (вне ОПЗ) $\rho(x) \approx 0$ при $x \leq -d_n$, $d_p \leq x$.

В случае резкого несимметричного п-р-перехода возникают новые закономерности в распределении плотности заряда (рис. 2). В ОПЗ появляется область, обогащенная носителями заряда (электронами), в которой

$$n \geq N_A, \quad \frac{|\rho(x)|}{N_A} \geq 2.$$

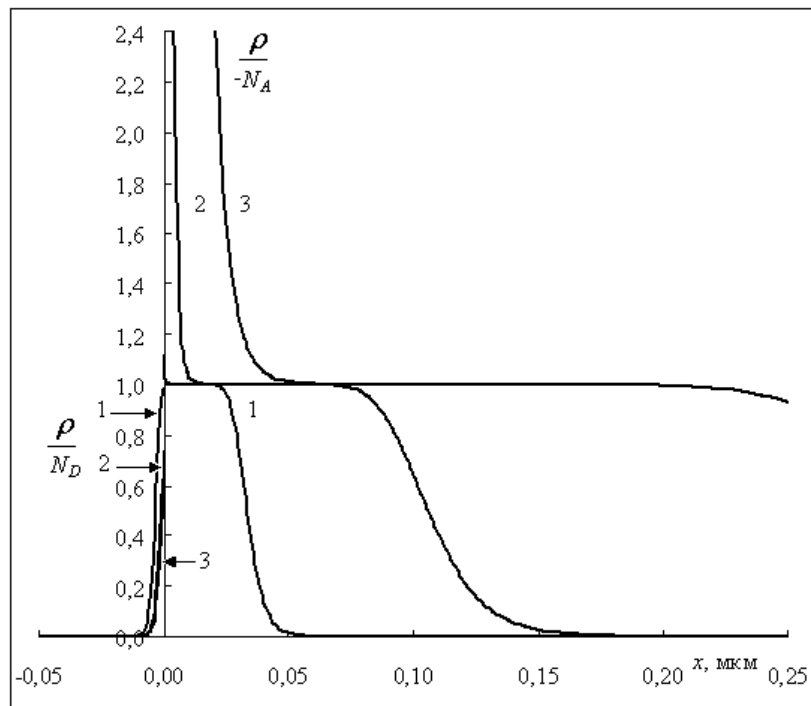


Рис.2. Изменение приведенной плотности заряда в ОПЗ резкого, несимметричного п-р-перехода: 1 – $N_D = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $N_A = 10^{18} \text{ см}^{-3}$,

2 – $N_D = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, 3 – $N_D = 10^{19} \text{ см}^{-3}$, $N_A = 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

На границе $x = +0$ получены следующие значения отношения $\frac{\rho(+0)}{-N_A}$: 1,12 при $N_A = 10^{18} \text{ см}^{-3}$; 26,9 при $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$; 357 при $N_A = 10^{16} \text{ см}^{-3}$; для каждого из этих значений N_A размер обогащенной области d_r , соответственно, равен 0; 5 нм; 23 нм.

При $d_r < x < d_p$ расположена область, обедненная носителями заряда. Концентрация дырок возрастает при $x \rightarrow d_p$ (область плавного изменения плотности заряда), за которой следует квазинейтральная область при $d_p \leq x$.

В обедненной области при $x < 0$ концентрация электронов $n < N_D$, но не является пренебрежимо малой, что влияет на размер ОПЗ.

Часть ОПЗ с низкой проводимостью, в которой $n, p \ll N_A$, существует только в слое с меньшей концентрацией примеси $N_A \ll N_D$.

Таким образом, ОПЗ резкого, сильно несимметричного п-р-перехода, как и мелкого, несимметричного, диффузионного п-р-перехода [9, 10], содержит следующие части: 1 – высоко легированную область, в которой основные носители заряда частично компенсируют заряд ионизованных примесей; 2 – низко легированную область, противоположного типа проводимости по отношению к первой, обогащенную носителями заряда, увеличивающими заряд ионизованных примесей; 3 – низко легированную область, обедненную электронами и дырками, содержащую плотность заряда, созданную ионизованными примесями.

Список литературы

1. Shockley W. The theory of p-n junctions in semiconductors and p-n junction transistors / W. Shockley // Bell Syst. Tech. J. — 1949. — V.28. — N 7. P. 435 – 439.
2. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. Кн. 1 / С. Зи. — М.: Мир, 1984. — 456 с.
3. Pulfrey D.L. Understanding Modern Transistors and Diodes / D.L. Pulfrey. — Cambridge University Press, 2010. — 335 p.
4. Redfield D. Revised model of asymmetric p-n junctions / D. Redfield // Applied Physics Letters. — 1979. — V.35. — July 15. P. 182 – 184.
5. Pfitzner A. Numerical solution of the one - dimensional phenomenological transport equation set in semiconductors / A. Pfitzner // Electron Technology. — 1977. — V.10. — N 4. P. 3 – 21.
6. Шевченко А.И. Численно-аналитический подход и рабочие характеристики фронтальных р-п переходов / А.И. Шевченко, А.С. Мазин, Л.Д. Писаренко // ЭНЕРГО-СБЕРЕЖЕНИЕ • ЭНЕРГЕТИКА • ЭНЕРГОАУДИТ. Спец. выпуск.. — 2013. — Т.1. — № 8 (114). С. 182 – 186.
7. Богатов Н.М. Определение времени захвата неравновесного поверхностного заряда в полупроводниковых структурах по спаду тока короткого замыкания / Н.М. Богатов, М.П. Матвеекин, Н.В. Першин и др. // Известия высших учебных заведений. Северо-кавказский регион. Естественные науки. — 2008. — № 6. С. 39–41.
8. Богатов Н.М. Определение времени захвата неравновесного поверхностного заряда в полупроводниковых структурах по спаду фотоэдс / Н.М. Богатов, М.П. Матвеекин, Н.В. Першин и др. // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. — 2008. — № 2. С. 57–61.
9. Богатов Н.М. Анализ влияния легирующих примесей на эффективность солнечных элементов из монокристаллического кремния / Н.М. Богатов // Электронная техника. Сер. 6. Материалы. — 1991. — В. 6(260). С. 48 – 53.
10. Богатов Н.М. Анализ влияния рекомбинации в области пространственного заряда на вольт-амперную характеристику кремниевых солнечных элементов / Н.М. Богатов // Гелиотехника. — 1990. — № 6. С. 49 – 53.

ОБ ОДНОМ ЧАСТНОМ РЕШЕНИИ ЛИНЕАРИЗОВАННЫХ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА В ПРОСТРАНСТВЕННОМ СЛУЧАЕ

Н.М.Бодунов

Казанский национальный исследовательский технический
университет им. А.Н. Туполева-КАИ, bodunov_nm@mail.ru

Исследование различных течений вязкой жидкости на основе решения полной системы уравнений Навье-Стокса является важной проблемой в области вычислительной гидромеханики [1, 2]. Новые аналитические решения этих уравнений способствуют лучшему пониманию качественных особенностей течений жидкости, а также служат для тестирования соответствующих численных методов. Материалы, изложенные ниже, являются продолжением работы [3]. Выпишем линеаризованные уравнения Навье-Стокса в безразмерном виде, которые описывают медленное стационарное течение (число $Re \ll 1$) несжимаемой вязкой жидкости в замкнутой ограниченной области $G = \{x, y, z : l_1 \leq x \leq l_2, b_1 \leq y \leq b_2, h_1 \leq z \leq h_2\}$ [4, 5]:

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{x}} = \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{z}^2}; \quad \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{y}} = \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{z}^2}; \quad \frac{\partial \bar{P}}{\partial \bar{z}} = \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial \bar{z}^2}; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{x}} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{y}} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial \bar{z}} = 0, \quad (2)$$

где $\bar{u} = \frac{u}{u_*}, \bar{v} = \frac{v}{u_*}, \bar{w} = \frac{w}{u_*}, \bar{x} = \frac{xu_*}{v}, \bar{y} = \frac{yu_*}{v}, \bar{z} = \frac{zu_*}{v}, \bar{P} = \frac{P}{\rho u_*^2}$, v – кинематический ко-

эффициент вязкости, ρ – плотность среды. В дальнейшем черточки над безразмерными величинами в выражениях (1), (2) для упрощения опускаем.

Решение системы уравнений (1), (2) должно удовлетворять граничным условиям, например, на неподвижной непроницаемой поверхности используется условие прилипания: $\bar{u}|_\Gamma = \bar{v}|_\Gamma = \bar{w}|_\Gamma = 0$. Для тождественного удовлетворения уравнению неразрывности (2) введем функцию $\Psi(x, y, z)$, связанную с проекциями скоростей зависимостями

$$u = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial z}, \quad v = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial z}, \quad w = -2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y}. \quad (3)$$

Исключим давление из уравнений (1). Для этого продифференцируем первое уравнение системы (1) по $\frac{\partial^2}{\partial y \partial z}$, второе – $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial z}$, третье – $-2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x \partial y}$. Далее складывая эти уравнения, с учетом (3), получим

$$4 \frac{\partial^6 \Psi}{\partial x^4 \partial y^2} + \frac{\partial^6 \Psi}{\partial x^4 \partial z^2} + 4 \frac{\partial^6 \Psi}{\partial x^2 \partial y^4} + \frac{\partial^6 \Psi}{\partial x^2 \partial z^4} + 6 \frac{\partial^6 \Psi}{\partial x^2 \partial y^2 \partial z^2} + \frac{\partial^6 \Psi}{\partial y^4 \partial z^2} + \frac{\partial^6 \Psi}{\partial y^2 \partial z^4} = 0. \quad (4)$$

Используя результаты работы [4], запишем решение уравнения (4):

$$\begin{aligned} \Psi(x, y, z) = & A_0 + A_1(c_{01}x + c_{11}y) + A_2\{c_{02}[x^2 + (y+z)^2] + c_{12}x(y+z)\} + \\ & + A_3\{c_{03}[x^3 + (y+z)^3] + c_{13}[x^2(y+z) + x(y+z)^2]\} + \\ & + A_4\{c_{04}[x^4 + (y+z)^4] + c_{14}x^2(y+z)^2 + c_{24}[x(y+z)^3 + x^3(y+z)]\} + \\ & + A_5[c_{05}x^5 + c_{15}x^4(y+z) + c_{25}x^3(y+z)^2 + c_{35}x^2(y+z)^3 + c_{45}x(y+z)^4 + \\ & + c_{55}(y+z)^5] + A_6\left\{c_{06}x^6 + c_{16}x^5(y+z) + c_{26}\left[x^4(y+z)^2 - \frac{(y+z)^6}{6}\right] + \right. \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
& + A_7 \left\{ c_{07} x^7 + c_{17} x^6 (y+z) + c_{27} \left[x^5 (y+z)^2 - \frac{5x(y+z)^6}{6} \right] + \right. \\
& + c_{37} \left[x^4 (y+z)^3 - \frac{(y+z)^7}{14} \right] + c_{47} \left[x^3 (y+z)^4 - \frac{11x(y+z)^6}{10} \right] + \\
& \left. + c_{57} \left[x^2 (y+z)^5 - \frac{11(y+z)^7}{42} \right] \right\} + \dots + A_N \Psi_N(c_{0N}, c_{1N}, \dots, c_{5N}, x, y, z),
\end{aligned}$$

где A_N – произвольные коэффициенты, подлежащие определению из граничных условий; $\Psi_N(c_{0N}, c_{1N}, \dots, c_{5N}, x, y, z)$ – полиномиальные базисные функции; $c_{0N}, c_{1N}, \dots, c_{5N}$ – произвольные внутренние параметры. Далее, используя (3), получим выражения для компонентов вектора скорости:

$$\begin{aligned}
u(x, y, z) = & 2A_2 c_{02} + A_3 [6c_{03}(y+z) + 2c_{13}x] + \\
& + A_4 [12c_{04}(y+z)^2 + 2c_{14}x^2 + 6c_{24}x(y+z)] + \\
& + A_5 [2c_{25}x^3 + 6c_{35}x^2(y+z) + 12c_{45}x(y+z)^2 + 20c_{55}(y+z)^3] + \\
& + A_6 \{c_{26}[2x^4 - 5(y+z)^4] + 6c_{36}x^3(y+z) + \\
& + c_{46}[12x^2(y+z)^2 - 11(y+z)^4] + 20c_{56}x(y+z)^3\} + A_7 \{c_{27}[2x^5 - 25x(y+z)^4] + \\
& + c_{37}[6x^4(y+z) - 3(y+z)^5] + c_{47}[12x^3(y+z)^2 - 33x(y+z)^4] + \\
& + c_{57}[20x^2(y+z)^3 - 11(y+z)^5]\} + \dots + A_N \varphi_u^{(N)}(x, y, z), \tag{6}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
v(x, y, z) = & A_2 c_{12} + 2A_3 c_{13}(x+y+z) + A_4 \{4c_{14}x(y+z) + 3c_{24}[x^2 + (y+z)^2]\} + \\
& + A_5 [4c_{15}x^3 + 6c_{25}x^2(y+z) + 6c_{35}x(y+z)^2 + 4c_{45}(y+z)^3] + \\
& + A_6 [5c_{16}x^4 + 8c_{26}x^3(y+z) + 9c_{36}x^2(y+z)^2 + 8c_{46}x(y+z)^3 + \\
& + 5c_{56}(y+z)^4] + A_7 \{6c_{17}x^5 + 5c_{27}[2x^4(y+z) - (y+z)^5] + \\
& + 12c_{37}x^3(y+z)^2 + c_{47}[12x^2(y+z)^3 - \frac{33}{5}(y+z)^5] + \\
& + 10c_{57}x(y+z)^4\} + \dots + A_N \varphi_v^{(N)}(x, y, z), \tag{7}
\end{aligned}$$

$$w(x, y, z) = -2v(x, y, z). \tag{8}$$

Применение функции (3) вносит существенное ограничение (см. выражение (8)). Чтобы его устранить, подставим выражения (6) и (7) в уравнение неразрывности (2) и после интегрирования получим

$$\begin{aligned}
w(x, y, z) = & -4A_3 c_{13} z - 4A_4 \left[2c_{14} xz + 3c_{24} z \left(y + \frac{z}{2} \right) \right] - 12A_5 \times \\
& \times \left[c_{25} x^2 z + 2c_{35} xz \left(y + \frac{z}{2} \right) + 2c_{45} z \left(y^2 + yz + \frac{z^2}{3} \right) \right] - 4A_6 \{ 4c_{26} x^3 z + \\
& + 9c_{36} x^2 z \left(y + \frac{z}{2} \right) + 12c_{46} xz \left(y^2 + yz + \frac{z^2}{3} \right) + 10c_{56} z \left(y^3 + \frac{3y^2 z}{2} + z^2 y + \frac{z^3}{4} \right) \} - \tag{9} \\
& - 2A_7 \{ 5c_{27} z \left[2x^4 - 5 \left(y^4 + 2y^3 z + 2y^2 z^2 + yz^3 + \frac{z^4}{5} \right) \right] + 24c_{37} x^3 z \left(y + \frac{z}{2} \right) + \\
& + 3c_{47} z \left[12x^2 \left(y^2 + yz + \frac{z^2}{3} \right) - 11 \left(y^4 + 2y^3 z + 2y^2 z^2 + yz^3 + \frac{z^4}{5} \right) \right] +
\end{aligned}$$

$$+ 40c_{57}xz \left(y^3 + \frac{3y^2z}{2} + yz^2 + \frac{z^3}{4} \right) \Bigg\} + \dots + A_N \varphi_w^{(N)}(x, y, z) + f_1(x, y),$$

где $f_1(x, y)$ – функция интегрирования.

Отметим следующую особенность решений (6), (7) и (9):

$$\Delta u \neq 0; \Delta v \neq 0; \Delta w \neq 0, \quad (10)$$

где $\Delta(\dots) = \frac{\partial^2(\dots)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2(\dots)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2(\dots)}{\partial z^2}$ – оператор Лапласа. Левые части выражений (10)

будут равны нулю только при определенном сочетании коэффициентов $c_{0i}, c_{1i}, \dots, c_{5i}$.

Основная трудность интегрирования системы (1), (2) связана с определением поля давления, так как нет явного уравнения для его определения. Но отдельные подходы дают возможность обойти эту проблему. Рассмотрим некоторые из них.

В случае задания переменного давления P в какой-либо точке в рассматриваемой области, значение давления в любой другой точке получим путем суммирования приращений

$$\delta P = \frac{\partial P}{\partial x} \delta x + \frac{\partial P}{\partial y} \delta y + \frac{\partial P}{\partial z} \delta z \quad (11)$$

вдоль любой кривой, соединяющей эти точки. Таким образом, если заданы выражения (6), (7) и (9), то можно вычислить давление в любой точке исследуемой области. Давление можно вычислить и независимым интегрированием выражений (1) по координатам x, y и z , но при этом различие в величинах давления, вычисленного по трем направлениям не должно превышать заданной погрешности вычисления.

Другой подход в отыскании давления заключается в следующем. Подставив выражения (6), (7) и (9) в (1), найдем

$$\frac{\partial P_1}{\partial x} = F_1(u, v, w), \quad \frac{\partial P_2}{\partial y} = F_2(u, v, w), \quad \frac{\partial P_3}{\partial z} = F_3(u, v, w). \quad (12)$$

Проинтегрировав выражения (12), получим

$$P_1 = \int F_1(u, v, w) dx + \Psi_1(y, z) + C; \quad -P_2 = \int F_2(u, v, w) dy + \Psi_2(x, z) + C; \\ P_3 = \int F_3(u, v, w) dz + \Psi_3(x, y) + C; \quad (13)$$

где $\psi_1(y, z), \psi_2(x, z), \psi_3(x, y)$ – функции интегрирования; C – константа интегрирования. За счет соответствующего выбора функций $\psi_1(y, z), \psi_2(x, z)$ и $\psi_3(x, y)$ в выражениях (13) найдем однозначное выражение для давления P . Этот алгоритм был ранее реализован для плоского случая с учетом инерционных членов, как для стационарного, так и для нестационарного течений [5–8].

Распишем последний путь. Продифференцировав первое уравнение системы (1) по $\frac{\partial}{\partial x}$, второе – $\frac{\partial}{\partial y}$, третье – $\frac{\partial}{\partial z}$ и складывая их, получим

$$\Delta P = \frac{\partial \Delta u}{\partial x} + \frac{\partial \Delta v}{\partial y} + \frac{\partial \Delta w}{\partial z}. \quad (14)$$

Подставив (6), (7) и (9) в выражение (14), получим, что его правая часть равна тождественно нулю, т.е. имеем уравнение Лапласа

$$\Delta P = 0. \quad (15)$$

Выбираем решение уравнения (15) в следующем виде [4]:

$$P(x, y, z) = A_4[a_{04}x + a_{14}(y + z)] + A_5[a_{05}(x^2 - y^2) + a_{15}xy + \\ + a_{25}(x^2 - z^2) + a_{35}xz] + A_6[a_{06}(x^3 - 3xy^2) + a_{16}\left(x^2y - \frac{y^3}{3}\right) + \quad (16)$$

$$+ a_{26}(x^3 - 3xz^2) + a_{36}\left(x^2z - \frac{z^3}{3}\right) + \dots,$$

где $a_{0i}, a_{1i}, a_{2i}, a_{3i}$ – внутренние параметры. Конкретные выражения для компонентов вектора скорости и давления, которые тождественно удовлетворяют исходной системе уравнений (1), (2) в области G при любых N и A_α , найдем соответствующим подбором внутренних параметров $c_{0\alpha}, c_{1\alpha}, \dots, c_{5\alpha}, a_{0i}, a_{1i}, a_{2i}, a_{3i}$ ($\alpha = \overline{1, N}$). Подставив выражения (6), (7), (9) и (16) в систему уравнений (1) и, приравняв коэффициенты при одинаковых степенях x, y и z , получим линейные зависимости относительно внутренних параметров. В конечном итоге имеем:

$$\begin{aligned} u(x, y, z) &= 2A_2c_{02} + A_3[6c_{03}(y+z) + 2c_{13}x] + \\ &+ A_4[12c_{04}(y+z)^2 + 2c_{14}x^2 + 6c_{24}x(y+z)] + \frac{3}{2}A_5c_{15}[(y+z)^3 - 2x^2(y+z)] + \dots, \\ v(x, y, z) &= A_2c_{12} + 2A_3c_{13}(x+y+z) + A_4\{4c_{14}x(y+z) + 3c_{24}[x^2 + (y+z)^2]\} + \\ &+ A_5c_{15}[4x^3 - 3x(y+z)^2] + \dots, \\ w(x, y, z) &= -4A_3c_{13}z - 4A_4\left[2c_{14}xz + 3c_{24}z\left(y + \frac{z}{2}\right)\right] + 12A_5c_{15}xz\left(y + \frac{z}{2}\right) + \dots, \\ P(x, y, z) &= C + 4A_4\left[(12c_{04} + c_{14})x + \frac{9}{2}c_{24}y - 3c_{24}z\right] + 12A_5c_{15}x(y+z) + \dots \end{aligned} \quad (17)$$

Правильность решения (17) можно проверить его подстановкой в уравнения (1). Данный подход был ранее использован при решении задачи теории упругости для трансверсально-изотропной среды [9].

Входящие в решения неизвестные коэффициенты A_α и константа C определяются из соответствующих граничных условий методом коллокаций или методом взвешенных невязок [4, 10] при решении конкретной прикладной задачи. Количество коэффициентов A_α зависит от выбора метода решения граничной задачи и оценки точности приближенного решения. С общих позиций внутренние параметры в базисных функциях выбираются из следующих соображений. Например, параметры подбираются так, чтобы исключить все особенности, связанные с решением разрешающей системы алгебраических уравнений; из условия ортогонализации и нормировки на границе Γ (решение (17) тождественно удовлетворяется в области); из экспериментальных данных [4, 5, 8]. В качестве примера рассмотрим течение несжимаемой вязкой жидкости под действием постоянного продольного перепада давления между двумя параллельными стенками, одна из которых (нижняя) покоится, а другая (верхняя) движется с постоянной скоростью в своей плоскости (течение Куэтта) [1]. Воспользуемся решением, приведенным в работе [3] при соответствующем выборе внутренних параметров:

$$\begin{aligned} u(x, y) &= -A_2x + 2A_3xy + A_4\left(xy^2 - \frac{x^3}{3}\right) + 4A_5(x^3y - xy^3) - \frac{\delta P}{2}x^2, \\ v(x, y) &= A_2y + A_3(x^2 - y^2) - A_4\left(\frac{y^3}{3} - x^2y\right) + A_5(x^4 + y^4 - 6x^2y^2) + \delta Pxy, \\ P(x, y) &= -\delta Px. \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь δP – безразмерный перепад давления ($\delta P = \partial P / \partial x$). При данных условиях поперечный перепад давления отсутствует ($\partial P / \partial y = 0$).

Решение рассматриваем в произвольном сечении, например, $x_1 = 4$. Неизвестные коэффициенты A_2, A_3, A_4 (при $A_5 = 0$) определяем методом коллокаций из граничных условий: $u(x_1, y)|_{y=y_1} = 0, v(x_1, y)|_{y=y_1} = 0, u(x_1, y)|_{y=y_2} = 1$ ($y_1 = 2, y_2 = 4$ – координаты нижней и верхней стенок). Результаты сравнения решения (18) с классическим решением Куэтта $u(y) = \frac{\delta P}{2} [y(y - (y_1 + y_2)) + y_1 y_2] + \frac{y - y_1}{y_2 - y_1}$ приведено на рис.1 и рис.2. Для случая, изображенном на рис.1 имеем: $A_2 = 10.55, A_3 = 1.03, A_4 = -0.323$; для случая, изображенном на рис.2: $A_2 = -11.05, A_3 = -1.13, A_4 = 0.398$. Если выбрать другое сечение, то решая ту же краевую задачу, найдем другие значения искомых коэффициентов A_2, A_3, A_4 . Как показывают расчеты, используемое решение мало отличается от классического решения в разных сечениях. Ограничение решения: приемлемая точность обеспечивается только при условии $x > 0$. Некоторое отличие результатов вычислений объясняется тем, что решение (18) получено для плоскопараллельного течения. Оно

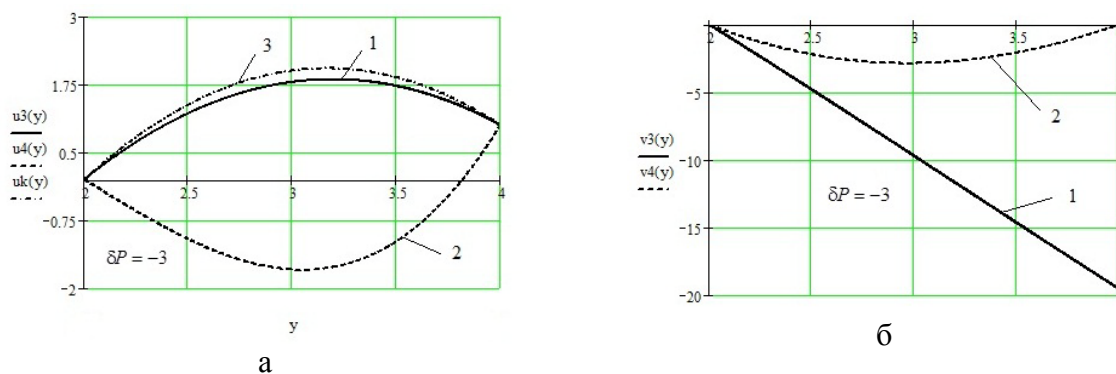


Рис.1 Типовой профиль продольной (а) и поперечной (б) компоненты скорости при падении давления в направлении движения верхней стенки: 1 – решение (18) при $A_5 = 0$, 2 – решение (18) с учетом дополнительного граничного условия, 3 – классическое решение Куэтта

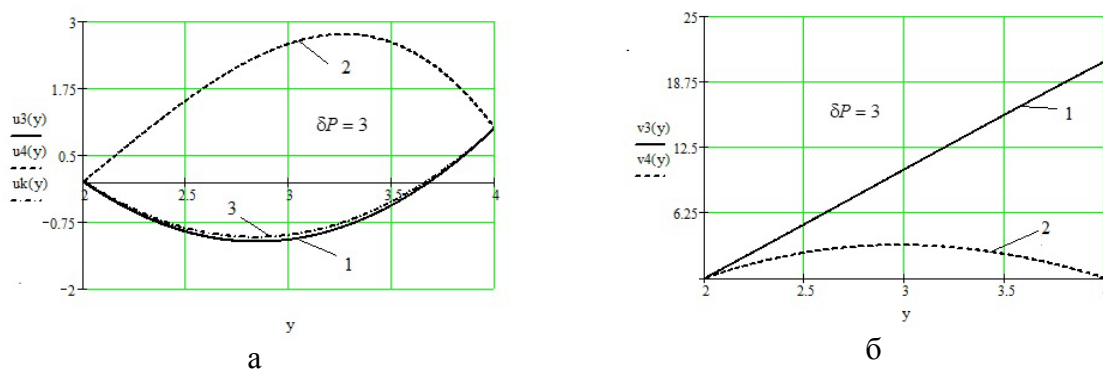


Рис.2 Типовой профиль продольной (а) и поперечной (б) компоненты скорости при повышении давления в направлении движения верхней стенки: 1 – решение (18) при $A_5 = 0$, 2 – решение (18) с учетом дополнительного граничного условия, 3 – классическое решение Куэтта.

тождественно удовлетворяет уравнению неразрывности. Классическое решение Куэтта описывает одномерное течение вязкой жидкости.

Решение (18) позволяет уточнить постановку данной задачи, если использовать дополнительное граничное условие на движущей стенке – условие непроницаемости: $v(x, y)|_{y=y_2} = 0$. Результаты вычислений показаны на рис.1 и рис.2. Для случая, изображенном на рис.1, имеем: $A_2 = 11.99, A_3 = 2.217, A_4 = -1.078, A_5 = -0.045$; для случая, изображенном на рис.2: $A_2 = -12.576, A_3 = -2.389, A_4 = 1.2, A_5 = 0.048$. Использование дополнительного граничного условия на подвижной стенке существенно меняет характер решения задачи Куэтта.

Отметим, что задача может быть решена с учетом инерционных членов (т.е. при высоких числах Рейнольдса), если использовать методику расчета, приведенную в работах [5 – 8]. В этом случае искомые параметры определяются из решения нелинейной системы алгебраических уравнений.

Список литературы

1. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя / Г. Шлихтинг. – М.: Наука. 1974. – 711 с.
2. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа / Л.Г. Лойцянский. – М.: Наука. – 1978. – 736 с.
3. Бодунов Н.М. Технология определения решений, описывающих стационарное течение вязкой несжимаемой жидкости в плоском случае / Н.М.Бодунов, Г.В.Дружинин // Моделирование неравновесных систем: Материалы XVIII Всероссийского семинара / Ред. М.Г.Садовский. – Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. – 2015. С.8 – 12.
4. Дружинин Г.В. Базисные функции в приближенных решениях краевых задач / Г.В.Дружинин, И.М. Закиров, Н.М. Бодунов. – Казань: Изд-во Фэн. – 2000. – 376 с.
5. Дружинин Г.В. Решение прикладных задач авиационной техники на основе симметрии дифференциальных уравнений в частных производных / Г.В. Дружинин, Н.М.Бодунов. – Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та. – 2012. – 288 с.
6. Дружинин Г.В. Об одном аналитическом решении уравнений Навье-Стокса в плоском случае / Г.В.Дружинин, Н.М.Бодунов // Вестник КГТУ им. А.Н. Туполева. – 2013. – № 1. С.94 – 98.
7. Дружинин Г.В. Об одном аналитическом решении уравнений Навье-Стокса-Бринкмана применительно к методам трансферного формования / Г.В.Дружинин, Н.М.Бодунов, П.В.Бреховских // Известия вузов. Авиационная техника. – 2015. – №4. С.105 – 110.
8. Бодунов Н.М. Моделирование в задачах производства летательных аппаратов / Н.М.Бодунов, Г.В.Дружинин. Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та. – 2015. – 328 с.
9. Бодунов Н.М. Об одном алгоритме решения трехмерной задачи теории упругости для трансверсально-изотропной среды / Н.М.Бодунов, Г.В.Дружинин, И.М.Закиров // Известия вузов. Авиационная техника. – 2007. – № 1. С.18 – 21.
10. Бодунов Н.М. Краевые задачи теории пластичности и методы их решения / Н.М.Бодунов, Г.В.Дружинин. Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та. – 2011. – 272 с.

НАХОЖДЕНИЕ НАИБОЛЕЕ ЗНАЧИМЫХ ПЕРЕМЕННЫХ В ЗАДАЧАХ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ПО НАБЛЮДЕНИЯМ¹

Е.А.Вейсов¹, В.Н.Кириченко¹, Е.Д.Михов², Е.Д. Михова³

¹Сибирский федеральный университет,

Военно-Инженерный Институт, eveisov@sfu-kras.ru

²Сибирский федеральный университет,

Институт Космических и Информационных Технологий, edmihov@mail.ru

³ Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М. Ф.

Решетнева, soldatova90@mail.ru

В задачах восстановления функции многих переменных, по результатам наблюдений важная роль принадлежит выделению наиболее информативных, существенных переменных. От их рационального использования часто зависит и точность восстановления многих переменных по соответствующим обучающим выборкам.

В качестве примера можно указать такую задачу как разрешение неоднозначности фазовых измерений. В настоящее время существует множество способов решения данной задачи, с использованием различных входных переменных. Обилие входных переменных, усложняет построение решающего правила, исследователь старается использовать всю доступную информацию о сигнале, предполагая, что обилие информации – поможет более точно решить данную задачу. Но, к сожалению, некоторые переменные, могут быть «неинформативными», мешающими в получении результата. Как показывает практика[1], исключение из процесса построения решающего правила «неинформативных» переменных, увеличивает точность получаемой оценки. Это объясняется тем, что построение решающего правила для меньшего количества переменных – более простая задача.

Учитывая вышесказанное можно утверждать, что задача оценки степени информативности переменных является, безусловно, актуальной.

Информативность переменных

Мы интерпретируем термин «информативность переменных» как наиболее значимо влияющих на значение выходной переменной того или иного объекта, процесса. Те входные переменные, значение которых оказывает наиболее слабое влияние на выходную переменную, называем - менее информативными, а те, значения которых имеют большее влияние на выходную переменную - более информативными. Безусловно, степень информативности - понятие относительное и его определение - непростая задача.

Алгоритм оценки информативности признаков на основе оптимизации параметра размытости ядра

Перед использованием алгоритма оценки информативности признаков на основе оптимизации параметра размытости ядра, необходимо провести центрирование и нормирование элементов вектора **u** из обучающей выборки.

Непараметрическая оценка функции регрессии по наблюдениям имеет вид (1):

$$x_s(\mathbf{u}) = \frac{\sum_{i=1}^s x_i \prod_{j=1}^n \Phi\left(\frac{u_j - u_{ji}}{c_{sj}}\right)}{\sum_{i=1}^s \prod_{j=1}^n \Phi\left(\frac{u_j - u_{ji}}{c_{sj}}\right)}, \quad (1)$$

¹ Работа была поддержана министерством образования. Соглашение: 14.578.21.0021.
Уникальный идентификатор: RFMEFI57814X0021.

где $x_s(\mathbf{u})$ – это непараметрическая оценка функции $x(\mathbf{u})$ в точке $\mathbf{u}$.

Как видно из (1) с каждой компонентой вектора $\mathbf{u}$ мы связали соответствующую компоненту вектора $\mathbf{c}_s$. Далее, на основании имеющийся обучающей выборки необходимо найти оптимальные $c_{s1}^*, c_{s2}^* \dots c_{sn}^*$ из условия минимума (2)

$$\sigma(\mathbf{c}_s) = \sqrt{\frac{1}{s} \sum_{k=1}^s (x_s(\mathbf{u}_k, \mathbf{c}_s) - x_k)^2} \rightarrow \min, \quad (2)$$

где, с учетом (1) $k \neq i$.

После нахождения вектора $\mathbf{c}_s^*$, необходимо произвести сортировку элементов вектора $\mathbf{c}_s^*$ от наименьшего по модулю к наибольшему по модулю. Таким образом, получится цепочка неравенств, например, цепочка, может иметь следующий вид: $|c_{s2}^*| < |c_{s9}^*| < |c_{s1}^*| \dots < |c_{s4}^*| < |c_{s3}^*|$, тот компонент вектора $\mathbf{u}$ у которого соответствующий элемент вектора $\mathbf{c}_s^*$ оказался наибольшим, является кандидатом на исключение из непараметрической оценки, как наименее информативный.

Вычислительный эксперимент

Проведем вычислительные эксперименты по нахождению наиболее информативных переменных в задаче восстановления функции по наблюдениям.

У изучаемого объекта будет 10 входных переменных и 1 выходная. Воздействие помехи равно 5%. Размер выборки равен 1000. Далее используем приведенные выше правила поиска наиболее информативных признаков на основе оптимизации вектора $\mathbf{c}_s$. Оптимизация производится при помощи алгоритма Неддлера-Мидда [2] (деформируемого многогранника).

В качестве уравнения, описывающего объект исследования, примем следующее (3):

$$x(\mathbf{u}) = \alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2 + \alpha_3 u_3 + \alpha_4 u_4 + \alpha_5 u_5 + \alpha_6 u_6 + \alpha_7 u_7 + \alpha_8 u_8 + \alpha_9 u_9 + \alpha_{10} u_{10}, \quad (3)$$

где компоненты вектора $\mathbf{a}$ будут изменяться в процессе эксперимента.

Сначала проведем эксперимент для следующего конкретного вида этой зависимости, приняв численное значение переменных сравнительно равноценными. Таким образом, мы априори закладываем примерно равноценную зависимость x от всех компонент вектора $\mathbf{u}$.

$$x(\mathbf{u}) = 3.7u_1 + 3.65u_2 + 3.6u_3 + 3.63u_4 + 3.63u_5 + 3.54u_6 + 3.59u_7 + 3.75u_8 + 3.57u_9 + 3.7u_{10} \quad (4)$$

Как видно из (4), можно заключить, что все переменные имеют одинаковую степень информативности.

Стоит отметить, что формула, описывающая объект неизвестна исследователю, она используется только для генерации выборки.

Результаты расчетов представлены в таблице 1:

Таблица 1

Такт 1, ошибка моделирования: 5.2%			Такт 2, ошибка моделирования: 6.7%		
Номер входной переменной	Компоненты вектора $\mathbf{a}$	c_s	Номер входной переменной	Компоненты вектора $\mathbf{a}$	c_s
1	3.7	0.81	-	-	-
2	3.65	0.66	2	3.65	0.94

3	3.6	0.71	3	3.6	0.82
4	3.63	0.78	4	3.63	0.61
5	3.63	0.66	5	3.63	1.61
6	3.54	0.73	6	3.54	0.68
7	3.59	0.76	7	3.59	0.83
8	3.75	0.76	8	3.75	0.68
9	3.57	0.65	9	3.57	0.65
10	3.7	0.51	10	3.7	0.66

В таблице 1 символ «-» обозначает отсутствие компонент вектора $\mathbf{u}$ при описании исследуемого процесса. Как видно на таблице 1, на первом такте не было таких переменных, у которых соответствующий элемент вектора $\mathbf{c}_s$ существенно отличался по сравнению с другими. В дальнейшем была исключена переменная u_1 , так как у данной переменной наибольший по модулю соответствующий элемент вектора $\mathbf{c}_s$. После извлечения переменной ошибка моделирования увеличилась, что свидетельствует о том, что все переменные — информативные.

Следующим экспериментом будет случай, при котором на выходную переменную действует две мало информативных переменных.

Объект описывается формулой (5):

$$x(\mathbf{u}) = 3.62u_1 + 3.69u_2 + 3.79u_3 + 0.75u_4 + 3.73u_5 + 3.61u_6 + 3.79u_7 + 3.78u_8 + 0.62u_9 + 3.61u_{10} \quad (5)$$

Исходя из формулы (5), можно заключить, что переменные u_4 и u_9 — мало информативные. Следовательно, по сформулированному выше правилу они должны быть исключены, что и происходит.

Результаты вычислений представлены в таблице 2

Таблица 2

Такт 1, ошибка моделирования: 5.5%			Такт 2, ошибка моделирования: 5.0%		
Номер входной переменной	Компоненты вектора $\mathbf{a}$	$\mathbf{c}_s$	Номер входной переменной	Компоненты вектора $\mathbf{a}$	$\mathbf{c}_s$
1	3.62	0.59	1	3.62	0.83
2	3.69	0.55	2	3.69	0.91
3	3.79	0.53	3	3.79	0.43
4	0.75	1.26	4	0.75	1.23
5	3.73	0.87	5	3.73	0.90
6	3.61	0.56	6	3.61	0.55
7	3.79	0.70	7	3.79	0.53
8	3.78	0.69	8	3.78	0.87
9	0.62	2.72	-	-	-
10	3.61	0.51	10	3.61	0.75

Такт 3, ошибка моделирования: 4.3%			Такт 4, ошибка моделирования: 6.1%		
Номер входной переменной	Компоненты вектора α	c_s	Номер входной переменной	Компоненты вектора α	c_s
1	3.62	0.70	-	-	-
2	3.69	0.64	2	3.69	0.76
3	3.79	0.58	3	3.79	0.48
-	-	-	-	-	-
5	3.73	0.63	5	3.73	0.69
6	3.61	0.69	6	3.61	0.67
7	3.79	0.67	7	3.79	0.59
8	3.78	0.65	8	3.78	0.72
-	-	-	-	-	-
10	3.61	0.57	10	3.61	0.58

Как видно из таблицы 2, неинформативные признаки были верно определены на первых двух тактах, о чем свидетельствует уменьшение ошибки моделирования. Когда была извлечена переменная u_1 , на третьем такте, это привело к увеличению ошибки моделирования, что свидетельствует об информативности переменной u_1 .

В качестве следующего эксперимента рассмотрим случай, при котором 2 входные переменные не будут влиять на выходную переменную, иными словами они будут «мешающими» переменными, в смысле построения математической модели.

Объект описывается формулой (6):

$$x(u) = 3.67u_1 + 3.56u_2 + 3.61u_3 + 3.7u_4 + 3.6u_6 + 3.62u_8 + 3.57u_9 + 3.79u_{10} \quad (6)$$

Исходя из формулы (6), можно заключить, что переменные u_5 и u_7 - не влияют на выходную переменную объекта.

Результаты вычислений представлены в таблице 3.

Таблица 3

Такт 1, ошибка моделирования: 5.9%			Такт 2, ошибка моделирования: 5.1%		
Номер входной переменной	Компоненты вектора α	c_s	Номер входной переменной	Компоненты вектора α	c_s
1	3.67	0.88	1	3.67	0.86
2	3.56	0.63	2	3.56	0.64
3	3.61	0.72	3	3.61	0.67
4	3.7	0.52	4	3.7	0.58
5	0	1.16	5	0	1.69
6	3.6	0.54	6	3.6	0.53
7	0	1.23	-	-	-

8	3.62	0.63	8	3.62	0.61
9	3.57	0.53	9	3.57	0.42
10	3.79	0.98	10	3.79	0.47
Такт 3, ошибка моделирования: 4.5%			Такт 4, ошибка моделирования: 6.7%		
Номер входной переменной	Компоненты вектора α	c_s	Номер входной переменной	Компоненты вектора α	c_s
1	3.67	0.71	1	3.67	1.08
2	3.56	0.60	2	3.56	1.86
3	3.61	0.77	3	3.61	0.56
4	3.7	0.60	4	3.7	0.43
-	-	-	-	-	-
6	3.6	1.58	8	3.62	0.60
-	-	-	-	-	-
8	3.62	0.58	-	-	-
9	3.57	0.48	9	3.57	0.55
10	3.79	0.58	10	3.79	0.61

Результат нахождения информативных признаков, продемонстрированный в таблице 3 похож, на результат, продемонстрированный в таблице 2, это значит, что неинформативные переменные также могут мешать при построении математической модели.

Теперь используем модифицированный метод нахождения наиболее информативных признаков, на основе оптимизации вектора c_s

Модификация состоит в том, чтобы назначить один элемент вектора c_s не для каждой отдельной входной переменной, а сразу для группы входных переменных.

Объект описывается формулой (7):

$$x(\mathbf{u}) = 3.57u_1 + 6.66u_2 + 3.72u_3 + 6.72u_4 + 3.64u_5 + 0.61u_6 + 0.71u_7 + 0.58u_8 + 3.78u_9 + 0.6u_{10} \quad (7)$$

Разобьем входные параметры по следующим группам: переменные u_2, u_4 - 1 группа, переменные: u_1, u_3, u_5, u_9 - 2 группа, переменные: u_6, u_7, u_8, u_{10} - 3 группа. Для каждой группы переменных будет назначен отдельный c_s и произведена оптимизация вектора c_s .

Результаты вычислений представлены на таблице 4.

Таблица 4.

Такт 1, ошибка моделирования: 3.7%			Такт 2, ошибка моделирования: 3.6%		
Номер входной переменной	Компоненты вектора α	c_s	Номер входной переменной	Компоненты вектора α	c_s
1	3.57	0.57	1	3.57	0.60
2	6.66	0.37	2	6.66	0.37

3	3.72	0.57	3	3.72	0.60
4	6.72	0.37	4	6.72	0.37
5	3.64	0.57	5	3.64	0.60
6	0.61	3.28	-	-	-
7	0.71	3.28	-	-	-
8	0.58	3.28	-	-	-
9	3.78	0.57	9	3.78	0.60
10	0.6	3.28	-	-	-
Такт 3, ошибка моделирования: 3.7%					
Номер входной переменной	Компоненты вектора α	c_s			
-	-	-			
2	6.66	0.42			
-	-	-			
4	6.72	0.47			
-	-	-			
-	-	-			
-	-	-			
-	-	-			
-	-	-			

Необходимо отметить, что при разбиении переменных на группы, существенно упрощается решение задачи оптимизации. Также при использовании данного метода, исключается сразу группа неинформативных переменных. Особенностью данного метода заключается в самом процессе разбиения переменных на группы. В реальных задачах идентификации подобное разбиение на группы, естественно, тесно связано с априорной информацией и осуществляется соответствующими специалистами.

Таким образом, изложенная выше методика, нахождения информативных признаков в задачах идентификации представляется обнадеживающей, что подтверждается результатами многочисленных вычислительных экспериментов.

Список литературы

1. Загоруйко, Н. Г. Когнитивный анализ данных / Н.Г. Загоруйко. - Новосибирск: Академическое издание "Гео", 2013. - 186 с.
2. Михов Е.Д. Оптимизация коэффициента размытости ядра в непараметрическом моделировании / Е.Д. Михов // Вестник СибГау. – 2015. – Т.16 – № 2. С. 338-342.

МЕТОДЫ ПОВЫШЕНИЯ НАДЕЖНОСТИ В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ²

Е.А. Вейсов, В.Н. Кириченко, Е.Д. Михов
Сибирский федеральный университет
eveisov@sfu-kras.ru

Аннотация

В статье представлены результаты работы над созданием экспериментальной высоконадёжной вычислительной системы с использованием нескольких способов резервирования в комплексе. В процессе практической эксплуатации серийных образцов вычислительных систем авторами статьи выявлялись так называемые "слабые" места - аппаратные, программные элементы, чаще чем остальные выходящие из строя, приводящие к неработоспособности системы в целом. Целью экспериментальной работы являлась задача обойти такие "слабые" элементы или, в крайнем случае использовать возможность резервирования. Особое внимание на этапе исследования уделяется функциональности программной составляющей системы, её способности на определённых уровнях самостоятельно восстанавливать работоспособность элементов вычислительной системы. Одно из важных требований, предъявляемых к данной разработке - избежать провалов в потоке обрабатываемых данных и перерывов в передаче информации конечному потребителю.

Введение

Надёжность вычислительной системы является важнейшим фактором, с которым приходится сталкиваться в процессе разработки и дальнейшего использования программно-технических комплексов (ПТК), выполняющим задачи по обработке информации в течение длительного периода их эксплуатации. Особенно остро стоит вопрос надёжности при выполнении вычислительных задач в случае сопряжения ПТК с периферийным оборудованием, а также без участия обслуживающего персонала. Вышесказанное подтверждает актуальность разработки новых методов обеспечения надёжности.

Как известно существует множество способов резервирования в подобных вычислительных комплексах [1], и эти способы являются составляющими системного и программного резервирования, их подвидов и комбинаций. Одним из таких способов повышения надёжности является резервирование аппаратной составляющей вычислительной системы. Анализ же вариантов программного способа резервирования выходит за рамки этой статьи.

Недостатком системного метода резервирования является удорожание вычислительного комплекса, увеличение габаритов и потребляемой мощности, усложнение обслуживания, увеличение количества отказов аппаратной части.

Многими ведущими фирмами, основным направлением деятельности которых является производство высоконадёжных программно-технических комплексов, используется такой метод резервирования (Compaq, Fujitsu, HP) [2]. Следует отметить, что в целях непрерывности вычислительного процесса и исключения потерь данных в таких комплексах используется единая система хранения данных с одно и максимум двукратным резервированием.

² Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (контракт № 14.578.21.0021 RFMEFI57814X0021)

В данной статье предлагается комбинированный программно-аппаратный метод повышения надёжности. Основным требованием, предъявляемым к предлагаемому варианту построения вычислительной системы, является непрерывность выдаваемых потребителю результатов вычислений, так что особенностью построения рассматриваемого вычислительного является общее резервирование, когда два (или более) серверов работают параллельно. Кроме того, установленное специальное программное обеспечение осуществляет контроль ошибок, на программном уровне выполняя задачи резервирования.

Экспериментальный вычислительный комплекс состоит из нескольких идентичных серверов, объединённых между собой каналами связи по протоколу Ethernet с использованием высоконадёжных коммутаторов. Каждая составляющая предлагаемого вычислительного комплекса имеет дополнительный резервный источник питания. Требования, предъявляемые к аппаратной части серверов, заключаются, в основном, в использовании безвентиляторных системных блоков с пассивным охлаждением и использованием твердотельных накопителей.

Установленная операционная система на серверах на этапе исследований - Astra Linux Common Edition v1.9 "Орёл". Кроме того, установлено специальное программное обеспечение, выполняющее основную задачу вычислительного комплекса - приём информации от источника, её обработка и выдача результатов потребителю. Ну и в качестве дополнительного программного обеспечения установлена так называемая управляющая программа, описанию работы которой мы уделим основное внимание в данной статье.

Структурная схема соединений вычислительного комплекса представлена на рисунке 1. Каждый сервер, назовём его УС - управляющий сервер, представляет собой промышленный компьютер и имеет в своём составе четыре сетевых адаптера, подключённых с помощью Ethernet соединения к высоконадёжным коммутаторам. С целью дополнительного резервирования каналов приёма от источника и передачи потребителю подключение осуществляется отдельной парой коммутаторов. С целью повышения надёжности комплекса используется дополнительный уровень резервирования на уровне подсистем, как было сказано выше, в частности резервирование источников питания серверов и источников питания интерфейсов для обмена данными. Напомним так же, что каждый элемент нашего вычислительного комплекса имеет основной и резервный встроенные блоки питания, подвод питающего напряжения осуществляется по отдельным кабельным соединениям от устройства распределения питания (УУП) (рисунк 1).

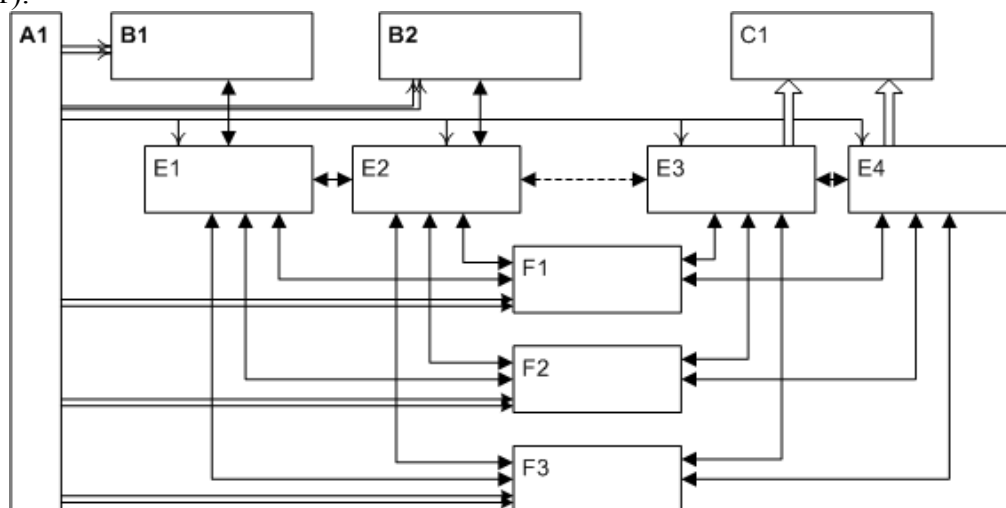


Рис. 1. Структурная схема соединений вычислительного комплекса.

На рисунке показаны:

- A - управляемое устройство распределения питания;
- B - источники информации (данных);
- C - автоматизированная управляющая система удалённого пользователя;
- E - Ethernet коммутаторы;
- F - управляющие серверы.

Двойное резервирование аппаратной части каждой составляющей ПТК является основой в ситуации постепенной деградации вычислительной системы.

За взаимодействие между серверами, входящими в состав комплекса отвечает дополнительное программное обеспечение (ДПО), входящее в комплект ПО каждого сервера и загружаемое во время начального этапа загрузки операционных систем. Так как в нашем случае используется ОС из серии Linux, поэтому в статье назовём это ДПО "демоном".

В задачи "демона" входит:

- обеспечение диалога с соседними серверами, данные о которых заранее прописаны в файлах настроек;
- запуск основной программы вычислительного комплекса;
- контроль за работой основной программы;
- обеспечение обновления основной программы и отката в случае её неустойчивой работы;
- переназначение уровней серверам: ведущий, ведомый;
- контроль за работой аппаратной составляющей комплекса;
- управление включением, выключением и перезапуском взаимодействующих серверов таким образом, чтобы в единицу времени работали не менее 2 серверов одновременно (ведущий и один из ведомых);
- контроль за ресурсом работы и распределение времени с целью равномерной наработки серверов;
- управление работой на потребителя основной программы: выдача результатов работы ведущим сервером, блокировка выдачи данных основной программы ведомого сервера;

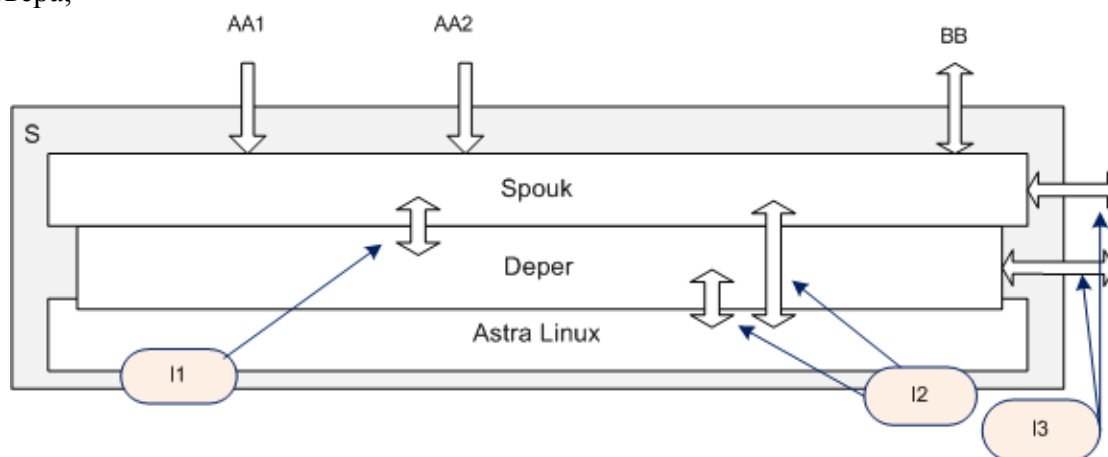


Рис. 2. Взаимодействие между элементами программного обеспечения сервера.

В целях установления понимания принципа работы предлагаемого варианта вычислительного комплекса дадим определения и задачи его составляющим. Главной задачей основного программного обеспечения серверов является приём от источника, обработка и выдача информации потребителю. При этом, ведущий сервер выполняет за-

Взаимодействие между элементами программного обеспечения сервера показано на рисунке 2.

S - управляющий сервер;

Deper - программа-демон Deper;

П1 - взаимодействие между основной программой и демоном;

I2 - взаимодействие между операционной системой и программным обеспечением

em;

ИЗ - обмен информацией с другими серверами в вычислительном комплексе;

АА - приём данных от источников информации;

ВВ - обмен данными с автоматизированной управляющей системой удалённого пользователя.

Одним из важных условий корректной работы "демонов" является необходимость того, чтобы в настройках каждого сетевого адаптера был жёстко прописан IP адрес для работы в своей локальной сети. Высокие требования так же предъявляются к компактности кода программы, ведущей к повышению её надёжности, уменьшению количества применяемых команд и операций, максимальному использованию программой функций операционной системы. Запуск "демона" должен осуществляться при инициализации операционной системы не выше 3.

Алгоритм работы программы «демона» показана на рисунке 3.

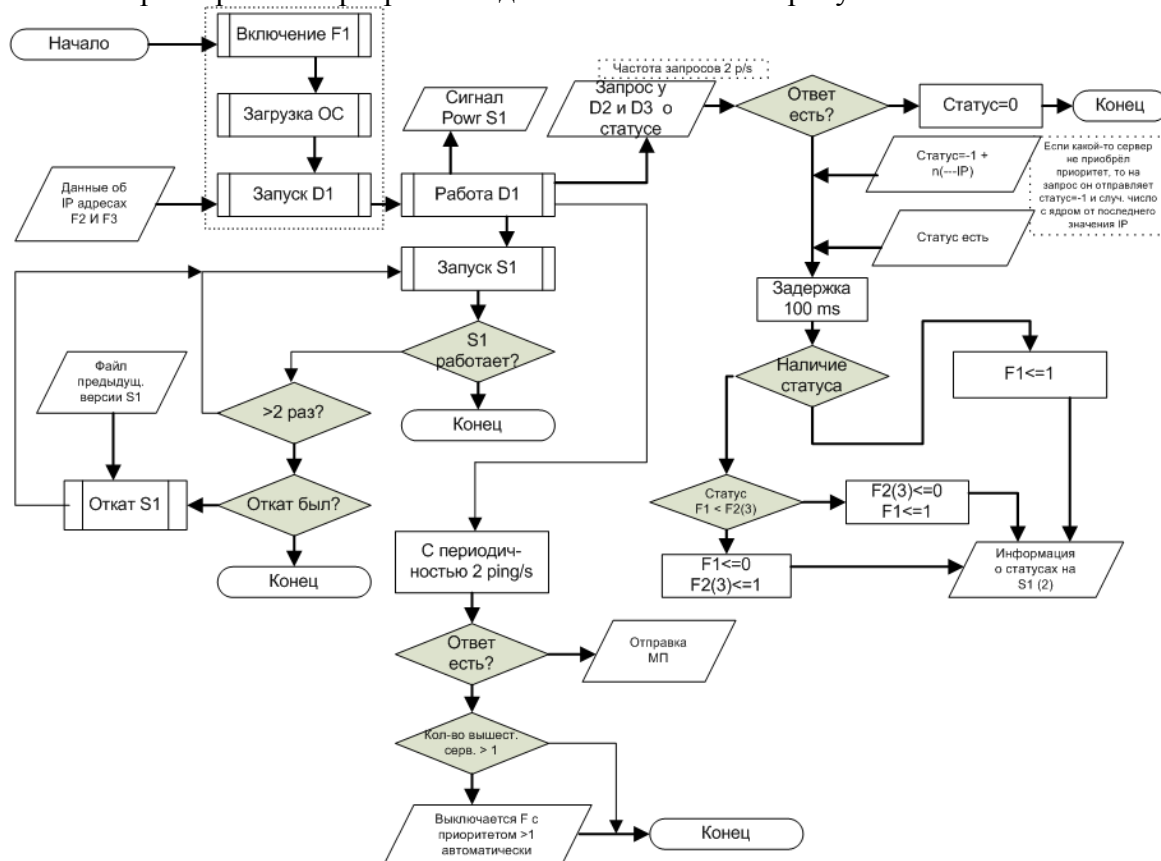


Рис. 3. Алгоритм работы «демона» Deper.

На рисунке показаны обозначения:

F - собственно сервер;

D - программа «демон» «Deper»;

S – основная программа «Spouk»;

На основную программу возложены, кроме главных задач, функции контроля за состоянием аппаратной части вычислительного комплекса, с мониторингом и выдачей технической информации на автоматизированную управляющую систему удалённого пользователя.

Так как основной целью является создание высоконадёжного аппаратно-программного комплекса следующим шагом необходимо провести вероятностный анализ надёжности.

Надёжность работы сервера, как и любой другой вычислительной системы, определяется не только параметрами надёжности аппаратной составляющей, но более того - программной составляющей. При составлении схем для расчёта надёжности определяющим фактором выхода из строя системы является отсутствие информации с результатами работы вычислительного комплекса в целом, а так же на неспособность к самовосстановлению.

Схема для расчёта надёжности сервера представлена на рисунке 4.

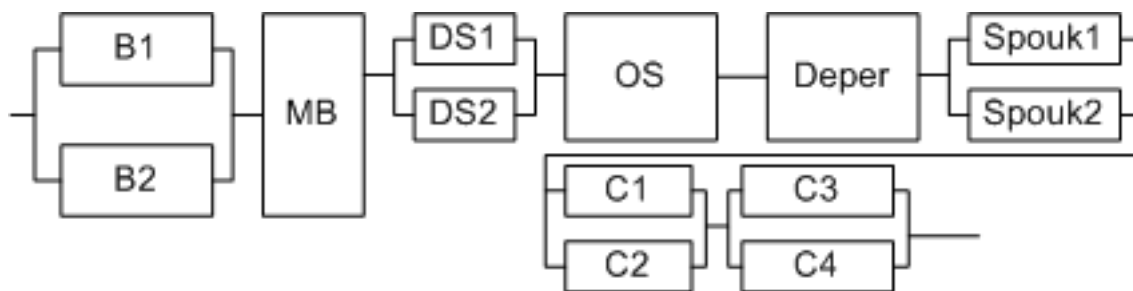


Рис. 4. Схема для расчёта надёжности сервера.

На рисунке показаны:

B - источники питания;

MB - основная системная плата сервера;

DS - дисковая подсистема;

OS - операционная система;

Spouk - основная программа;

Deper - программа "демон"

C1, C2 - сетевые адаптеры для связи с соседними серверами;

C3, C4 - сетевые адаптеры для связи с автоматизированной управляющей системой удалённого пользователя.

Дисковая подсистема представляет собой массив RAID 0, состоящий из двух высоконадёжных твердотельных накопителей с возможностью зеркалирования. Основная программа "Spouk" отображена на рисунке в двух экземплярах ввиду того, что при фатальном повреждении работающей программы, демон "Deper" автоматически восстанавливает её из резервной копии и запускает в работу.

Вероятность безотказной работы сервера P_s находится по формуле (1):

$$P_s = (1 - (1 - P_B)^2) \cdot P_{MB} \cdot (1 - (1 - P_{DS})^2) \cdot P_{OS} \cdot P_{DEPER} \cdot (1 - (1 - P_{SPOUK})^2) \cdot (1 - (1 - P_{C1(2)})^2) \cdot (1 - (1 - P_{C3(4)})^2) \quad (1)$$

Далее рассмотрим расчёт надёжности вычислительного комплекса в целом. Схема для расчёта надёжности вычислительного комплекса представлена на рисунке 5.

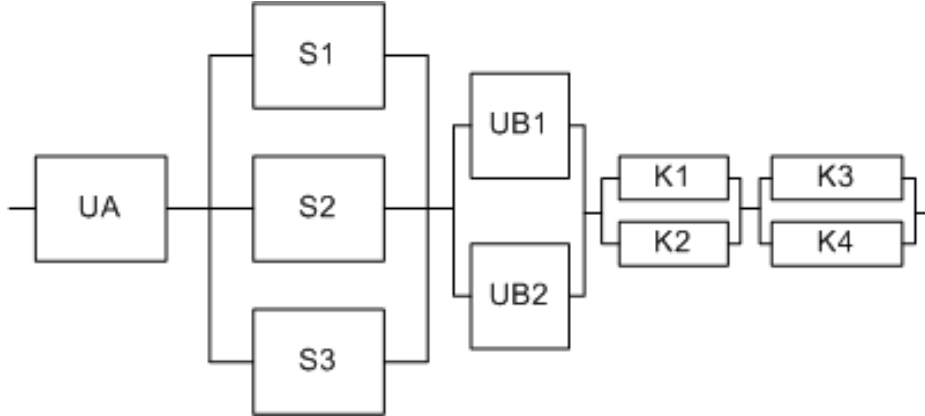


Рис. 5. Схема для расчёта надёжности вычислительного комплекса.

На рисунке показаны:

UA - управляемое устройство распределения питания;

UB - источники питания;

S1 - сервер, выполняющий полноценную работу;

S2 - сервер, находящийся в режиме облегчённого (тёплого) резерва;

S3 - сервер, находящийся в режиме ненагруженного (холодного) резерва;

K1, K2 - коммутаторы, используемые для взаимосвязи между серверами и другими подсистемами вычислительного комплекса;

K3, K4 - коммутаторы, используемые для связи с автоматизированной управляющей системой удалённого пользователя.

Вероятность безотказной работы вычислительной системы P_A находится по формуле:

$$P_A = P_{UA} \cdot (1 - (1 - P_{S1(2,3)})^2) \cdot (1 - (1 - P_{UB})^2) \cdot (1 - (1 - P_{K1(2)})^2) \cdot (1 - (1 - P_{K3(4)})^2) \quad (2)$$

Надёжность вычислительной системы, характеризуется потоком отказов A , численно равное сумме интенсивности отказов отдельных устройств [5]:

$$A = \sum \lambda_i \quad (3)$$

Средняя наработка до отказа T_o - это математическое ожидание наработки вычислительной системы до первого отказа:

$$T_o = 1 / A = 1 / \sum \lambda_i \quad (4)$$

или, отсюда, надёжность - это обратная величина:

$$A = 1 / T_o. \quad (5)$$

Набрав на этапе исследования статистику отказов несложно вычислить, используя инструменты, выложенные в свободном доступе [4], численные значения надёжности предлагаемого программного обеспечения и, следовательно, надёжности вычислительной системы в целом.

Заключение

Данный вариант построения высоконадёжного вычислительной системы использует комбинированный способ аппаратно-программного резервирования. Некоторые методы, описанные в сообщении, такие как многократное аппаратное резервирование, конечно, удорожают конечный продукт. Но, усиленные, по сравнению с традиционными, программные решения в комплексе с указанными техническими методами могут заметно повысить эффективность предлагаемой вычислительной системы при практической эксплуатации с минимальным привлечением обслуживающего персонала.

Затруднением, ввиду достаточно высокой надёжности экспериментальной установки, так же является необходимость длительных эксплуатационных испытаний для набора статистических данных о стабильности работы элементов вычислительной системы. Целью сбора статистической информации является разработка и выбор оптимального метода расчёта надёжности для разработки подобных комплексов на различной технической базе.

Дальнейшим развитием комплексных решений, предлагаемым в данном сообщении, является создание необслуживаемых вычислительных систем, размещаемых в малонаселённых и ненаселённых районах.

Список литературы

1. Хорошевский В. Г. Архитектура вычислительных систем. М., МГТУ, 2008г.
2. Одарущенко О.Н., Живило С.В., Харченко В.С., Одарущенко Е.Б. Анализ архитектур отказоустойчивых серверов для оценки их надёжности. Радиоэлектронные и компьютерные системы, 2012, №7(59)
3. ГОСТ 27.301-95 Расчёт надёжности. Основные положения. Минск: Межгосударственный совет по стандартизации, метрологии и сертификации, 1997г..
4. Можаяев А.С. Автоматизированное структурно-логическое моделирование и расчёт надёжности и безопасности автоматизированных систем управления технологическими процессами и оборудованием на стадии проектирования. Методические рекомендации. "СевЗапМонтажАвтоматика" СПб 2003 г.
5. Черкесов Г.Н. Надёжность аппаратно-программных комплексов СПб "Питер", 2005 год.

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ГНСС-ПРИЕМНИКОВ³

А.Б. Гладышев, В.Н. Ратушняк, Е. А. Вейсов

Сибирский федеральный университет,
a-glonass@yandex.ru

Аннотация. Рассмотрен программно-аппаратный комплекс для проведения исследований точностных характеристик ГНСС-приемника, реализованный на основе аппаратной платформы National Instruments и среды программирования LabView. Комплекс обеспечивает имитацию навигационного поля и источника помех, на основе разработанных моделей, анализ принятых сигналов, определение погрешностей измерения навигационных параметров ГНСС-приемником.

Введение. Расширяющаяся сфера применения средств спутниковой навигации диктует свои требования к навигационным приемникам (НП). Согласно этим требованиям НП должны обладать улучшенными точностными характеристиками, высокой помехоустойчивостью, малым энергопотреблением и небольшими габаритами [1,2].

Все эти требования могут быть удовлетворены при разработке НП на основе СБИС класса «Система на кристалле». [3, 4].

Однако, в процессе разработке навигационных приемников на основе СБИС класса «Система на кристалле» необходимо наличие современной контрольно-измерительной аппаратуры для отладки и исследования характеристик таких систем.

В результате анализа возможных вариантов реализации средств отладки и исследования НП [5-8] с учетом опыта использования различных систем контроля характеристик и комплексов для проведения экспериментальных исследований предложен вариант модульного комплектования программно-аппаратного комплекса на основе аппаратной платформы фирмы National Instruments и программного обеспечения LabVIEW.

Модульные измерительные системы открытого промышленного стандарта PXI (PCI eXtention for Instrumentation) аппаратной платформы фирмы National Instruments наиболее удобны для построения универсальной системы контроля работоспособности, отладки и измерения характеристик НП класса «Система на кристалле» в ходе их разработки и проведения экспериментальных исследований, а также обеспечивают рациональное соотношение стоимость/производительность.

В публикации представлен вариант программно-аппаратного комплекса, предназначенный для исследования, отладки и проверки точностных характеристик ГНСС-приемника

Требования к программно-аппаратному комплексу. Таким образом, программно-аппаратный комплекс в процессе отладки и проведения экспериментальных исследований разрабатываемого ГНСС-приемника должен обеспечивать измерение:

- а) погрешности определения координат;
- б) погрешности определения путевой скорости;

³ Работа выполнена в ходе реализации комплексного проекта при финансовой поддержке Правительства Российской Федерации (Минобрнауки России), договор № 02.G25.31.0202 от 27.04.2016.

в) погрешности определения углов пространственной ориентации (курса, тангажа и крена);

Выполнение этих требований обеспечит вполне определенная конфигурация аппаратных средств комплекса, которая должна выполнять следующие функции:

- генерирование (имитация) навигационных сигналов основных навигационных систем ГЛОНАСС/GPS согласно разработанных математических моделей;
- прием и регистрация сигналов;
- обработка сигналов на основе заложенных математических моделей;
- взаимодействие с ГНСС-приемника по интерфейсу Ethernet;
- гибкое управление всеми составными частями контрольно-измерительной аппаратуры комплекса;

Аппаратная часть. На основе предъявленных требований разработана структурная схема программно-аппаратного комплекса, показанная на рисунке 1.

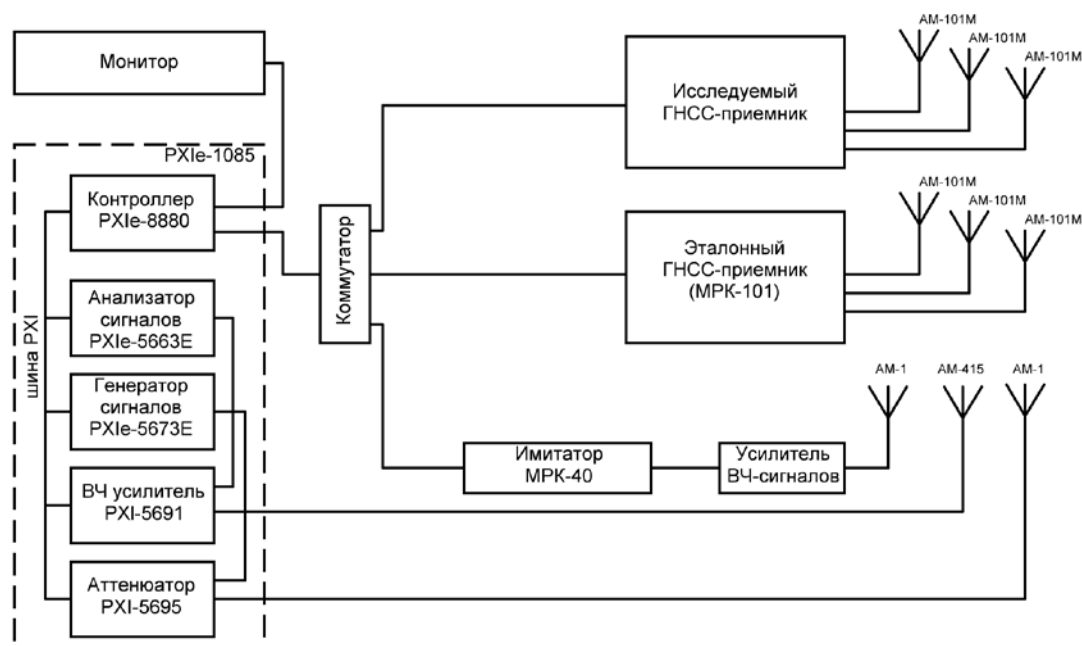


Рис. 1. Структурная схема программно-аппаратного комплекса для исследования точностных характеристик ГНСС-приемника.

В состав программно-аппаратного комплекса входят следующие составные части:

- векторный генератор сигналов NI PXIe-5673E с ВЧ-аттенюатором NI PXI-5695;
- векторный анализатор сигналов NI PXIe-5663E с ВЧ-предусилителем PXI-5691;
- широкополосный осциллограф NI PXIe-5171R;
- контроллер вычислительный NI PXIe-8880;
- шасси NI PXIe-1085;
- имитатор радионавигационных сигналов МРК-40;
- эталонный ГНСС-приемник МРК-101;

Выбранная структура программно-аппаратного комплекса позволяет производить измерение характеристик двумя методами:

- сравнивая измеренные значения навигационных параметров с заданными в имитаторе сигналов (при имитации навигационного поля);

- сравнивая измеренные значения навигационных параметров исследуемого и эталонного ГНСС-приемника (при работе по реальным навигационным сигналам).

Исследуемый ГНСС-приемник подключается к вычислительному контроллеру NI PXIe-8880 по интерфейсу Ethernet.

Программируемый векторный генератор ВЧ-сигналов NI PXIe-5673E с аттенуатором NI PXI-5695 и имитатор навигационных сигналов МРК-40 совместно образуют подсистему имитации навигационного поля в точке приема сигналов ГНСС-приемником одновременно стандартов ГЛОНАСС и GPS. Данная подсистема формирует информационную составляющую цифрового сигнала, переносит сигнал на несущую частоту и излучает его в пространство с помощью двух антенн АМ-415.

Функционально подсистема имитации навигационного поля позволяет генерировать навигационные сигналы с заранее известными значениями радионавигационных параметров, оцениваемых в навигационной аппаратуре (мощность, задержка дальнометрического кода, доплеровский сдвиг частоты и т.д). Таким образом имеется возможность воспроизводить в лабораторных условиях на входе навигационной аппаратуры сигнальную обстановку, моделирующую различные ситуации, которые технически сложно и/или экономически нецелесообразно воспроизводить в натурном эксперименте. Например, к таким ситуациям может относиться имитация перемещения объекта с заданной динамикой маневрирования при наличии затенений радиовидимости НКА, а также с учетом характерных погрешностей, искажающих значения радионавигационных параметров (ионосферная, тропосферная и пр.).

Отличительной особенностью подсистемы имитации навигационного поля является не только возможность формирования навигационных сигналов с параметрами, заданными пользователем, но и функция воспроизведения ранее записанных в реальных условиях навигационных сигналов с помощью векторного анализатора ВЧ сигналов NI PXIe-5663E.

Для приема, анализа и регистрации сигналов, действующих на входе радиочастотного тракта навигационного приемника используется высокопроизводительный векторный анализатор ВЧ-сигналов NI PXIe-5663E с усилителем PXI-5691. С помощью специального программного обеспечения производится измерение параметров принятых анализатором сигналов, а также их запись на носитель информации с возможностью дальнейшего воспроизведения через векторный генератор сигналов NI PXIe-5673E. Программируемый усилитель ВЧ-сигналов PXI-5691 позволяет улучшить чувствительность векторного анализатора ВЧ-сигналов и регистрировать более слабые сигналы.

Управление приборами, измерение исследуемых характеристик производится под управлением высокопроизводительного встраиваемого контроллера NI PXIe-8880 с помощью специального программного обеспечения, разработанного в среде LabVIEW. При этом приборы платформы National Instruments смонтированы на шасси NI PXIe-1085, а взаимодействие с остальными составными частями программно-аппаратного комплекса осуществляется по локальной вычислительной стандарта Ethernet.

Специальное программное обеспечение. Программное обеспечение программно-аппаратного комплекса разработано в универсальной среде программирования LabVIEW, позволяющей в графической форме проводить программирование процедур измерения параметров сигналов, определение вектора навигационных параметров, математическую обработку полученных результатов, формировать отчеты с графиками и статистической информацией.

При разработки ПО наряду со стандартными наборами библиотек функций использовались библиотеки функций GPS Simulation Toolkit и GLONASS Toolkit.

Структура программного обеспечения представляет собой набор функциональных программных модулей (subVI), которые предназначены для взаимодействия с аппаратной частью составных частей программно-аппаратного комплекса, либо отдельных модулей выполняющих математическую обработку полученных результатов измерений.

Описание работы программно-аппаратного комплекса. Программно-аппаратный комплекс представляет собой гибкую систему, работу которой определяет пользователь, следовательно, может быть реализован не один вариант работы данного комплекса. Ниже представлен один из вариантов работы комплекса при исследовании характеристик ГНСС-приемника.

Работа комплекса начинается с моделирования навигационных сигналов. Моделирование выполняется с помощью модулей управления векторным генератором PXIe-5673E или модулем управления имитатором МРК-40 согласно разработанному сценарию. Для создания навигационного поля двух стандартов ГЛОНАС и GPS данные программные модули используются одновременно. Смоделированные навигационные сигналы передаются на устройства генерирования (PXIe-5673E, МРК-40) и излучаются в пространство.

Особенностью программного модуля для PXIe-5673E является возможность воспроизведения реальных навигационных сигналов с НКА, записанных с помощью векторного анализатора сигналов PXIe-5663E.

Навигационные сигналы принимаются векторным анализатором сигналов PXIe-5663E с помощью антенны АМ-415, размещенной в точке приема сигналов ГНСС-приемником с целью их контроля и измерения параметров. Параметры принятых сигналов выводятся в окне программного модуля анализатора сигналов с возможностью графического отображения во временной и частотной области. При необходимости параметры сигналов могут быть записаны в файл.

Имитированные или реальные сигналы принимаются исследуемым и эталонным ГНСС-приемниками, где происходит их обработка и выделения навигационных параметров согласно заложенных алгоритмов. Управление приемниками и прием данных от них осуществляется с помощью модуля управления ГНСС-приемниками по локальной вычислительной сети. Все данные, необходимые для проведения исследований отображаются в окне модуля, а также выдаются на модуль обработки результатов измерения.

Результаты измерений со всех составных частей программно-аппаратного комплекса поступают в модуль обработки результатов измерений. В этом модуле осуществляется вычисление погрешностей, вносимых исследуемым ГНСС-приемником по

заданным параметрам имитированных навигационных сигналов или по параметрам с эталонного ГНСС-приемника МРК-101.

Заключение. Предложенный вариант программно-аппаратного комплекса для исследования точностных характеристик ГНСС-приемника на основе аппаратной платформы фирмы National Instruments предоставляет широкие возможности при разработке архитектуры СБИС класса «Система на кристалле», реализующей новые методы угломерных навигационных измерений в навигационной аппаратуре потребителей глобальных навигационных спутниковых систем. Данный комплекс позволяет на этапах проектирования тестировать разрабатываемые алгоритмы будущего ГНСС-приемника, а также тестировать приемник в целом. При некоторой доработке программного обеспечения появляется возможность для измерения с помощью приборов комплекса других характеристик ГНСС-приемника, например, чувствительности приемника.

Список литературы

1. Тяпкин В. Н. Создание помехозащищенных навигационных приемников, способных измерять пространственную ориентацию объектов / В. Н. Тяпкин, Ю. Л. Фатеев, Д. Д. Дмитриев, и др. // Успехи современной радиоэлектроники. — 2014. — № 5. С. 61–65.
2. Тяпкин В. Н. Пространственное подавление помех при различных конфигурациях антенной решетки угломерной навигационной аппаратуры / Тяпкин В.Н., Гарин Е.Н., Ратушняк В.Н., Дмитриев Д.Д., Гладышев А.Б.// Научные технологии. — 2016. — Т. 17. — № 8. С. 52-56.
3. Chen, D. Reconfigurable dual-channel multiband RF receiver for GPS/Galileo/BD-2 systems // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – Volume 60, Issue 11, 2012, pp. 3491-3501
4. Li, S Reconfigurable all-band RF CMOS transceiver for GPS/GLONASS/galileo/beidou with digitally assisted calibration // IEEE Transactions on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems/ - Volume 23, Issue 9, 2015/ - pp. 1814-1827.
5. Dmitriev D.D. Hardware-Software Complex for Studying the Characteristics of GNSS Receiver / Dmitriev D.D., Gladyshev A.B., Tyapkin V.N., Fateev Yu.L. // 2016 International Siberian Conference on Control and Communications, SIBCON 2016. – National Research University "Higher School of Economics" Moscow; Russian Federation. May 12-14, 2016 – Proceedings 7491665.
6. Жариков В. Н. Новые технологии для испытательного оборудования. / Жариков В. Н., Пичкалев А. В. // Вестник СибГАУ. – Красноярск, 2011. – Вып. 1 (34). С. 132–135.
7. Крат Н.М. Контрольно-проверочная аппаратура системы автономной навигации космических аппаратов. / Крат Н.М., Савин А.А., Шарыгин Г.С. // Доклады Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники. 2014. – № 1 (31). С. 28-32.
8. Автоматизированные рабочие места регулировки и тестирования РЭА. – National Instruments. – Москва, 2015. – 36 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАНИЙ ГАЗОВОЙ ПОЛОСТИ В АНИЗОТРОПНОЙ НЕНЬЮТОНОВСКОЙ ЖИДКОСТИ⁴

Р.Н.Голых¹, В.Н.Хмелёв¹, Р.С.Доровских¹, Е.В.Ильченко¹, В.А.Шакура¹

¹Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ,
кафедра методов и средств измерений и автоматизации, romangl90@gmail.com

В последние десятилетия анизотропные неньютоновские жидкости получают всё более широкое применение в различных областях человеческой деятельности. Постоянно возрастающие требования, как к полимерным композиционным материалам, так и другим подклассам анизотропных неньютоновских жидкостей (лакокрасочные, смазочные материалы и т. д.) обуславливают необходимость модификации их физико-химической структуры.

Множеством исследователей [1–5] установлено, что одним из перспективных подходов к изменению структуры анизотропных неньютоновских жидкостей является кавитационное воздействие (создаваемое наложением ультразвуковых колебаний, гидродинамическими методами, принудительным разрежением и т. д.), осуществляемое на неотвержденный образец материала.

Для подбора режимов кавитационного воздействия необходимы исследования колебаний газовой полости в анизотропной неньютоновской среде.

На сегодняшний день наиболее полно исследована динамика кавитационной полости в изотропных жидкостях, т.е. вязкость которых не зависит от направления скорости сдвига [1, 4–7]. Это вызвано тем, что модели газового пузырька в таких жидкостях являются наиболее простыми ввиду сферичности формы полости. Сферичность пузырька даёт возможность свести задачу к обыкновенному дифференциальному уравнению (ОДУ) относительно скалярной функции – радиуса пузырька от времени.

Однако для случая анизотропных жидкостей модели кавитационных процессов на сегодняшний день отсутствуют.

Это обусловлено тем, что в таких жидкостях пузырёк нарушает сферическую форму из-за разности сил вязких напряжений, действующих вблизи каждого участка стенки газовой полости.

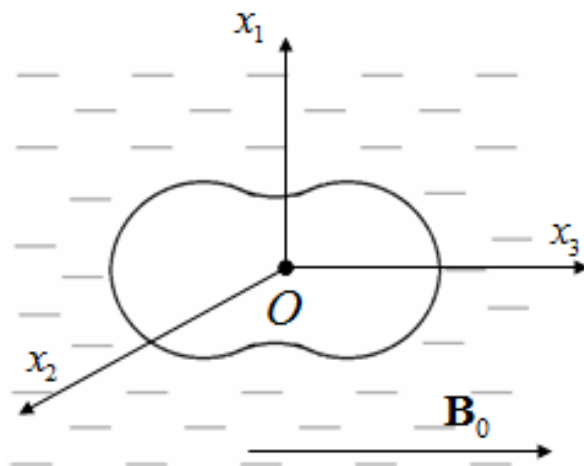


Рис.1. Форма газового пузырька в анизотропной неньютоновской жидкости (B_0 – вектор ориентации макромолекул).

⁴ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 16-08-01298 а.

Поэтому для расчёта колебаний пузырька были рассмотрены общие уравнения течения анизотропной неньютоновской среды (1–5) с граничными условиями на поверхности пузырька (6–7) [8, 9]. Эти уравнения наряду со скоростью и давлением жидкости дополнительно включают в себя вектор ориентации макромолекул $\mathbf{B}$, который собственно и определяет зависимость вязкости от направления скорости сдвига.

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}, \nabla) \mathbf{v} \right] = \text{div} (-p \mathbf{I} + \mathbf{T}); \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + (\mathbf{v}, \nabla) \mathbf{B} = \lambda \left(\mathbf{D} \mathbf{B} - \left(\sum_{m,n=1}^3 D_{mn} B_m B_n \right) \mathbf{B} \right); \quad (2)$$

$$\sum_{i,j,k,l=1}^3 \tau_{ijkl}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_{ij} \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial t} + (\mathbf{v}, \nabla) T_{ij} \right) + \mathbf{T} = \sum_{i,j,k,l=1}^3 \eta_{ijkl}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_{ij} \left(\frac{\partial v_k}{\partial x_l} + \frac{\partial v_l}{\partial x_k} \right); \quad (3)$$

$$\eta_{ijkl} = \eta_{jikl} = \eta_{klij}; \quad (4)$$

$$\tau_{ijkl} = \tau_{jikl} = \tau_{klij}; \quad (5)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}; \quad (6)$$

$$-\mathbf{T}\mathbf{n} + p\mathbf{n} = p_B \mathbf{n} - 2\sigma K \mathbf{n}; \quad (7)$$

где $\mathbf{v}$ – вектор скорости движения жидкости, м/с; ρ – плотность жидкости, кг/м³; p – давление в жидкости, Па; $\mathbf{T}$ – тензор вязких напряжений в жидкости, Па; $\mathbf{D}$ – тензор скоростей деформации, с⁻¹; $\mathbf{B}$ – вектор ориентации макромолекул; p_B – давление газа внутри пузырька, Па; σ – поверхностное натяжение жидкости, Н/м; K – кривизна стенки пузырька, м⁻¹; $\mathbf{r}$ – радиус-вектор точки стенки газового пузырька, м; $\mathbf{n}$ – вектор внешней нормали к поверхности пузырька; η_{ijkl} – компонент тензора вязкости жидкости, Па·с; τ_{ijkl} – компонент тензора времен релаксации, с.

Поскольку конечно-элементное решение системы данных уравнений отличается вычислительной трудоёмкостью, расчёт колебаний пузырька производился с помощью метода последовательных приближений формы стенок и характеристик течения жидкости по тензору вязкости 4-го ранга [9].

Кроме того, было принято во внимание, что для большинства жидкостей тензор вязкости и тензор времен релаксации раскладывается на спектральные составляющие, пропорциональные вязкостям в продольном направлении (параллельном ориентации макромолекул, $\eta_{||}, \tau_{||}$) и в поперечном направлении (перпендикулярном ориентации макромолекул, $\eta_{\perp}, \tau_{\perp}$) [8, 9]:

$$\eta_{ijkl} = \sum_{\alpha=1}^3 \eta_{\alpha} a_{ijkl}^{(\alpha)}; \quad (8)$$

$$\tau_{ijkl} = \sum_{\alpha=1}^3 \tau_{\alpha} a_{ijkl}^{(\alpha)}; \quad (9)$$

$$a_{ijkl}^{(1)} = \frac{\delta_{ik} \delta_{je} + \delta_{ie} \delta_{jk}}{2} - \frac{\delta_{ij} \delta_{ke}}{3} - a_{ijkl}^{(2)} - a_{ijkl}^{(3)}; \quad a_{ijkl}^{(2)} = \frac{3}{2} \left(N_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \right) \left(N_{kl} - \frac{\delta_{kl}}{3} \right); \quad (10)$$

$$a_{ijkl}^{(3)} = \frac{1}{2} (\delta_{ik}^{\perp} N_{jl} + \delta_{jl}^{\perp} N_{ik} + \delta_{il}^{\perp} N_{jk} + \delta_{jk}^{\perp} N_{il}); \quad (11)$$

$$\delta_{ij}^{\perp} = \delta_{ij} - N_{ij}; \quad N_{ij} = B_i B_j; \quad (12)$$

$$\eta_1 = \eta_2 = \eta_{\perp}; \quad \eta_3 = \eta_{\parallel}; \quad (13)$$

$$\tau_1 = \tau_2 = \tau_{\perp}; \quad \tau_3 = \tau_{\parallel}; \quad (14)$$

На рис.2 представлены формы газового пузырька при различных соотношениях между вязкостями жидкости в разных направлениях сдвига $\frac{\eta_{\parallel}}{\eta_{\perp}}$ и частотах колебаний пузырька для случая, когда жидкость не обладает вязкоупругостью (тензор времен релаксации нулевой).

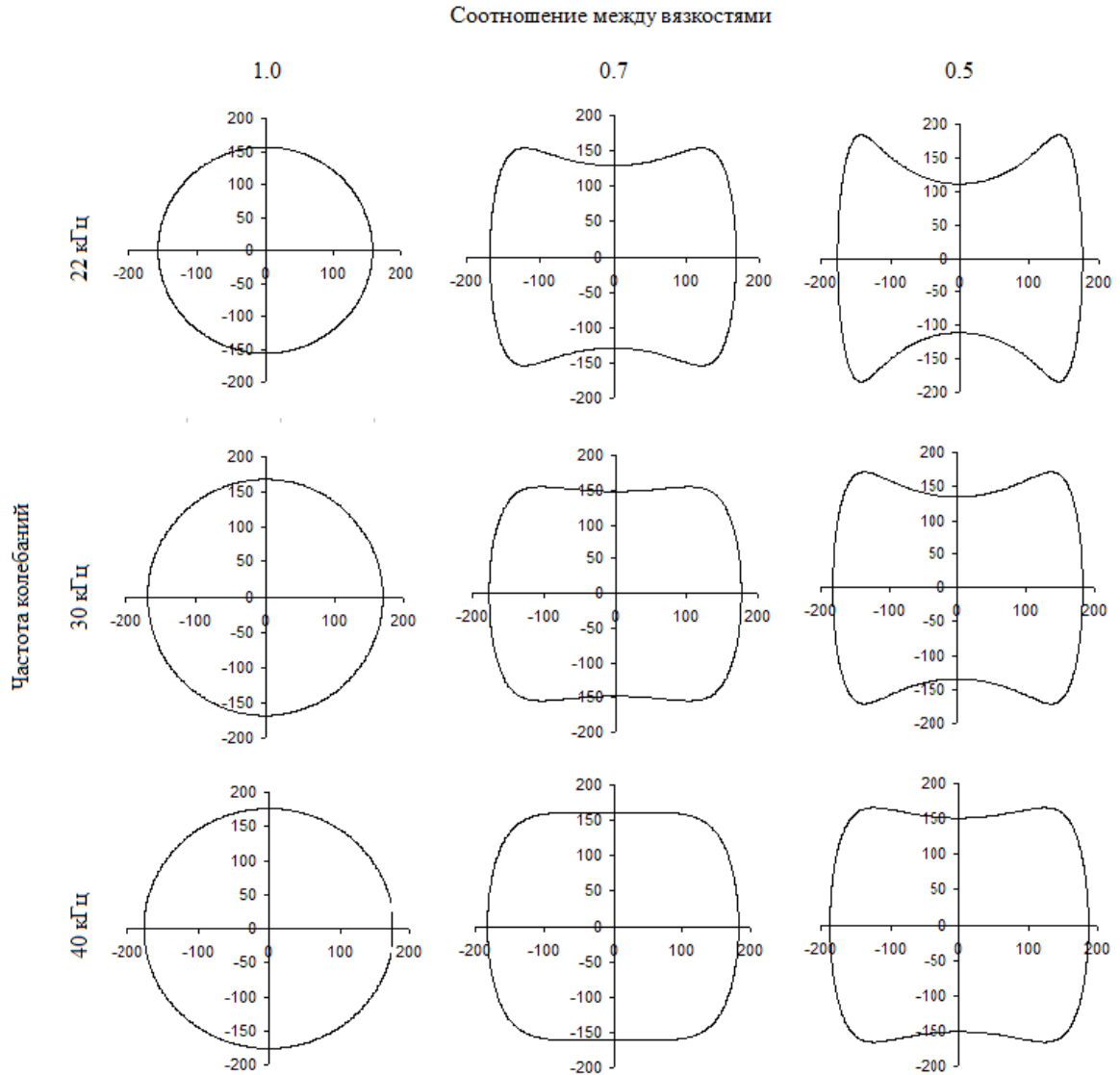


Рис.2. Формы газового пузырька при различных соотношениях между вязкостями жидкости в разных направлениях $\frac{\eta_{\parallel}}{\eta_{\perp}}$ и частотах колебаний.

На рис.3 представлены формы газового пузырька при различных соотношениях между вязкостями жидкости в разных направлениях $\frac{\eta_{||}}{\eta_{\perp}}$ и временах релаксации вязкости для вязкоупругих жидкостей.

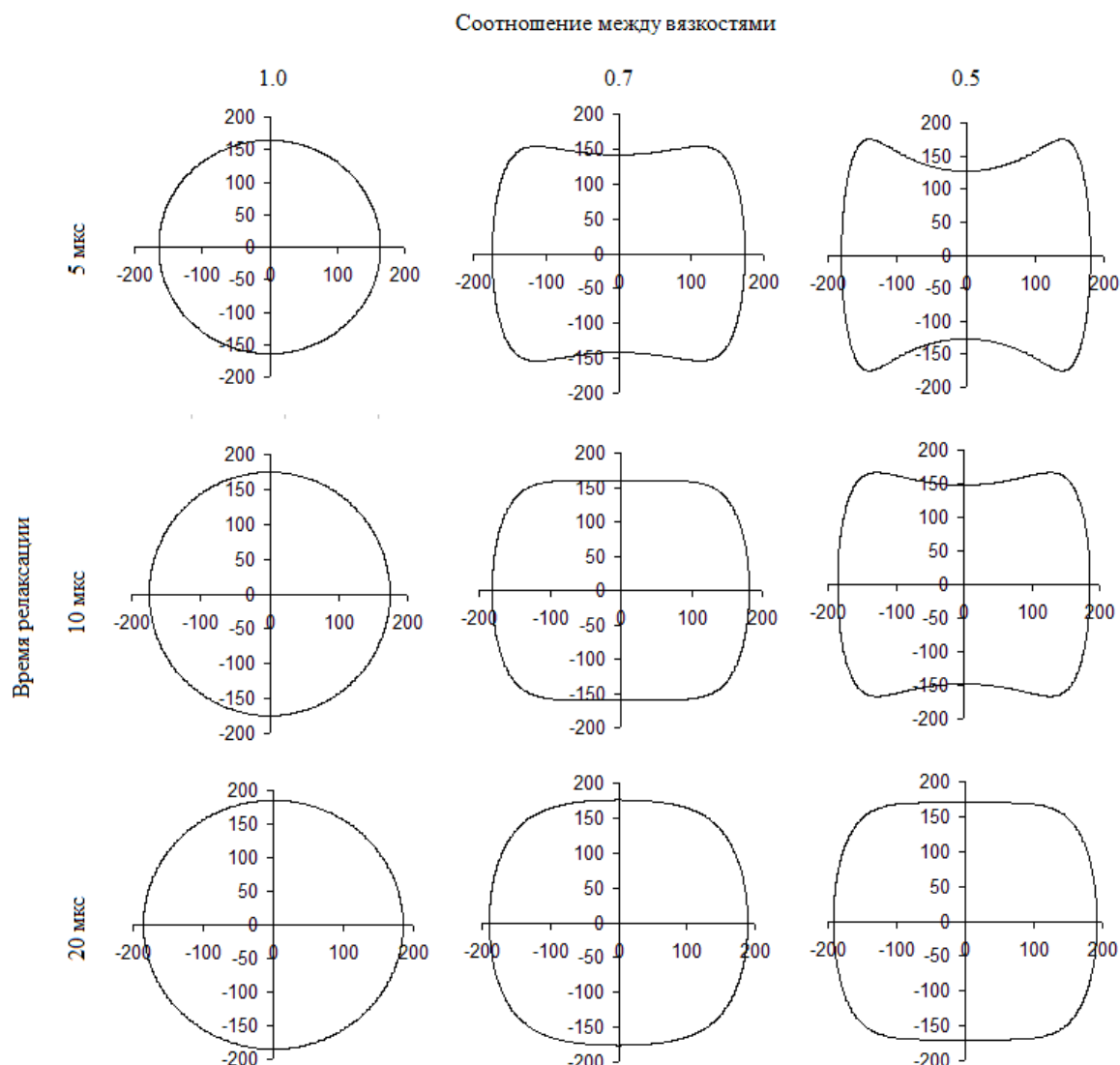


Рис.3. Формы газового пузырька при различных соотношениях между вязкостями жидкости в разных направлениях $\frac{\eta_{||}}{\eta_{\perp}}$ и временах релаксации.

Как следует из представленных рисунков увеличение соотношения между вязкостями в продольном и поперечном направлении приводит к усилению деформации кавитационного пузырька.

При этом кавитационный пузырёк имеет наибольшие размеры в продольном направлении, поскольку жидкость при сдвиге в данном направлении обладает наименьшей вязкостью.

Таким образом, в результате выполнения работы предложена модель, которая позволяет найти форму кавитационного пузырька в анизотропной неньютоновской жидкости. Полученная форма пузырька служит основой для последующего определе-

ния характеристик ударной волны в жидкости. Это в дальнейшей перспективе даст возможность проанализировать воздействие кавитации на молекулярную структуру и физические свойства анизотропных неньютоновских жидкостей и, в конечном итоге, подобрать режимы воздействия, обеспечивающие достижение требуемых свойств таких сред.

Список литературы

1. Khmelev, V.N. Determination of Optimum Conditions of Ultrasonic Cavitation Treatment of High-viscous and Non-newtonian liquid media / V.N. Khmelev, R.N. Golykh, A.V. Shalunov, V.E. Bazhin, V.A. Nesterov // 16th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices. EDM'2015: Conference Proceedings. – 2015. – P. 208–212.
2. Tolochko, N.K. Ultrasonic dispersing of carbon nanomaterials / N.K. Tolochko // Advanced materials. – 2008. – No. 2. – P. 5–9.
3. Huang, Y.D. Influence of ultrasonic treatment on the characteristics of epoxy resin and the interfacial property of its carbon fiber composites / Y.D. Huang, L. Liu, J.H. Qiu, L. Shao // Composit. Sci. Techn. – 2002. – Vol.62. – P. 2153–2159.
4. Golykh, R.N. Evaluation of ultrasonic influence intensities providing formation of cavitation area in liquids with various rheological properties / R.N. Golykh, A.V. Shalunova, V.A. Nesterov, E.V. Ilchenko // Americal Journal of Engineering Research. – 2014. – Issue 12. – P. 124–133.
5. Khmelev, V.N. Determination of ultrasonic effect mode providing formation of cavitation area in high-viscous and non-newtonian liquids / V.N. Khmelev, R.N. Golykh, A.V. Shalunov, S.S. Khmelev, K.A. Karzakova // 15th International Conference of Young Specialists on Micro|Nanotechnologies and Electron Devices. EDM'2014: Conference Proceedings. – 2014. – P. 203–207.
6. Brujan, E.A. Bubble dynamics and cavitation in non-newtonian liquids / E.A. Brujan, P.R. Williams // Reology reviews. – 2005. – P. 147–172.
7. Tanasawa, I. Dynamic Behavior of a Gas Bubble in Viscoelastic Liquids / I. Tanasawa, W.-J. Yang // Journal of Applied Physics. – 1970. – Vol. 41. – Number 11. – P. 124–133.
8. Volkov, V.S. Spectral theory of anisotropic fluids / V.S. Volkov // Polymer Science Series A. – 2010. – Vol. 52. – Issue 11. – P. 1105–1113.
9. Golykh, R.N. Gaseous bubble oscillations in anisotropic non-Newtonian fluids under influence of high-frequency acoustic field / R.N. Golykh // Journal of Physics: Conference Series. – 2016. – Vol. 722. – Conf. 1. – 8 p.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ ЧЕРЕЗ РАЗЛИЧНЫЕ СРЕДЫ В ПЛОСКОМ СЛУЧАЕ

Г.В.Дружинин, Н.М.Бодунов

Казанский национальный исследовательский технический
университет им. А.Н. Туполева-КАИ, bodunov_nm@mail.ru

Нестационарное плоское течение несжимаемой вязкой жидкости с постоянными свойствами в отсутствие массовых сил сквозь пористую среду описывается системой уравнений Навье-Стокса модифицированной Бринкманом, которая в безразмерном виде записывается следующим образом [1]:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \tau} + \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \xi} + \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \eta} + \frac{\partial \bar{P}}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \eta^2} - \bar{\alpha} \bar{u}; \quad \frac{\partial \bar{v}}{\partial \tau} + \bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \xi} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \eta} + \frac{\partial \bar{P}}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \eta^2} - \bar{\alpha} \bar{v}; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \xi} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial \eta} = 0. \quad (2)$$

где $\bar{u} = \frac{u}{u_*}$, $\bar{v} = \frac{v}{u_*}$, $\xi = \frac{xu_*}{v}$, $\eta = \frac{yu_*}{v}$, $\tau = \frac{tu_*^2}{v}$, $\bar{P} = \frac{P}{\rho u_*^2}$, $\bar{\alpha} = \frac{v^2}{Ku_*^2}$; u, v – проекции скорости

на оси выбранной прямоугольной системы координат; u_* (или u_∞) – скорость потока на бесконечном расстоянии от тела или любая произвольно заданная скорость; P – давление; v – кинематический коэффициент вязкости, ρ – плотность среды, K – коэффициент проницаемости.

Модель течения жидкости в пористой среде Бринкмана [2, 3] является обобщением модели Дарси для случая умеренных и больших значений коэффициента проницаемости пористой среды. При малых значениях этой величины она переходит в модель Дарси, а при больших (отсутствие твердой фазы) – в уравнения движения вязкой несжимаемой жидкости в приближении Стокса для медленных течений.

Изучение течений вязкой несжимаемой жидкости на основе решения полной системы уравнений Навье-Стокса (соответственно системы уравнений Навье-Стокса-Бринкмана) является одной из главных задач в области вычислительной гидромеханики [4, 5]. Поиск новых аналитических решений этих уравнений способствует лучшему пониманию качественных особенностей течений вязкой жидкости.

Приближенное решение системы уравнений (1), (2) запишем в следующем виде (т.е. задаем векторное поле скоростей по Эйлеру):

$$\bar{u} = \left[-A \sum_{\alpha=1}^N \frac{c_0}{(c_1 \xi + c_0 \eta + d_1)^\alpha} - B \sum_{\alpha=1}^N \frac{c_1}{(c_0 \xi + c_1 \eta + d_2)^\alpha} \right] \varphi(\tau) + \psi(\tau),$$

$$\bar{v} = \left[A \sum_{\alpha=1}^N \frac{c_1}{(c_1 \xi + c_0 \eta + d_1)^\alpha} + B \sum_{\alpha=1}^N \frac{c_0}{(c_0 \xi + c_1 \eta + d_2)^\alpha} \right] \varphi(\tau) + \lambda(\tau). \quad (3)$$

Здесь $\varphi(\tau), \psi(\tau), \lambda(\tau)$ – произвольные функции, которые выбираются в зависимости от нестационарного движения обтекаемого тела, например, $\varphi(\tau) = k(1 - e^{-a\tau})$; A, B – произвольные коэффициенты; c_0, c_1, d_1, d_2 – внутренние параметры.

Отметим, что α принадлежит множеству действительных чисел. При $\alpha < 0$ выражения (3) могут быть использованы для решения внутренних задач, например, для моделирования плоской задачи о фильтрации несжимаемой вязкой жидкости сквозь пористую среду (данная модель описывает процесс изготовления деталей из полимерных композиционных материалов пропиткой под давлением [1]).

Для улучшения сходимости рядов в знаменателях решения (3) можно поставить множитель α^n или n^α , $n \in N$, $N > 2$. Очевидно, что при знаменателе больше единицы, ряды сходятся. Поэтому можно дать оценку точности приближенного решения (3) (при $\alpha = 1$ первое приближение и т.д.). Нетрудно показать, что при использовании решения (3) вихревая напряженность $\omega = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right) \neq 0$. В работах [6, 7] приведены другие базисные функции, которые тоже могут быть использованы для решения системы уравнений (1), (2).

Нетрудно проверить, что решение (3) тождественно удовлетворяет уравнению неразрывности (2). Механическое состояние системы полностью определяется заданием координат и скоростей [4, 8, 9]. Коэффициенты A и B определяются из граничных условий, внутренние параметры c_0, c_1, d_1 и d_2 выбираются из математических, физических соображений, а также из сравнения теории с экспериментальными данными или другими точными решениями.

Можно утверждать, что если решение системы уравнений (1) представить в виде (3), которое удовлетворяет тождественно уравнению неразрывности (2) для несжимаемой вязкой жидкости и соответствующим граничным условиям, то давление можно найти из уравнений (1) путем интегрирования уже линейных уравнений. С математической точки зрения это значит, что задание всех координат и скоростей в некоторый момент времени однозначно определяет также и значение ускорений этих точек в этот момент времени, т.е. предсказывает дальнейшее движение [8 – 10]. Подчеркнем, что давление определяется из системы уравнений (1) путем интегрирования.

Для простоты рассмотрим стационарное решение ($\varphi(\tau) = 1, \psi(\tau) = 1, \lambda(\tau) = 0$), которое в случае обтекания произвольных плоских тел должно удовлетворять следующим граничным условиям:

$$\bar{u}|_\Gamma = 0, \bar{v}|_\Gamma = 0, \bar{u}|_{\eta \rightarrow \infty} = 1, \bar{v}|_{\eta \rightarrow \infty} = 0. \quad (4)$$

Найдем коэффициенты A и B при значении $\alpha = 1$ на границе Γ . Используем первые два условия (4). Для нахождения A умножим первое уравнение на c_0 , второе – на c_1 и сложим. Для нахождения B умножим первое уравнение на c_1 , второе – на c_0 и сложим. В результате на границе Γ имеем

$$A = -\frac{c_0(c_1\xi_\Gamma + c_0\eta_\Gamma + d_1)}{-c_0^2 + c_1^2}, B = -\frac{c_1(c_0\xi_\Gamma + c_1\eta_\Gamma + d_2)}{-c_1^2 + c_0^2}. \quad (5)$$

Подставим выражения (5) в стационарное решение (3). Очевидно, что на границе Γ условия прилипания (первые два условия (4)) удовлетворяются тождественно. Также, нетрудно видеть, что и на бесконечности (последние два условия (4)) граничные условия выполняются.

Пример.1. Запишем квазистационарное решение (3) (при $\alpha = 1$) для решения задачи об обтекании пластинки (внешняя задача) в следующем виде ($\eta > 0, 0 \leq \xi \leq \xi_L$):

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{c_0^2(c_1\xi_\Gamma + c_0\eta_\Gamma + d_1)}{(c_1\xi + c_0\eta + d_1)(-c_0^2 + c_1^2)} + \frac{c_1^2(c_0\xi_\Gamma + c_1\eta_\Gamma + d_2)}{(c_0\xi + c_1\eta + d_2)(-c_1^2 + c_0^2)} + 1; \\ \bar{v} &= -\frac{c_0c_1(c_1\xi_\Gamma + c_0\eta_\Gamma + d_1)}{(c_1\xi + c_0\eta + d_1)(-c_0^2 + c_1^2)} - \frac{c_0c_1(c_0\xi_\Gamma + c_1\eta_\Gamma + d_2)}{(c_0\xi + c_1\eta + d_2)(-c_1^2 + c_0^2)}, \end{aligned} \quad (6)$$

где $0 \leq \xi_\Gamma \leq \xi_L, \eta = \eta_\Gamma = 0, \xi_L = \frac{Lu_*}{v}, \bar{u}|_\Gamma = \bar{v}|_\Gamma = 0, c_0 \neq c_1$.

Блазиусом [4, 5] была предложена приближенная постановка задачи об обтекании пластинки вязким потоком несжимаемой жидкости, допускающая удовлетворительное решение задачи повсюду, кроме областей вблизи передней и задней кромок пластинки и позволяющая с достаточной точностью найти сопротивление пластинки. Найдем решение этой задачи, используя выражения (3). Замечая, что напряжения трения на пластинке определяются по формуле $\tau_\Gamma = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \Big|_{y=0}$ (μ – коэффициент динамической вязкости), получим, с учетом (6), следующее выражение:

$$\tau_\Gamma = \mu \frac{u_*^2}{\nu} \left[- \frac{c_0^3}{(-c_0^2 + c_1^2)(c_1 \xi_\Gamma + d_1)} + \frac{c_1^3}{(-c_0^2 + c_1^2)(c_0 \xi_\Gamma + d_2)} \right]_{\eta_\Gamma=0}. \quad (7)$$

Нетрудно видеть, что положив в решении (7) $d_1 = c_0^3$, $d_2 = c_1^3$ в точке $\xi_\Gamma = \eta = 0$ трение равно нулю ($\tau_\Gamma = 0$). В решении Блазиуса в этой точке трение стремится к бесконечности. При $\xi_\Gamma \rightarrow \infty$ трение стремится к нулю.

Найдем местный коэффициент трения (при $\eta = 0$):

$$c_f = \frac{\tau_\Gamma}{(\rho u_*^2 / 2)} = 2 \left[- \frac{c_0^3}{(-c_0^2 + c_1^2)(c_1 \xi_\Gamma + c_0^3)} + \frac{c_1^3}{(-c_0^2 + c_1^2)(c_0 \xi_\Gamma + c_1^3)} \right]. \quad (8)$$

Полное сопротивление трения пластинки длины L , смоченной с двух сторон, будет

$$W_f = 2 \int_0^L \tau_\Gamma dx = 2\mu u_* \left[\frac{c_0^3}{(c_0^2 - c_1^2)c_1} \ln \left| \frac{c_1 \text{Re} + c_0^3}{c_0^3} \right| - \frac{c_1^3}{(c_0^2 - c_1^2)c_0} \ln \left| \frac{c_0 \text{Re} + c_1^3}{c_1^3} \right| \right], \quad (9)$$

где $\text{Re} = \xi_L$ – местное число Рейнольдса.

Коэффициент полного сопротивления трения пластинки запишется

$$C_f = \frac{W_f}{(\rho u_*^2 / 2) S} = 2 \int_0^L \tau_\Gamma dx = \frac{2}{\text{Re}} \left[\frac{c_0^3}{(c_0^2 - c_1^2)c_1} \ln \left| \frac{c_1 \text{Re} + c_0^3}{c_0^3} \right| - \frac{c_1^3}{(c_0^2 - c_1^2)c_0} \ln \left| \frac{c_0 \text{Re} + c_1^3}{c_1^3} \right| \right], \quad (10)$$

где $S = 2L$ – смоченная поверхность.

Для уменьшения параметров и устранения математических особенностей, положим в (10) $c_1 = \sqrt{2}c_0$. Тогда имеем окончательную формулу

$$C_f = \left(\frac{2}{\text{Re}} \right) \left[\left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \ln \left| 1 + \frac{\sqrt{2} \text{Re}}{c_0^2} \right| + 2\sqrt{2} \ln \left| 1 + \frac{\text{Re}}{2\sqrt{2}c_0^2} \right| \right]. \quad (11)$$

Уточним решение (11), воспользовавшись следующим уточненным выражением для трения:

$$\tau_\Gamma = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \Big|_{y=0} = \mu \frac{u_*^2}{\nu} \left(\frac{c_0}{c_1 \xi_\Gamma + d_1} + \frac{c_1}{c_0 \xi_\Gamma + d_2} \right)_{\eta_\Gamma=0}. \quad (12)$$

Положив в решении (12) $d_1 = c_0$, $d_2 = -c_1$ получим, что в точке $\xi_\Gamma = \eta = 0$ трение $\tau_\Gamma = 0$. Полное сопротивление трения пластинки вычисляется по формуле

$$W_f = 2\mu u_* \left(\frac{c_0}{c_1} \ln \left| \frac{c_1 \text{Re} + 1}{c_0} \right| + \frac{c_1}{c_0} \ln \left| 1 - \frac{c_0 \text{Re}}{c_1} \right| \right). \quad (13)$$

Для уменьшения количества параметров в выражении (13), положим $c_1 = mc_0$. Тогда коэффициент полного сопротивления трения для пластинки запишется следующим образом:

$$C_f = \frac{2}{Re} \left(\frac{1}{m} \ln |m Re + 1| + m \ln \left| 1 - \frac{1}{m} Re \right| \right). \quad (14)$$

Проведем анализ полученных формул (11) и (14). В работах [4, 5] приведена формула Блазиуса по расчету коэффициента полного сопротивления трения для пластинки $C_f = \frac{1,328}{\sqrt{Re}}$. Более точной формулой, которая лучше согласуется опытными данными при числах $Re > 10$, является формула, выведенная Го-Юн-хуаем [5]: $C_f = \frac{1,328}{\sqrt{Re}} + \frac{4,18}{Re}$. Сравним их с формулами (11) и (14). Внутренние параметры c_0 и m , входящие в эти формулы, найдем из равенства численных значений формул при каком-либо одном значении числа Re , например, пусть $Re = 4$. В результате имеем $c_0 = 0,451$ и $m = 0,2245$.

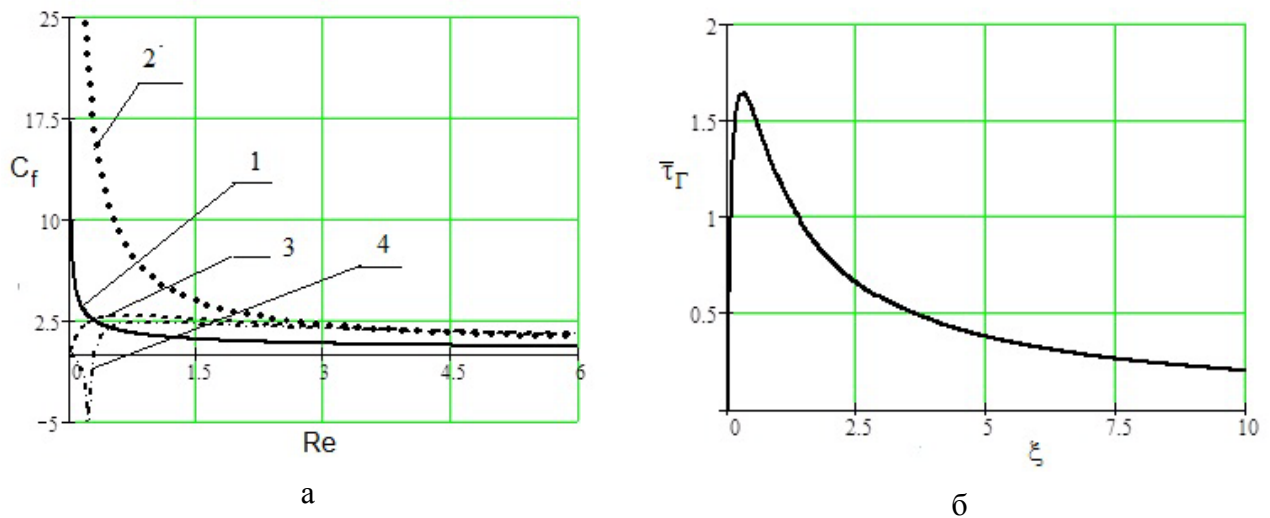


Рис.1. Гидродинамические характеристики при обтекании пластинки: а– зависимость $C_f(Re)$ (1 – по формуле Блазиуса; 2 – по формуле Го-Юн-хуая; 3– по формуле (11); 4 – по формуле (14)); б – распределение безразмерного трения по пластинке

На рис.1,а приведены зависимости $C_f(Re)$, вычисленные по различным формулам. Численный анализ показывает, что разница в значениях коэффициента C_f , рассчитанных по различным формулам при числах $Re > 2$ составляет менее 1 %. Формула (14) имеет особенность при очень малых числах Re и параметр m , входящий в нее, нужно выбирать, только при равенстве значений формул при числах $Re > 3,5$. Формула (11) не имеет никаких особенностей, по сравнению с другими формулами во всем диапазоне чисел Re . Параметр c_0 желательно выбирать из равенства значений формул при малых числах Re (при больших числах Re все формулы дают примерно одинаковый результат, разница в значениях существенно ниже 1 %).

Распределение безразмерного трения по пластинке, вычисленного по формуле (7), показано на рис.1,б. Данная зависимость не имеет никаких

особенностей, в отличие от решения Блазиуса и от решения (12) (особенность решения проявляется в точке $\xi = m$).

Отметим, что допущения, положенные в основу вывода уравнений Навье-Стокса, являются эмпирическими [4, 5], поэтому получаемые аналитические решения нуждаются проверке, которая возможна только путем эксперимента.

В работе [7] показано, что при определенных значениях параметров c_0, c_1, d_1 и d_2 можно получить безвихревое обтекание тел вязким потоком несжимаемой жидкости. Приведем это решение с небольшими изменениями в полярной системе координат:

$$\bar{v}^{\bar{r}} = \sum_{\alpha=1}^N \left[(A \cos \alpha \varphi) / \bar{r}^{\alpha+1} - (B \sin \alpha \varphi) / \bar{r}^{\alpha+1} \right] + \cos \varphi, \quad (15)$$

$$\bar{v}^{\varphi} = \sum_{\alpha=1}^N \left[(A \sin \alpha \varphi) / \bar{r}^{\alpha+1} + (B \cos \alpha \varphi) / \bar{r}^{\alpha+1} \right] - \sin \varphi. \quad (16)$$

Здесь $\bar{v}^r = \frac{v^r}{u_*}, \bar{v}^{\varphi} = \frac{v^{\varphi}}{u_*}, \bar{r} = \frac{ru_*}{\nu}, r \leq R$.

Нетрудно видеть, что решение (15), (16) удовлетворяет уравнению неразрывности

$$(\bar{v}^{\bar{r}})_{\bar{r}} + \bar{v}^{\bar{r}} / \bar{r} + (1/\bar{r}) (\bar{v}^{\varphi})_{\varphi} = 0, \quad (17)$$

где нижние индексы обозначают дифференцирование по этим величинам.

Пример.2. Рассмотрим задачу обтекания вязкой несжимаемой жидкостью кругового цилиндра радиуса R (рис.2). Граничные условия при обтекании цилиндра следующие:

$$\bar{v}^{\bar{r}}|_{\Gamma} = 0, \bar{v}^{\varphi}|_{\Gamma} = 0, \bar{v}^{\bar{r}}|_{\bar{r} \rightarrow \infty} = \cos \varphi, \bar{v}^{\varphi}|_{\bar{r} \rightarrow \infty} = -\sin \varphi. \quad (18)$$

Здесь Γ – граница контура цилиндра.

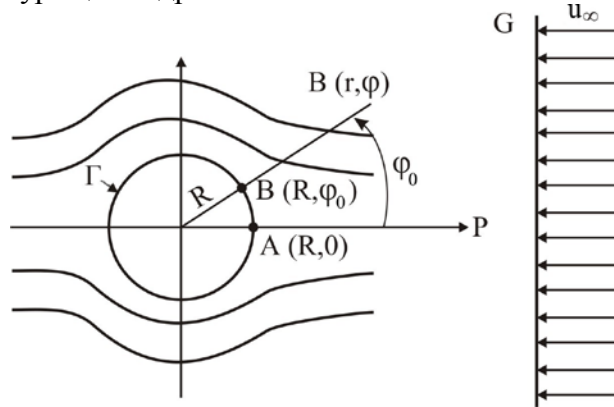


Рис.2. Обтекание кругового цилиндра вязкой несжимаемой жидкостью

При $\alpha = 1$ (первое приближение) приведем решение, удовлетворяющее граничным условиям при обтекании цилиндра вязкой жидкостью. Рассмотрим решение в окрестности произвольной точки $\varphi \equiv \varphi_0$, где $\varphi_0 = 0$ – лобовая критическая точка. Полярная ось проходит через центр окружности, при этом $\bar{r}|_{\Gamma} = Re = Ru_* / \nu$. Из решения (15), (16) определим коэффициенты A и B на поверхности цилиндра в произвольной фиксированной точке $\varphi \equiv \varphi_0$. Полагая $\bar{v}^{\bar{r}} = 0, \bar{v}^{\varphi} = 0$ на границе Γ получим:

$$A \cos \varphi_0 / Re^2 - B \sin \varphi_0 / Re^2 = -\cos \varphi_0, A \sin \varphi_0 / Re^2 + B \cos \varphi_0 / Re^2 = \sin \varphi_0.$$

Из решения данной системы найдем $A = -Re^2 \cos 2\varphi_0$, $B = Re^2 \sin 2\varphi_0$. Тогда получим точное решение в скоростях, удовлетворяющее тождественно заданным граничным условиям (при $-\pi < \varphi_0 < \pi$, $\varphi \equiv \varphi_0$):

$$\bar{v}^{\bar{r}} = -Re^2 \cos(\varphi - 2\varphi_0) / \bar{r}^2 + \cos \varphi, \quad \bar{v}^{\varphi} = -Re^2 \sin(\varphi - 2\varphi_0) / \bar{r}^2 - \sin \varphi. \quad (19)$$

Безразмерное трение ($\bar{\tau}^{\bar{r}\varphi} = \tau^{r\varphi} / (\rho u_*^2 / 2)$) определим по формуле

$$\bar{\tau}^{\bar{r}\varphi} = \bar{r}(\bar{v}^{\varphi} / \bar{r})_{\bar{r}} + (1/\bar{r})(\bar{v}^{\bar{r}})_{\varphi} = -8Re^2 \sin(\varphi - 2\varphi_0) / \bar{r}^3. \quad (20)$$

Распределение давления на цилиндре найдем из первых двух уравнений Навье-Стокса, записанных в цилиндрической системе координат в безразмерном виде, подставляя в них выражения (19) для скоростей $\bar{v}^{\bar{r}}$ и $\bar{v}^{\varphi}$:

$$\bar{v}^{\bar{r}}(\bar{v}^{\bar{r}})_{\bar{r}} + (\bar{v}^{\varphi} / \bar{r})(\bar{v}^{\bar{r}})_{\varphi} - (\bar{v}^{\varphi})^2 / \bar{r} = -\bar{P}_{\bar{r}} + [\Delta_1 \bar{v}^{\bar{r}} - \bar{v}^{\bar{r}} / \bar{r}^2 - (2/\bar{r}^2)(\bar{v}^{\varphi})_{\varphi}],$$

$$\bar{v}^{\bar{r}}(\bar{v}^{\varphi})_{\bar{r}} + (\bar{v}^{\varphi} / \bar{r})(\bar{v}^{\varphi})_{\varphi} + (\bar{v}^{\bar{r}} \bar{v}^{\varphi}) / \bar{r} = -(1/\bar{r})\bar{P}_{\varphi} + [\Delta_1 \bar{v}^{\varphi} - \bar{v}^{\varphi} / \bar{r}^2 + (2/\bar{r}^2)(\bar{v}^{\bar{r}})_{\varphi}],$$

где $\Delta_1 = \partial_{\bar{r}\bar{r}} + (1/\bar{r}^2)\partial_{\varphi\varphi} + (1/\bar{r})\partial_{\bar{r}}$. Данный подход был ранее реализован (для определенного класса аналитических решений) для плоского случая с учетом инерционных членов, как для стационарного, так и для нестационарного течений в работах [7, 11].

В заключении отметим, что предложенные аналитические решения уравнений Навье-Стокса-Бринкмана могут быть использованы в практических задачах аэрогидродинамики, а также в технологических задачах по изготовлению деталей из полимерных композиционных материалов методом пропитки под давлением.

Список литературы

1. Дружинин Г.В. Об одном аналитическом решении уравнений Навье-Стокса-Бринкмана применительно к методам трансферного формования / Г.В. Дружинин, Н.М. Бодунов, П.В. Бреховских // Известия вузов. Авиационная техника. – 2015. – №4. С.105 – 110.
2. Brinkman H.C. On the permeability of media consisting of closely packed porous particles / H.C. Brinkman // Appl. Scient. Res. A 1. – 1947. P.81 – 86.
3. Бабкин В.А. Исследование относительных движений вязкой жидкости и пористой среды с использованием уравнения Бринкмана / В.А. Бабкин // Известия РАН. МЖГ. – 2002. – №4. С.90– 97.
4. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя / Г. Шлихтинг. – М.: Наука. – 1974. – 711 с.
5. Лойцянский Л.Г. Ламинарный пограничный слой / Л.Г. Лойцянский. – М.: Наука. – 1962. – 480 с.
6. Дружинин Г.В. Базисные функции в приближенных решениях краевых задач / Г.В. Дружинин, И.М. Закиров, Н.М. Бодунов. – Казань: Изд-во Фэн. – 2000. – 376 с.
7. Дружинин Г.В. Решение прикладных задач авиационной техники на основе симметрии дифференциальных уравнений в частных производных / Г.В. Дружинин, Н.М. Бодунов. – Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та. – 2012. – 288 с.
8. Эйнштейн А. Эволюция физики / А. Эйнштейн, Л. Инфельд. – М.: Гостехиздат. – 1965. – 279 с.
9. Ландау Л.Д. Механика. Т.1. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука. – 1973. – 208 с.
10. Киселев П.Г. Гидравлика: Основы механики жидкости. – М.: Энергия. – 1980. – 360 с.
11. Бодунов Н.М. Моделирование в задачах производства летательных аппаратов / Н.М. Бодунов, Г.В. Дружинин. Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та. – 2015. – 328 с.

ВЛИЯНИЕ НЕБЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ НА ДИАГРАММЫ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ ИЗИНГОВСКОГО МАГНЕТИКА

Ж.В.Дударева¹

¹ФГБОУ ВО ХГУ им. Н.Ф. Катанова, dudareva82@gmail.com

На сегодняшний день известно множество органических магнитных соединений с сильной одноосной анизотропией и слабым межмолекулярным взаимодействием [1-3]. Это открывает возможность детального исследования магнитных свойств изолированных низкоразмерных элементов, включая одномерные изинговские цепочки. На сегодняшний день синтезировано несколько десятков веществ типа $[Mn_2^{III}(saltmen)_2Ni^{II}(pao)_2(py)_2](ClO_4)_2$, состоящих из одномерных ферромагнитных цепочек [1]. Информация о магнитной структуре и свойствах низкоразмерных магнитных систем может быть получена в ходе компьютерного эксперимента.

В настоящей работе в рамках обобщенной модели Изинга разработан и реализован метод построения диаграмм основных состояний при учете многочастичного взаимодействия. Построены диаграммы стабильности фаз в пространстве энергетических параметров при температуре абсолютного нуля. Комплекс программ позволяет строить диаграммы в следующих возможных плоскостях: (J_2, H) , (J_3, H) , (J_{1-4}, H) . Также исследовано влияние энергии взаимодействия вторых соседей J_2 и энергии четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} на вид диаграмм основных состояний в модели с периодическими граничными условиями.

Модель Изинга имеет много модификаций, одной из самых известных является - магнетик, где спины размещены на одномерной решетке, при этом спины имеют два направления по полю или против поля [4]. В работе рассматриваются периодические граничные условия (ПГУ). При таких граничных условиях правый конец цепочки соединяется с левым и цепочку можно представить как бесконечную или в виде кольца. Каждая точка диаграммы основных состояний определяет конфигурацию (методом Монте-Карло [5]), соответствующую минимальной энергии при нулевой температуре. Магнетику из N узлов соответствует 2^N возможных конфигураций (магнитных структур). Затем сравниваем эти энергии и, конфигурации имеющие наименьшую энергию соответствуют точке на диаграмме основных состояний. Энергия конфигурации в безразмерных единицах:

$$E = \frac{\varepsilon}{|j_1|} = -H \sum_{i=1}^N S_i \pm \left(\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} + S_N S_1 \right) - J_2 \left(\sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} + \sum_{i=1}^2 S_{N-2+i} S_i \right) - J_3 \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3} + \sum_{i=1}^3 S_{N-3+i} S_i \right) - J_{1-4} \left(\sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+1} S_{i+2} S_{i+3} + S_{N-2} S_{N-1} S_N S_1 + S_{N-1} S_N S_1 S_2 + S_N S_1 S_2 S_3 \right) \quad (1)$$

где E и ε - энергия магнетика в безразмерных и энергетических единицах соответственно, j_1 - энергия взаимодействия между ближайшими соседями ($j_1 > 0$), J_2 и J_3 - безразмерные энергии взаимодействия вторых и третьих соседей соответственно, J_{1-4} - безразмерная энергия четырехчастичного взаимодействия, H - безразмерная проекция напряженности внешнего магнитного поля на выбранную ось, N - количество атомов (узлов), i - номер узла, а S_i - спиновая переменная, принимающая значение +1 или -1.

Вид конфигураций зашифрован в числе шестнадцатеричной системы счисления следующим образом: если проекция безразмерного вектора S_i спинового магнитного момента узла на некоторую ось положительна, то в шифре сопоставляем этому уз-

лу цифру 1, если отрицательна то цифру 0. Далее, для уменьшения количества разрядов, переводим это число в шестнадцатеричную систему счисления.

Начиная с размера системы, равного четырем узлам, наблюдается 4 вида диаграмм. Обозначим вид конфигурации t , тогда определить к какому виду относится диаграмма, для числа узлов N можно с помощью формулы:

$$t = N - 4Z, \\ (2N-1)$$

где Z – число, равное целой части дроби $\frac{8}{(2N-1)}$.

Результаты работы можно разделить на три части. В первой части [6] рассмотрены диаграммы основных состояний энергии J_2 от магнитного поля H , вторую часть диаграммы $J_3 - H$ рассмотрим непосредственно в данной работе, особенности третьей будут рассмотрены позднее $J_{1-4} - H$. Итак, рассмотрим плоскость энергетических параметров, по одной стороне которой отложена проекция внешнего магнитного поля, а по другой – энергия обменного взаимодействия между третьими соседями. Данная плоскость разбивается на области, в которой стабильна определенная конфигурация магнетика или несколько возможных конфигураций при абсолютном нуле. При изменении внешнего поля происходят магнитные переходы при пересечении линии стабильности фаз. В результате расчетов вся плоскость разбивается на области, в которых стабильна какая-то определенная магнитная фаза. При рассмотрении первой части менялись значения энергии взаимодействия третьих соседей $J_2 = 0; 0,5; 1$ и энергии четырехчастичного взаимодействия $J_{1-4} = 0; 0,5; 1$.

Особенностью данной части является, во-первых, то, что построение диаграмм начинаем с $N = 6$, т.к., предшествующие дублировали друг друга. Во-вторых, трудность в классификации вида диаграмм.

Диаграммы для количества узлов равных 9, 13 и т.д., относятся к первому виду ($t=1$). Они разбиты на четыре области (рис.1а). Две из четырех областей содержат ферромагнитные конфигурации (для $N = 9$: 00_{16} ($\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$) и $1F_{16}$ ($\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$)), две следующие имеют также ферромагнитный порядок расположения магнитных моментов с перемещением кластера из трех спинов (рис.1б).

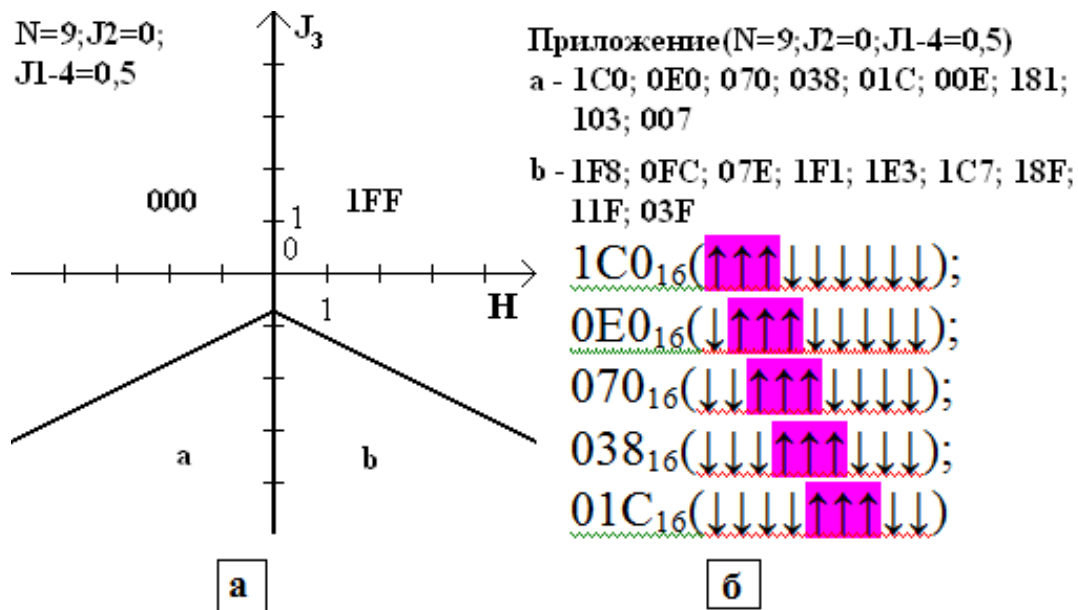


Рис.1 Диаграммы основных состояний $J_2 - H$ первого типа ($j_1 > 0$).

Анализ диаграмм первого вида, позволяет нам сделать следующие выводы: с ростом энергии вторых соседей $J_2 = 0; 0,5; 1$, при фиксированном значении J_{1-4} наблюдается сдвиг границ на $1/4$ вниз, аналогично с ростом энергии четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} . Это означает, что учет взаимодействия вторых соседей и четырехчастичного взаимодействия расширяют ферромагнитную фазу на диаграммах основных состояний.

Диаграммы для количества узлов равных 6, 10, 14 и т.д., относятся ко второму виду ($t=2$). Они разбиты от трех до семи областей. Две верхние области содержат ферромагнитные конфигурации (для $N = 10$: 000_{16} ($\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$) и $3FF_{16}$ ($\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$)), две следующие области а и б имеют ферромагнитный порядок расположения магнитных моментов, с перемещение кластера с трех спинов (рис.2д). Области с и д - ферримагнитные с некомпенсированным магнитным моментом, которые можно рассматривать как переходные между основными конфигурациями. Последняя область имеет антиферромагнитный порядок $2AA_{16}, 155_{16}$, (рис.2б). Таким образом, при энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 1$, становится возможен прямой переход антиферромагнетик-ферромагнетик.

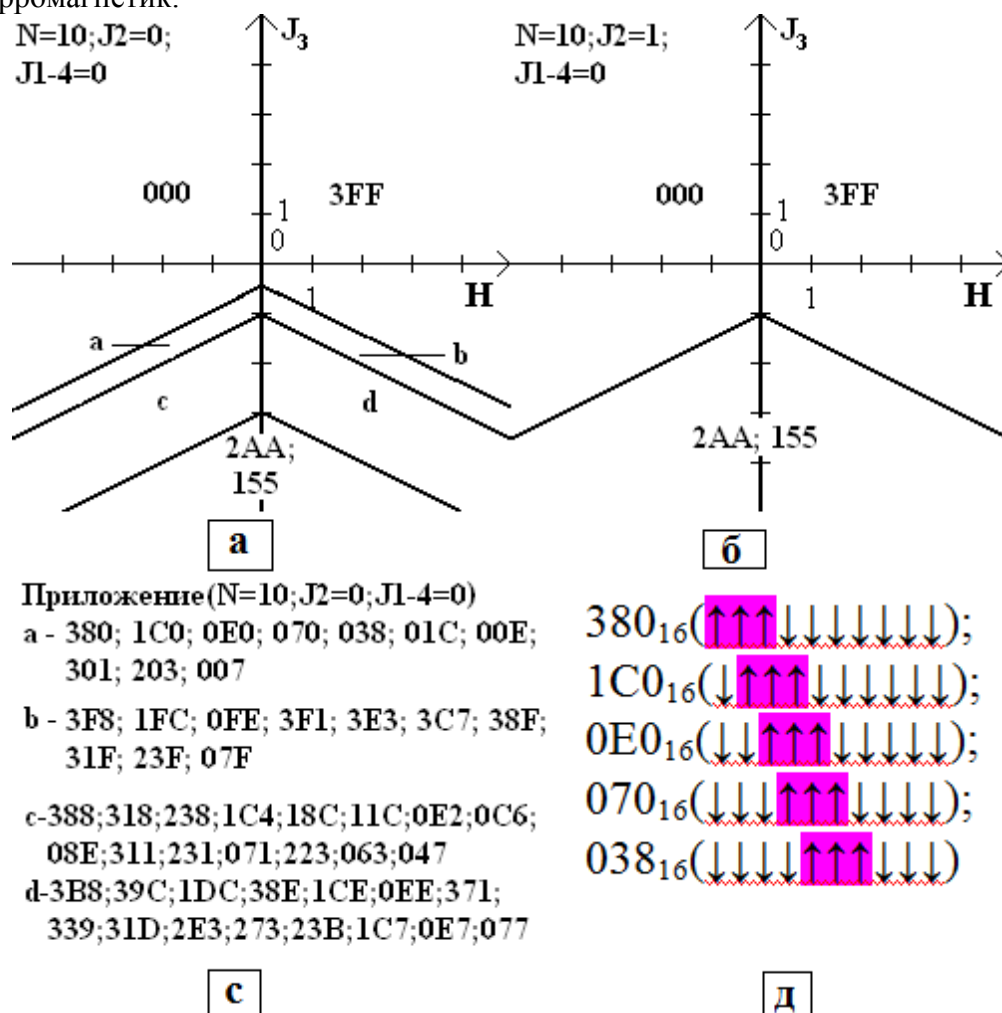


Рис.2 Диаграммы основных состояний $J_3 - H$ второго типа ($j_1 > 0$).

Особенностью данного вида является то, что при размере системы $N = 6$, наблюдается всего три области, т.е., прослеживается факт образования дополнительных областей, в пределах одного вида. Удивителен еще и тот факт, что при росте зна-

чений энергии взаимодействия вторых соседей $J_2 = 0; 0,5; 1$ наблюдается пропадание сразу четырех областей, таким образом, взаимодействие между вторыми соседями расширяет антиферромагнитный порядок (рис.2б).

Диаграммы третьего вида ($t=3$), соответствующие размерам 7, 11, 15 и т.д. узлов, разбиты на четыре до шести области. Две из них содержат ферромагнитные конфигурации (для $N = 7$: 00_{16} ($\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$) и $7F_{16}$ ($\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$)), области а и б являются ферромагнитными, с перемещением кластера с трех проекций спинов, как в предыдущем случае. С ростом числа стабилизируются переходные антиферромагнитные фазы с и d.

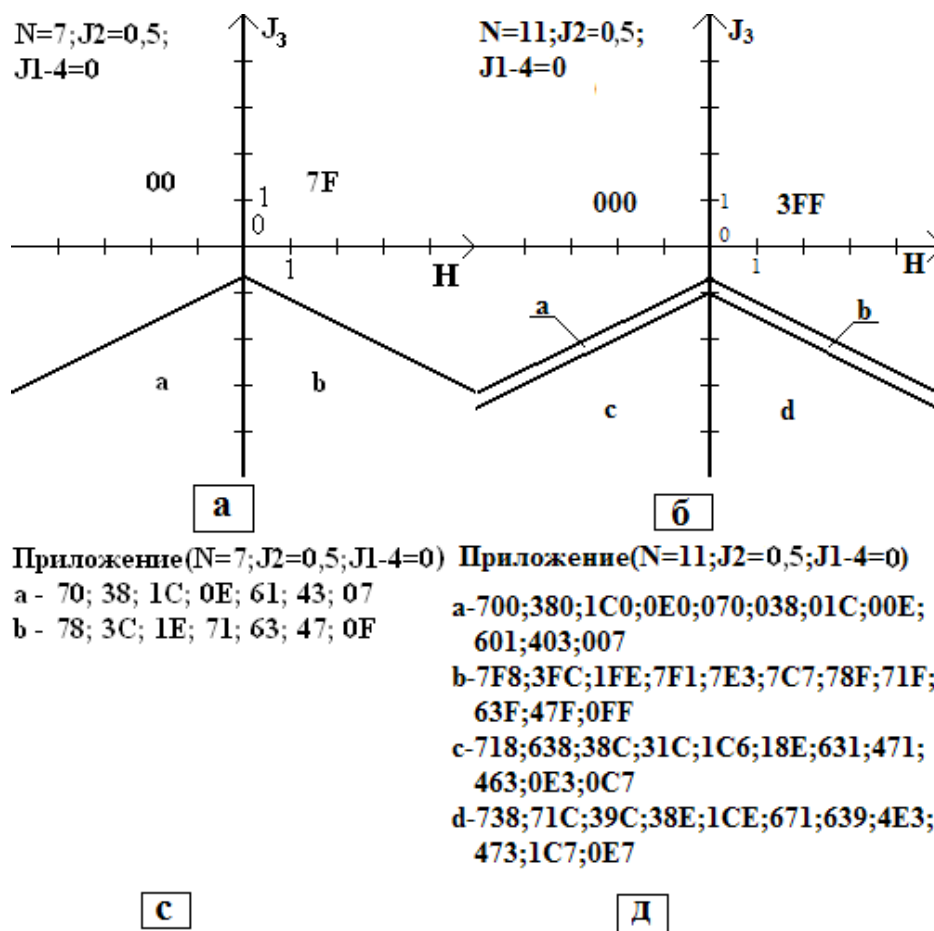


Рис.3 Диаграммы основных состояний $J_3 - H$ третьего типа ($j_1 > 0$).

Анализ диаграмм третьего вида, позволяет нам сделать следующие выводы: с ростом энергии третьих соседей $J_2 = 0; 0,5; 1$, при фиксированном значении энергии четырехчастичного взаимодействия J_{1-4} наблюдается сдвиг границ на $\frac{1}{4}$ вниз, аналогично при росте J_{1-4} .

Диаграммы четвертого вида ($t=4$), соответствующие размерам 8, 12 и т.д. узлов, разбиты на три области. Как и в предыдущем случае две верхние из них содержат ферромагнитные конфигурации (для $N = 8$: 00_{16} ($\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$) и FF_{16} ($\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$)), последняя является антиферромагнитной $AA_{16}, 55_{16}$. Стоит заметить, что с ростом $J_{1-4} = 0; 0,5; 1$ вид диаграмм не изменяется, в частности отсутствуют какие либо сдвиги границ.

Таким образом, в работе проведена классификация диаграмм основных состояний, которые повторяются при увеличении размеров системы, а также показана возможность прогнозирования вида диаграмм основных состояний в модели одномерного изинговского магнетика с периодическими граничными условиями. Следует отметить, что с увеличением числа узлов стабильность антиферромагнитных фаз увеличивается, можно проследить появление новых областей. Четырехчастичное взаимодействие смещает границы ферромагнитной области вниз, тем самым расширяют ферромагнитную фазу на диаграммах основных состояний. Показана возможность прямого фазового перехода антиферромагнетик- ферромагнетик при увеличении энергии взаимодействия вторых соседей. Результаты исследования могут быть использованы для определения возможности и условий магнитных переходов. Важно отметить, что симметричность относительно изменения знака проекции напряженности магнитного поля для диаграмм в трех возможных плоскостях (J_2, H) , (J_3, H) , (J_{1-4}, H) . Таким образом, зная конфигурации для одного знака проекции H можно определить конфигурации для противоположного знака.

Список литературы

1. Кудасов Ю.Б. Фрустрированные решетки изинговских цепочек / Ю.Б. Кудасов, А.С. Коршунов, В.Н. Павлов, Д.А. Маслов // УФН. – М, 2012, Т.182, №12. — С. 1249-1273.
2. Афремов Л.Л. Магнитное упорядочение в наносистемах с различными законами обменного взаимодействия [Электронный ресурс]: учебное пособие / Л.Л. Афремов, В.И. Белоконь, К.В. Нефедев. – Электрон. дан. – Владивосток: Дальневост. федер. ун-т, 2014. – Режим доступа: <http://www.tef-dvfu.ru/index.php/26-magn-ord-magn-nanosys>.
3. Губин С.П. Магнитные наночастицы: методы получения, строение и свойства / С.П. Губин, Ю.А. Кокшаров, Г.Б. Хомутов, Г.Ю. Юрков // Успехи химии. — 2005—Т. 74 — № 6. — С. 539-574.
4. Удодов В.Н. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах / В.Н.Удодов, А.И.Потекаев, А.А.Попов и др. // ред. В.Н.Удодов. — Абакан: Издательство Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова. — 2008. — 135 с.
5. Методы Монте-Карло в статистической физике / Под ред. К. Биндера. М.: Мир, (1982). 400 с.
6. Дударева Ж.В. Диаграммы основных состояний изинговского квазиодномерного магнетика периодических граничных условиях / Ж.В. Дударева, Д.В. Спирин. // Моделирование неравновесных систем. - Материалы XI Всероссийского семинара. - Красноярск: ИВМ СО РАН, 2008. – С. 77-79.

ВЛИЯНИЕ НЕОДНОРОДНОСТИ НАНОЧАСТИЦ И ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ НА ДИСПЕРСИОННЫЕ СВОЙСТВА ОПТИЧЕСКИХ ПЛАЗМОННЫХ ВОЛНОВОДОВ⁵

В.И. Закомирный¹, И.Л. Рассказов¹, С.В. Карпов^{1,2,3}, С.П. Полютов¹

¹Сибирский федеральный университет, Лаборатория Нелинейной Оптики и Спектроскопии, vi.zakomirnyi@gmail.com

²Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского Отделения РАН,

³Сибирский государственный аэрокосмический университет им. академика М.Ф. Решетнева

Исследования оптических свойств плазмонных металлических наночастиц различной формы, наряду с образованными ими периодическими цепочечными структурами, привлекают повышенный интерес в связи с возможностью использования этих объектов в качестве функциональных элементов оптических микросхем нового поколения [1,2]. Применение таких микросхем является перспективным во многих областях науки и техники. Отметим, что базовыми компонентами вышеупомянутых микросхем являются оптические плазмонные волноводы (ОПВ), представляющие собой 1D или 2D цепочки из наночастиц, обладающих плазмонным резонансом [3 – 6]. При исследовании волноводных особенностей ОПВ первостепенную значимость приобретают их дисперсионные свойства, позволяющие оценить полосу пропускания волновода, а также скорость распространения возбуждения. В настоящее время существует несколько подходов к определению дисперсионных зависимостей 1D цепочки из наночастиц [7,8], однако наиболее оптимальным с точки зрения трудоемкости и универсальности является метод спектрального разложения, впервые предложенный в работе [9]. Ключевым преимуществом данного метода является одновременное вычисление дисперсионного соотношения и добротности собственных мод для различных типов плазмонных цепочек, в том числе расположенных на однородных [10] или слоистых подложках [11], для 2D структур [9] или цепочек, состоящих из наночастиц конфигурации ядро-оболочка [12].

Следует также подчеркнуть, что подавляющее большинство работ по оптике наноструктур посвящено исследованию волноводных свойств периодических структур из наночастиц, расположенных в однородной среде или в вакууме. Однако практическое использование периодических структур с заданной геометрией в качестве волноводов неизбежно предполагает их размещение на технологических подложках. В этом случае актуальным является исследование влияния технологической подложки на оптические и волноводные свойства цепочек из плазмонных наночастиц, которые на ней расположены.

Таким образом, настоящая работа нацелена на исследование дисперсионных свойств ОПВ, находящихся в неоднородной среде (в частности, на технологической подложке), а также ОПВ, состоящих из неоднородных наночастиц конфигурации ядро-оболочка.

Схематическое изображение ОПВ, исследованных в настоящей работе, представлено на Рис.1. ОПВ состоят из наночастиц в форме сфер радиуса a (Рис.1А) или вытянутых сфероидов с малой и большой полуосями a и b , соответственно (Рис.1Б).

⁵ Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ Сибирскому федеральному университету на выполнение НИР в 2014-2016 годах (Задание №. 1792) и проекта СО РАН № II.2P (0358-2015-0010)

Межцентровое расстояние d выбиралось из условия $d = 3a$ для обеспечения адекватности дипольного приближения, используемого в расчётах. ОПВ располагаются в полупространстве, где ϵ_h и ϵ_s – диэлектрические проницаемости окружающей ОПВ среды и технологической подложки, соответственно (см. Рис.1).

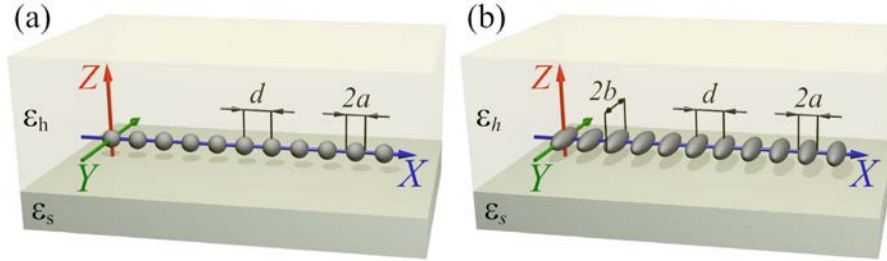


Рис.1. Схематическое изображение ОПВ, исследованных в работе: (а) ОПВ из сферических частиц; (б) ОПВ из сфероидальных наночастиц.

Перейдём к описанию физической модели, использованной в расчетах. В рамках дипольного приближения электромагнитное взаимодействие между наночастицами, технологической подложкой и внешним возбуждением $\mathbf{E}^{\text{ext}}$ описывается уравнением связанных диполей:

$$\frac{1}{\epsilon_h} \sum_m \left[\frac{1}{\alpha} \delta_{nm} \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{G}}_{nm}(\omega) \right] \mathbf{p}_m = \mathbf{E}_n^{\text{ext}}, \quad (1)$$

где α – поляризуемость наночастицы; δ_{nm} – дельта Кронекера; $\hat{\mathbf{I}}$ – 3×3 единичный тензор; $\hat{\mathbf{G}}_{nm}(\omega)$ – 3×3 тензор Грина, описывающий электрическое поле, созданное в точке $\mathbf{r}_m$ диполем, расположенным в $\mathbf{r}_n$ и осциллирующим с частотой ω ; $\mathbf{p}_m$ – дипольный момент, наводимый на m -ой частице.

В случае бесконечной цепочки, решением уравнения (1), в соответствии с теоремой Блоха, будут следующие соотношения:

$$\begin{cases} \mathbf{E}_n^{\text{ext}} = \mathbf{E}^{\text{ext}} e^{iqnd} \\ \mathbf{p}_m = \mathbf{p} e^{iqmd} \end{cases}, \quad (2)$$

где q – квазиволновой вектор Блоховской волны.

Таким образом, уравнение (1) примет вид:

$$\frac{1}{\epsilon_h} \left[\frac{1}{\alpha} \hat{\mathbf{I}} - \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{G}}_{1m}(\omega) e^{iqmd} \right] \mathbf{p} = \mathbf{E}^{\text{ext}}. \quad (3)$$

Основная идея метода спектрального разложения состоит в том, чтобы охарактеризовать дисперсионные соотношения цепочки плазмонных наночастиц, используя обратную эффективную поляризуемость системы [9,10]:

$$\frac{1}{\tilde{\alpha}} = \frac{1}{\alpha} \hat{\mathbf{I}} - \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{G}}_{1m}(\omega) e^{iqmd}. \quad (4)$$

При возбуждении одиночной наночастицы внешним полем $\mathbf{E}^{\text{ext}}$, на ней наводится дипольный момент $\mathbf{p}$, прямо пропорциональный её поляризуемости α :

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}^{\text{ext}}, \quad (5)$$

причем мнимая часть комплексной поляризуемости α характеризует степень затухания поля в частице. Таким образом, используя аналогию с выражением (2), можно утвер-

ждать, что мнимая часть обратной эффективной поляризуемости $\text{Im}[\tilde{\alpha}^{-1}]$ будет характеризовать отклик системы на внешнее возбуждение, иными словами, добротность собственной моды, распространяющейся в цепочке.

Для вычисления поляризуемости α сферических частиц использовалась теория Ми. В случае сфероидальных частиц стандартное выражение для дипольной поляризуемости модифицировалось в соответствии с работой [14], результаты которой были верифицированы с использованием точного метода конечных разностей во временной области для серебряных и золотых сфероидальных наночастиц.

В настоящей работе рассматривались цепочки из Ag наночастиц над металлической (Ag) или диэлектрической (Si) подложкой в кремниевой среде ($\varepsilon_h = 2.25$), или в вакууме ($\varepsilon_h = 1.00$). Расстояние между осью симметрии волновода и поверхностью подложки $H = 50$ нм для Ag подложки, или $H = 25$ нм для Si подложки. Радиус сферической наночастицы в цепочке во всех случаях $a = 25$ нм. Межцентровое расстояние принималось равным $d = 3a = 75$ нм. Для моделирования были выбраны цепочки, состоящие из $N = 1000$ наночастиц. В качестве сфероидов была выбрана конфигурация вытянутых сфероидов, оси симметрии которых коллинеарны оси Y (Рис.1).

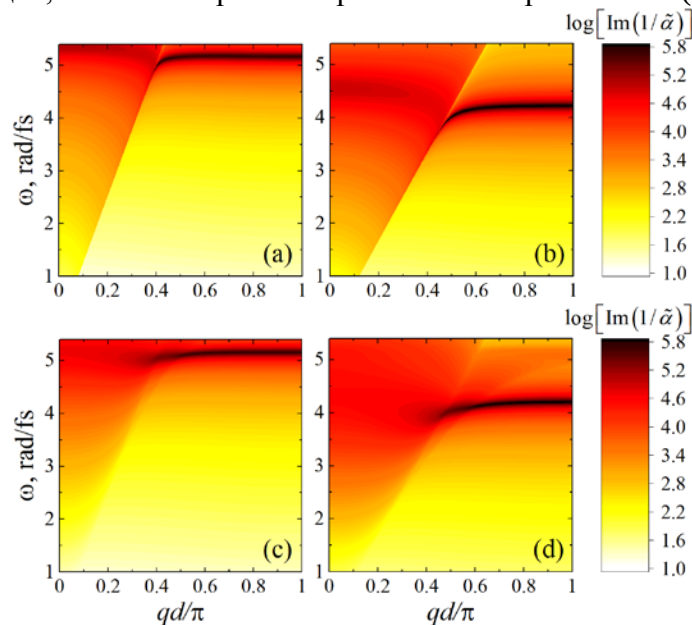


Рис.2. Дисперсионные соотношения линейной плазмонной цепочки из сферических наночастиц в однородной среде: (а) вакуум; (б) кремний; и над Ag подложкой: (в) в вакууме; (г) в кремниевой среде. Поляризация излучения направлена вдоль оси Y .

Дисперсионные соотношения ОПВ из наносфер, расположенных как в однородной среде, так и на технологической подложке, изображены на Рис.2. Видно, что Ag подложка несущественным образом влияет на дисперсионные свойства ОПВ, в большей степени внося свой вклад вблизи световой линии, где добротность мод крайне мала. Однако при увеличении значения ε_h , центральная частота полосы пропускания ОПВ смещается с $\omega = 5$ рад/фс до $\omega = 4$ рад/фс для вакуума и кварца, соответственно.

Перейдем к исследованию дисперсионных свойств ОПВ из сферических наночастиц конфигурации ядро-оболочка. В качестве ядра был выбран Si, в качестве оболочки – Ag. При этом рассматривались ОПВ из наночастиц с различными значениями запол-

няющего фактора $f = (a_c / a)^3$, где a_c – радиус диэлектрического ядра. Напомним, что $a = 25$ нм во всех случаях. Из Рис.3 видно, что при увеличении значения f , влияние Ag подложки усиливается. Так, при $f = 0.125$, происходит разрыв дисперсионной кривой в области $qd / \pi = 0.8$, таким образом, при данных условиях возникает гибридная мода, распространяющаяся одновременно и в цепочке и в Ag подложке.

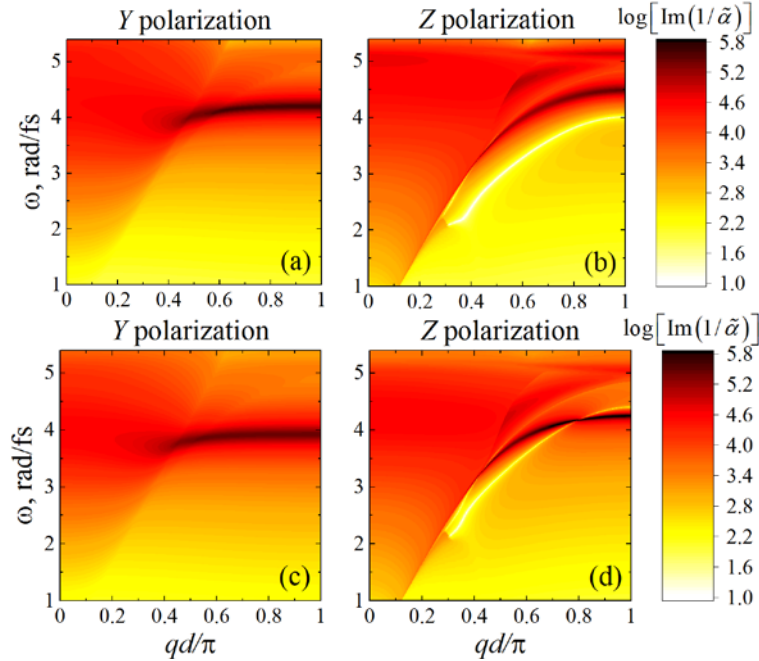


Рис.3. Дисперсионные соотношения ОПВ из сферических наночастиц конфигурации ядро-оболочка (с Si ядром и Ag оболочкой) в Si среде над Ag подложкой. Расчеты выполнены при различных соотношениях заполняющего фактора: $f = 0.001$ (a,b) и $f = 0.125$ (c,d) и для различных поляризаций излучения: вдоль оси Y (a,c) и вдоль оси Z (b,d)

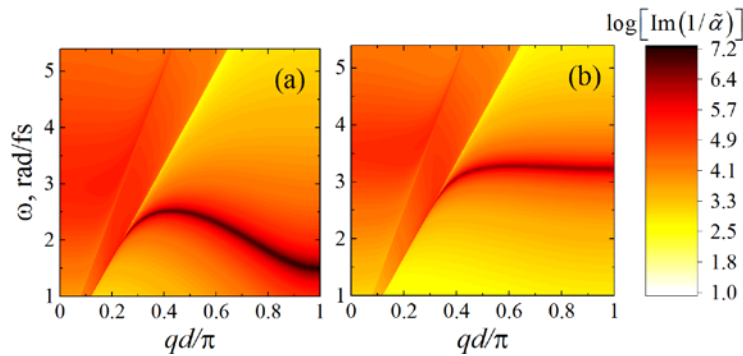


Рис.4. Дисперсионные соотношения линейной плазмонной цепочки из сфероидальных однородных серебряных частиц с различными значениями соотношения полуосей: $a / b = 0.3$ (a) и $a / b = 0.5$ (b) над Ag подложкой в кварцевой среде ($\epsilon_h = 2.25$) для поляризации излучения, направленной вдоль оси Y.

Перейдем, наконец, к исследованию дисперсионных свойств ОПВ из сфероидальных наночастиц (Рис.4). Видно, что данная конфигурация ОПВ выгодно отличается от ОПВ из сферических частиц (Рис.2) или сферических частиц «ядро-оболочка»

(Рис.3). Так, для сфероидальных частиц максимальное значение эффективности дисперсионной моды составляет порядка $\log[\text{Im}(1/\tilde{\alpha})] = 7.2$ против $\log[\text{Im}(1/\tilde{\alpha})] = 5.8$ для сферических наночастиц с аналогичными материалами подложки и среды. Кроме того, при $a/b = 0.3$, дисперсионная кривая приобретает существенный наклон, что приводит к увеличению групповой скорости распространения возбуждения.

Таким образом, в настоящей работе было показано, что для выбранной конфигурации ОПВ, наличие технологической подложки незначительным образом влияет на их дисперсионные свойства. Однако изменение показателя преломления окружающей среды приводит к существенному смещению полосы пропускания ОПВ. Кроме того, ОПВ, состоящие из наночастиц конфигурации «ядро-оболочка» обладают возможностью передачи гибридных, связанных мод «ОПВ-подложка» на определенных частотах.

Список литературы

1. Maier S.A. Optical pulse propagation in metal nanoparticle chain waveguides / S.A. Maier, P.G. Kik, H.A. Atwater // *Physical Review B*. – 2003. – V.67. P.205402.
2. Maier S.A. Local detection of electromagnetic energy transport below the diffraction limit in metal nanoparticle plasmon waveguide / S.A. Maier, P.G. Kik, H.A. Atwater, S. Meltzer, E. Harel, B.E. Koel, A.A.G. Requicha // *Nature Materials*. – 2003. – V.2. P.229 – 232.
3. Rasskazov I.L. Waveguiding properties of short linear chains of nonspherical metal nanoparticles / I.L. Rasskazov, S.V. Karpov, V.A. Markel // *Journal of the Optical Society of America B*. – 2014. – V.31. P.2981 – 2989.
4. Rasskazov I.L. Surface plasmon polaritons in curved chains of metal nanoparticles / I.L. Rasskazov, S.V. Karpov, V.A. Markel // *Physical Review B*. – 2014. – V.90. P.075405.
5. Rasskazov I.L. Nondecaying surface plasmon polaritons in linear chains of silver nanospheroids / I.L. Rasskazov, S.V. Karpov, V.A. Markel // *Optics Letters*. – 2013. – V.38. P.4743 – 4746.
6. Rasskazov I.L. Transmission and spectral properties of short optical plasmon waveguides / I.L. Rasskazov, S.V. Karpov, V.A. Markel // *Optics and Spectroscopy*. – 2013. – V.115. P.666 – 674.
7. Weber W.H. Propagation of optical excitations by dipolar interactions in metal nanoparticle chains / W.H. Weber, G.W. Ford // *Physical Review B*. – 2004. – V.70. P.125429.
8. Govyadinov A.A. From slow to superluminal propagation: Dispersive properties of surface plasmon polaritons in linear chains of metallic nanospheroids / A.A. Govyadinov, V.A. Markel // *Physical Review B*. – 2008. – V.78. P.035403.
9. Fung K.H. Plasmonic modes in periodic metal nanoparticle chains: a direct dynamic eigenmode analysis / K.H. Fung, C.T. Chan // *Optics Letters*. – 2007. – V.32. P.973 – 975.
10. Compaijen P.J. Engineering plasmon dispersion relations: hybrid nanoparticle chain - substrate plasmon polaritons / P.J. Compaijen, V.A. Malyshev, J. Knoester // *Optics Express*. – 2015. – V.23. P.2280.
11. Dong J.-W. Direct eigenmode analysis of plasmonic modes in metal nanoparticle chain with layered medium / J.-W. Dong, Z.-L. Deng // *Optics Letters*. – 2013. – V.38. P.2244 – 2246.
12. Ling C. Tunable hybridization in metal nanoshell chains / C. Ling, M. Zheng, K. Yu // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2011. – V.23. P.105304.
13. Kuwata H. Resonant light scattering from metal nanoparticles: Practical analysis beyond Rayleigh approximation / H. Kuwata, H. Tamaru, K. Esumi, K. Miyano // *Applied Physics Letters*. – 2003. – V.83. P.4625.

РАЗВИТИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ГРАФАХ В ВИДЕ МНОГОКОНТУРНЫХ СХЕМ ИЛИ ДЕРЕВЬЕВ

Каганович Б.М., Зароднюк М.С., Якшин С.В.

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН,
thermo@isem.sei.irk.ru, max@isem.sei.irk.ru, s.yakshin@isem.sei.irk.ru

Равновесное моделирование на графах стало одной из основных составляющих ведущихся в ИСЭМ термодинамических исследований почти сразу после начала их проведения. Его результаты излагались в [1-5] и уже обсуждались на семинарах по моделированию неравновесных систем [6,7]. В данном докладе делается попытка переосмысления содержания графического анализа в связи с все большим смещением направленности обсуждаемых работ в области равновесной термодинамики от построения отдельных моделей в сторону преобразования этой дисциплины в единую замкнутую теорию состояний и траекторий их достижения, распространяемую на консервативные и диссипативные системы, явления самоорганизации и деградации.

Изменение роли и смысла графической составляющей в развитии термодинамического моделирования полезно сопоставить с аналогичными процессами в других физических теориях и науке в целом. Геометрия стала первым по времени из используемых в классической механике разделов математики. Выводя соотношения между соответствующими длинами отрезков и площадями фигур, Галилей раскрывал основные закономерности механического движения. Легкость определения площадей прямоугольников по сравнению с площадями поверхностей, ограниченных кривыми, подсказала Ньютону идею дифференциального исчисления. Эйлер заложил основы теории одномерных пространств – графов, ставшей в дальнейшем одним из важных инструментов в изучении природных и технических систем. Большой вклад был внесен им в создание гидродинамики, многие разделы которой сделались впоследствии в моделировании ряда процессов смежными теории гидравлическим цепей [8,9]. «Аналитическая механика» Лагранжа [10], в которой равновесное моделирование состояний и траекторий по принципиальным соображениям ее автора осуществлялось без использования каких-либо графических построений, выявила сравнительную легкость такого моделирования в анализе обратимого и необратимого, стационарного и нестационарного движений в случае применения одномерного графического пространства переменных. Это достоинство равновесного лагранжевого метода анализа уже неоднократно использовалось в работах ИСЭМ [1-5]. К зарождению геометрических построений в термодинамике следует отнести представление Клаузиусом реальных циклов тепловых двигателей как суммы бесконечного числа бесконечно малых циклов Карно, имеющих в пространстве температура – энтропия вид прямоугольников.

Достаточно подробный и исключительно содержательный анализ эффективности совместного применения термодинамического и одномерного “цепного” пространств переменных был выполнен Кирхгофом [11]. Уже до введения в науку термина термодинамика в опубликованной в 1845-м году статье он, решая задачу распределения электрического тока в сплошной среде (на примере плоской пластины круглой формы), использовал условную модель, представляющую рассматриваемую пластину одномерной многоконтурной схемой – графом. Допустимость такого представления была обоснована им с помощью чисто термодинамических предпосылок о потенциальности и равновесности движения, применимых к необратимому процессу вследствие одномерности пространства. Необратимость очевидна, так как перемещение электрических зарядов сопровождается выделением теплоты и производством энтропии. Результатом проведенного анализа стало установление двух законов токораспределения в электри-

ческих цепях, получивших в дальнейшем наименование законов Кирхгофа. Кирхгоф показал, что в пассивной (без внутренних источников электродвижущих сил) цепи, ток в случае изотермичности движения распределяется по ее ветвям таким образом, что выделяется минимально возможное количество теплоты. Этим выводом использование в моделировании цепей принципов сохранения было дополнено использованием принципа экстремальности. Конкретная формулировка данного принципа вошла в науку как тепловая теорема Кирхгофа. Максвелл ввел в теорию электричества еще одну тепловую теорему [12], согласно которой наиболее экономной с точки зрения расхода энергии при соблюдении изотермичности является линейная зависимость между потерей напряжения и током (закон Ома). Теоремы Кирхгофа и Максвелла фактически являются частными случаями сформулированной примерно через сто лет после их доказательств теоремы Онсагера-Пригожина о минимуме производства энтропии. Ведь при постоянстве температуры минимальным выделению теплоты и потере электрической энергии соответствует минимальный прирост энтропии изолированной системы (цепь плюс окружение). Метод расчета токораспределения в цепях на основе первого и второго законов Кирхгофа (контурных токов) Максвелл дополнил предназначенным для решения той же задачи методом узловых потенциалов.

Идеи Кирхгофа и Максвелла использовал В.Я. Хасилев при создании им теории гидравлических цепей [8]. По сравнению с работами XIX века по электрическим цепям предмет исследований был существенно расширен. В него наряду с задачами поиска распределения движущейся среды по ветвям цепей вошли обратные задачи токораспределения (определения коэффициентов сопротивлений ветвей) и технико-экономической оптимизации (выбора схем и параметров – оптимального синтеза сетей). Важнейшей составной частью анализа проблем оптимизации стало раскрытие зависимостей между физическими и экономическими закономерностями и влияния данных зависимостей на математические особенности используемых моделей. Фундамент для развития этой составляющей технико-экономических исследований был заложен Хасилевым. Из физико-математического соотношения между потерей давления на участке трубопроводной сети и потоком жидкости на нем он установил выпуклость функции денежных затрат в сеть по осям давлений и вогнутость – по осям потоков. Интересным стало выявление исключительно большой пологости кривой затрат вблизи точки экстремального давления и независимости вида кривой относительных затрат (их изменений по сравнению с оптимальным значением) от абсолютных размеров денежных вложений. Для задачи выбора схемы сети было показано, что её оптимальное решение имеет вид дерева. Отмеченные выводы Хасилев сделал, предельно идеализируя постановки решаемых задач. Им не учитывались требования надежности и безопасности снабжения транспортируемыми продуктами, экологии, реконструкции существующей части проектируемой системы и другие. Однако выявление особенностей сравнительно простых моделей стало необходимым этапом в объяснении и обосновании методов использования их более сложных модификаций.

Сходные с хасилевскими идеи оптимизации схем «перемещений» выдвинул в [13] Канторович применительно к транспортным системам (автомобильным, железнодорожным, водным, воздушным). Он показал, что хотя для таких систем стоимость перемещения грузов между двумя заданными узлами зависит от выбранного маршрута оптимальному решению соответствуют потенциальные потоки. Свойство потенциала в таком решении приобретает цена доставки единицы груза в узел потребления. Размерность целевой функции как и в хасилевской модели оптимального синтеза равняется размерности произведения потенциала (у Канторовича цены) на координату (у Канторовича «потока» товара), т.е. размерности экономической «энергии» (денег). Физико-

экономическая трактовка решенной Канторовичем задачи раскрывает возможности графического термодинамического моделирования экономических систем и процессов.

Термодинамический в буквальном смысле слова граф в виде дерева ввел в физико-математическое моделирование А.Н. Горбань [14]. Этот граф, названный им термодинамическим деревом или деревом энтропии, позволил заменить поиск на многограннике материального баланса достижимых состояний с экстремальными значениями интересующих исследователя свойств моделируемой системы поиском на дереве, то есть в одномерном термодинамическом пространстве переменных. Предложенная в [14] методика построения дерева основывалась на использовании свойств термодинамических характеристических функций, их потенциальности и монотонности. Эффективность решения термодинамических задач на дереве удалось проверить на примерах анализа химических процессов, включающих несколько десятков компонентов и до десяти ограничений материальных балансов [15].

Накопленный опыт физико-техничко-экономического моделирования на графах в ИСЭМ в наибольшей мере пока использовался в термодинамическом анализе теории цепей. При этом удалось получить ряд интересных в теоретическом или прикладном отношении результатов. Прежде всего была решена поставленная Хасилевым задача обоснования критериев экстремальности в моделях потокораспределения в цепях и их оптимального синтеза. Одномерность используемого пространства переменных позволила вывести эти критерии как из уравнения равновесия механической системы, предложенного Лагранжем, так и из второго закона термодинамики. Это сыграло существенную роль в раскрытии математических связей между закономерностями консервативных и диссипативных систем и доказательстве возможности равновесного моделирования последних [1-5]. Экстремальное моделирование режимов работы представляет богатые возможности в анализе особенностей эксплуатации цепей с распределенными параметрами и в том числе гетерогенных. В технико-экономической оптимизации в значительной мере была решена одна из основных проблем применения метода динамического программирования – проблема неаддитивности целевой функции. Решение осуществлялось последовательными итеративными расчетами вызывающего неаддитивность взаимодействия между потоками на ветвях цепи (результатом которого является потокораспределение) и оптимальных при фиксированном взаимодействии диаметров труб. В целом выполненный теоретический анализ способствовал зарождению идеи пошагового построения траекторий с выбором в качестве шагов достаточно малых отрезков времени (пространства), для которых делается допустимой предпосылка о стационарности движения и неизменности в нем принятых закономерностей. Выбор данной предпосылки позволил распространить используемое в графическом анализе равновесное «консервативное» моделирование на необратимые процессы в сплошных средах.

Конечно, в создании графических термодинамических моделей возникли серьезные и интересные теоретические проблемы. Одной из них является оценка сравнительных возможностей построения и эффективности применения графов в виде деревьев и замкнутых схем. Если у Хасилева и Горбаня оптимальные решения приняли форму деревьев, то у Кирхгофа и Канторовича они в общем случае представили многоконтурные замкнутые схемы. Замкнутость обычно вызывают ограничения, меняющие характер формулируемой задачи математического программирования, например, преобразующие ее из «выпуклой» в «невыпуклую», из непрерывной в дискретную. При расчетах токораспределения в сплошных средах такими ограничениями могут стать фиксирования притоков и стоков одновременно в нескольких узлах. В технико-экономическом моделировании традиционными являются ограничения на надежность, безопасность и

экологичность исследуемой системы, способы реконструкции, выбор характеристик отдельных компонентов. Отмеченные обстоятельства, видимо, свидетельствуют о необходимости активного продолжения исследований с помощью обоих типов обсуждаемых моделей.

Созданный задел позволяет наметить важные направления дальнейшего развития прикладного термодинамического моделирования на графах. В соответствии со специализацией авторов доклада ниже затрагиваются только вопросы применения этого моделирования в энергетических исследованиях. Весьма актуальной является проблема повышения качества отопления и кондиционирования воздуха в жилых, общественных и производственных помещениях. Сложность ее решения в настоящее время увеличивается в связи со значительным ростом загрязнения атмосферы во многих регионах. Уровень загрязнения, очевидно должен влиять на «оптимальный» размер подачи воздуха в помещения. Поскольку температура и давление внутри помещений отличается от наружных, отличаются и концентрации вредных веществ. Поэтому наряду с определением влажности и температуры оптимизация схем (гидравлических цепей) воздухообмена должна включать и термодинамический анализ образования поллютантов, проведение которого требует создания специальных моделей.

Обязательно надо решать задачу оценки экологичности ветроэнергетики. Распространенное мнение об абсолютной экологической безопасности ветряных электростанций, бесспорно, справедливо применительно к случаям, когда их мощности не превышают нескольких тысяч киловатт. Но если они достигают сотен тысяч или миллионов кВт обстоятельства резко меняются. Нарушаются режимы движения воздуха на территориях в сотни квадратных километров. Возникают резкие колебания атмосферного давления, влияющие на концентрации капель конденсата и образование на их поверхности растворов вредных веществ. Краткий предварительный анализ воздействия ветроэнергетических установок на природу, приведенный в [5], был выполнен с помощью построенной по примеру Кирхгофа условной модели, представляющей отображающую движение воздушных масс гидравлическую цепь. В дальнейшем более детальном и точном анализе экологических характеристик ветряных электростанций понадобится использовать графические модели, строящиеся с учетом реальных схем энергосистем, расположения в них ветряных и других электростанций и размещения в рассматриваемом регионе неэнергетических источников антропогенных вредных выбросов.

Естественным и плодотворным представляется использование цепных моделей в прогнозировании развития и проектировании интегрированных энергетических систем [16,17], которые предположительно должны обеспечить качественное, экономное, экологичное, надежное и безопасное энергоснабжение потребителей при изменениях состава и качества первичных энергоресурсов. В моделировании этих систем термодинамика уже выявила свою эффективность в оценке предельных показателей энергетических технологий, а теория цепей – в оптимизации схем транспорта энергии и энергоносителей.

Список литературы

1. Горбань, А.Н. Термодинамические равновесия и экстремумы: Анализ областей достижимости и частичных равновесий в физико-химических и технических системах / А.Н. Горбань, Б.М. Каганович, С.П. Филиппов. – Новосибирск: Наука, 2001. – 296 с.
2. Gorban, A.N. Thermodynamic Equilibria and Extrema. Analysis of Attainability Regions and Partial Equilibria / A.N. Gorban, B.M. Kaganovich, S.P. Filippov, A.V. Keiko,

V.A. Shamansky, I.A. Shirkalin – Springer. 2006. – 282 p.

3. Каганович, Б.М. Равновесное термодинамическое моделирование диссипативных макроскопических систем / Б.М. Каганович, А.В. Кейко, В.А. Шаманский – Иркутск: ИСЭМ СО РАН, 2007. – 78 с.

4. Kaganovich, B.M. Equilibrium Thermodynamic Modeling of Dissipative Macroscopic Systems / B.M. Kaganovich, A.V. Keiko, V.A. Shamansky // *Advances in Chemical Engineering*. – Vol. 39. Thermodynamics and kinetics of complex systems. – Elsevier, 2010. – P. 1–74.

5. Каганович, Б.М. Равновесная термодинамика. Проблемы и перспективы. Вторая редакция. – Саарбрюкен: LAP Lambert Academic Publishing, 2015. – 239 с.

6. Балышев, О.А. Модели нестационарного потокораспределения в теории гидравлических цепей / О.А. Балышев, Б.М. Каганович // *Моделирование неравновесных систем. Материалы IV Всероссийского семинара*. – Красноярск: ИПЦ КГТУ, 2001. – С.5.

7. Каганович, Б.М. Термодинамическое описание нестационарных процессов в многоконтурных гидравлических системах / Б.М. Каганович, С.В. Якшин // *Моделирование неравновесных систем. Материалы XVI Всероссийского семинара*. – Красноярск: ИВМ СО РАН, 2013. – С. 65–68.

8. Виктор Яковлевич Хасилев: Воспоминания о жизни и деятельности. Научное наследие. – Рос. акад. наук, Сиб. отд-ние, ИСЭМ. – Новосибирск: Акад. изд-во «Гео», 2012. – 382 с.

9. Каганович, Б.М. Термодинамика, теория цепей и их совместные применения в энергетических исследованиях / Б.М. Каганович, Н.И. Воропай, В.А. Стенников, М.С. Зароднюк // *Изв. РАН Энергетика*, 2014. №5. – С. 3-15.

10. Лагранж, Ж. Аналитическая механика. – М. – Л.: ГИТЛ, 1950. Т. 1. – 594 с.; Т.2 – 440 с.

11. Кирхгоф, Г. Работы по электрическому току в проводящих средах // *Избр. труды*. – М.: Наука, 1988. – С. 155–231.

12. Максвелл, Д.К. Трактат об электричестве и магнетизме. – М.: Наука, 1989. – Т.1. – 416 с.

13. Канторович, Л.В. О перемещении масс // *Доклады АН СССР*. – 1942. – Т. 37, № 7/8. – С. 227–229.

14. Горбань, А.Н. Обход равновесия: Уравнения химической кинетики и их термодинамический анализ. – Новосибирск: Наука, 1984. – 226 с.

15. Зароднюк, М.С. Применение графа термодинамическое дерево в равновесном моделировании физико-химических систем. Автореферат дис. к-та физ.-мат. наук. – Иркутск, 2013. – 20 с.

16. Каганович, Б.М. Эффективность энергетических технологий: термодинамика, экономика, прогнозы / Б.М. Каганович, С.П. Филиппов, Е.Г. Анциферов. – Новосибирск: Наука, 1989. – 256 с.

17. Воропай, Н.И. Интегрированные интеллектуальные энергетические системы / Н.И. Воропай, В.А. Стенников // *Изв. РАН. Энергетика*, 2014. № 1. – С. 64 – 72.

ПОСТРОЕНИЕ БИФУРКАЦИОННОГО ПОРТРЕТА ДЛЯ РЕАКЦИИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ ОКСИДА УГЛЕРОДА НА ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА

О.Э.Лешаков^{1,2}, Е.А.Мамаш³

¹Тувинский институт комплексного освоения природных ресурсов СО РАН

²Тувинский государственный университет, каф. физики o_leshakov@mail.ru

³Институт вычислительных технологий СО РАН, elenamamash@gmail.com

Нестационарные и нелинейные явления в химической кинетике являются объектом пристального внимания исследователей. К указанным явлениям относятся, прежде всего, множественность стационарных состояний (м.с.с.) и возникновение осцилляций (см., например, [1]). Различные макрокинетические факторы существенно влияют на возникновение таких критических эффектов. К таким факторам относятся неизотермичность, флуктуации, химическая неидеальность, сложность системы, диффузия и т.п. [2-5].

Другим важным макрокинетическим фактором, имеющим несколько иную природу, является топология поверхности катализатора. Ее влияние на кинетику автокаталитических реакций в присутствии диффузии привлекло внимание исследователей сравнительно недавно и было рассмотрено, например, в [4,6]. В работе [6] впервые проведено численное и качественное исследование бифуркаций и динамики систем типа реакция + диффузия для трех классических геометрий активной поверхности – цилиндр, сфера и тор. Показано, что условия диффузионной неустойчивости существенно зависят от геометрии и локальной кривизны поверхности. Проблема заключалась в том, что учет диффузии добавляет к соответствующим кинетическим уравнениям оператор Лапласа, который для таких поверхностей имеет довольно сложный вид. Поэтому получить точные аналитические выражения для бифуркационных кривых не удавалось даже для сравнительно простых реакций. Приходилось использовать численные методы для нахождения таких характеристик процесса, как среднеквадратичное отклонение скорости реакции от среднего значения и т.д. При заданных константах скоростей стадий оценивалась область параметров, при которых возникали автоколебания. При этом область м.с.с. определить не представлялось возможным. Отмечалось, что точное аналитическое построение бифуркационных кривых является нетривиальной математической задачей, имеющей самостоятельный научный интерес.

В данной работе показано, что для цилиндрической поверхности можно построить бифуркационную диаграмму даже для довольно сложного нелинейного 5-стадийного механизма каталитического окисления СО на металлах платиновой группы.

Необходимость подробного изучения кинетики этой реакции обусловлена тем, что, во-первых, она является промышленно важной в экологии (например, проблема дожигания выхлопных газов автомобильных двигателей), во-вторых, модели этой реакции являются базовыми для гетерогенного катализа [2,3,7]. Сама реакция и влияние диффузии на ее динамику с точки зрения построения бифуркационного портрета подробно изучены нами в [8-12]. Здесь мы покажем, что кривизна цилиндрической поверхности, на которой осуществляются процессы массопереноса и химические реакции, является параметром порядка для условий потери устойчивости однородных по пространству стационарных состояний и возможности возникновения м.с.с.

Итак, предположим, что каталитическая решетка имеет цилиндрическую форму, а диффузия адсорбированного вещества является результатом его «перескока» на соседнее свободное место по схеме

$$\underset{\xi-\varepsilon}{X} \rightarrow Z \leftarrow \underset{\xi+\varepsilon}{X} \text{ или } \underset{\xi-\varepsilon}{Z} \leftarrow X \rightarrow \underset{\xi+\varepsilon}{Z}$$

вдоль образующей цилиндра, а по окружности по схеме

$$\underset{\varphi-\varepsilon}{X} \rightarrow Z \leftarrow \underset{\varphi+\varepsilon}{X} \text{ или } \underset{\varphi-\varepsilon}{Z} \leftarrow X \rightarrow \underset{\varphi+\varepsilon}{Z}.$$

Здесь Z – свободное место, X – место, занятое адсорбированным веществом, ε – характерный размер решетки, ξ – пространственная, φ – угловая координаты. Математические выкладки, связанные с переходом к оператору Лапласа, мы здесь опускаем, поскольку они подробно приведены, например, в [3,10,12]. Отметим только, что для цилиндрической поверхности с радиусом основания r он имеет вид (см., например, [4,6])

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad 0 \leq \xi \leq h,$$

где h – высота цилиндра. Предполагая, что «перескоки» происходят только через Z , модель каталитической реакции может быть записана в виде [3]

$$\dot{x}_i = f_i(\mathbf{x}, z) + D_i(z\Delta x_i - x_i\Delta z), \quad (1)$$

где $\dot{x} = \partial x_i / \partial t$, $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ – вектор степеней покрытия «подвижных» веществ на поверхности катализатора, z – доля свободных мест, D_i – коэффициенты диффузии медиаторов, $f_i(\mathbf{x}, z)$ – соответствующие механизму реакции функции кинетических зависимостей, t – время, Δ – оператор Лапласа. В каждом сечении образующей ξ или окружности φ выполняется закон сохранения

$$z = 1 - \sum_{i=1}^n x_i. \quad (2)$$

Система (2) дополнена краевыми условиями непротекания на торцах цилиндра (условие Неймана)

$$\frac{\partial x_i}{\partial \xi}(t, 0, \varphi) = \frac{\partial x_i}{\partial \xi}(t, h, \varphi) = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

и условиями замыкания на образующей

$$x_i(t, \xi, \varphi) = x_i(t, \xi, \varphi + 2\pi); \quad \frac{\partial x_i}{\partial \xi}(t, \xi, \varphi) = \frac{\partial x_i}{\partial \xi}(t, \xi, \varphi + 2\pi), \quad i = 1, \dots, n.$$

Рассмотрим случай трех уравнений, что соответствует рассматриваемому ниже механизму реакции. Предположим для простоты, не теряя общности, что диффундирует только одно вещество:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= f_1(x_1, x_2, x_3) + D(z\Delta x_1 - x_1\Delta z) \\ \dot{x}_2 &= f_2(x_1, x_2, x_3) \\ \dot{x}_3 &= f_3(x_1, x_2, x_3). \end{aligned} \quad (3)$$

Пусть $\mathbf{x}^* = (x_1^*, x_2^*, x_3^*)$ – стационарное положительное однородное решение (3), т.е. $f_i(\mathbf{x}^*) = 0$, $i = 1, 2, 3$. Для отклонений $u_i = x_i - x_i^*$ линеаризованная система для (3) примет вид

$$\begin{aligned} \dot{u}_1 &= f_{11}^* u_1 + f_{12}^* u_2 + f_{13}^* u_3 + D_1 \Delta u_1 + D x_1^* (\Delta u_2 + \Delta u_3) \\ \dot{u}_2 &= f_{21}^* u_1 + f_{22}^* u_2 + f_{23}^* u_3 \\ \dot{u}_3 &= f_{31}^* u_1 + f_{32}^* u_2 + f_{33}^* u_3. \end{aligned} \quad (4)$$

где $D_1 = D(1 - x_2^* - x_3^*)$, $f_{ij}^* = \partial f_i / \partial x_j$. В соответствии с общей процедурой анализа устойчивости ищем решение (4) в виде

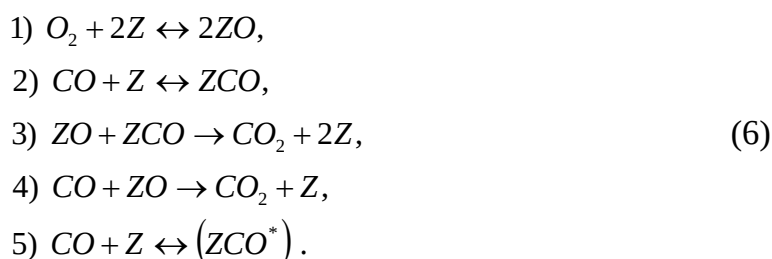
$$u_i = u_i^0 e^{\lambda t} e^{i\varpi_1 \xi} e^{i\varpi_2 \varphi}, \quad (5)$$

где $\varpi_{1,2}$ – волновые числа, характеризующие изменение степени покрытия по пространственной и угловой координатам. Устойчивость стационарного решения определяется корнями характеристического уравнения, полученного после подстановки (5) в (4)

$$\lambda^3 - \sigma\lambda^2 + \delta\lambda + \Delta = 0. \quad (6)$$

Здесь σ – след, Δ – определитель матрицы преобразованной системы (4), δ – величина, составленная из комбинации диагональных миноров якобиана.

Поставим задачу исследования влияния кривизны цилиндрической поверхности на конфигурацию бифуркационной диаграммы для реакции каталитического окисления CO. В нашей постановке механизм реакции состоит из 5-ти стадий вида



Здесь (ZCO^*) – неакционноспособная (например, прочносвязанная) форма ZCO. Кинетические зависимости механизма (6), т.е. функции f_i в (3), согласно закону действующих поверхностей, при условии постоянства концентраций вещества газовой фазы, имеют вид:

$$\begin{aligned} f_1 &= 2k_1 p_1 z^2 - 2k_{-1} x_1^2 - k_3 x_1 x_2 - k_4 p_2 x_1, \\ f_2 &= k_2 p_2 z - k_{-2} x_2 - k_3 x_1 x_2, \\ f_3 &= k_5 p_2 z - k_{-5} x_3, \end{aligned} \quad (7)$$

где x_1, x_2, x_3 – степени покрытия поверхности катализатора z молекулами веществ ZO, ZCO, (ZCO^*) соответственно, k_i – константы скоростей стадий, p_1, p_2 – парциальные давления O_2 и CO в газовой фазе. Физический смысл имеют решения в симплексе

$$S = \{x_1, x_2, x_3 : x_i \geq 0, x_1 + x_2 + x_3 \leq 1\}.$$

Стационарные однородные состояния для (3) определяются системой алгебраических уравнений

$$f_1(x_1, x_2, x_3) = 0, \quad f_2(x_1, x_2, x_3) = 0, \quad f_3(x_1, x_2, x_3) = 0. \quad (8)$$

Как и в [8-12], будем строить бифуркационную диаграмму в плоскости параметров k_1 и k_{-1} . Исключая x_2 и x_3 из двух последних уравнений, а также используя условие материального баланса (2), запишем (8) в виде

$$F(x_1, k_1, k_{-1}) = 0 \quad (0 < x_1 < 1). \quad (9)$$

Для построения границы области м.с.с. L_Δ , разделяющей области с различным числом стационарных состояний, необходимо использовать условие равенства нулю определителя преобразованной системы (4):

$$\Delta(x_1, k_1, k_{-1}) = 0. \quad (10)$$

Для построения кривой нейтральности L_σ , в рамках общепринятой процедуры, используем совместно с условием (9) критерий Рауса – Гурвица

$$\sigma\delta - \Delta = 0, \quad (11)$$

где σ , δ , и Δ – коэффициенты характеристического уравнения (6). Заметим, непосредственной проверкой можно убедиться в том, что (11) в данном случае эквивалентно условию $\sigma = 0$, что позволяет снизить порядок соответствующего уравнения на единицу.

Уравнения (9) – (11) линейны по k_1 , k_{-1} . Разрешая совместно (9), (10) и (9), (11) относительно выбранных параметров, можно получить явные выражения для k_1 , k_{-1} как функции x_1 . Эти зависимости используются для построения кривых кратности L_Δ и нейтральности L_σ . Полученные выражения имеют довольно громоздкий вид, и здесь не приводятся. Искомая бифуркационная диаграмма получается наложением кривых кратности и нейтральности в плоскости параметров k_1 и k_{-1} . Влияние кривизны поверхности каталитической решетки иллюстрирует Рис. 1.

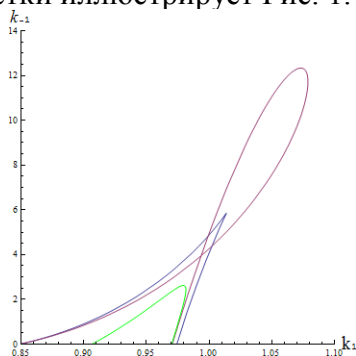


Рис. 1.

На нем приведены бифуркационные линии для квадратной плоской решетки (фиолетовый и синий цвет), и для такой же по размерам решетки, свернутой в цилиндр (зеленая кривая). Значения параметров выбраны следующими: $k_2 = 1$; $k_{-2} = 0.1$; $k_3 = 10$; $k_4 = 0.1$; $k_5 = 0.01$; $k_{-5} = 0.01$; $p_1 = 1$; $p_2 = 0.7$; $\varpi_1 = 1$; $\varpi_2 = 1$; $D = 0.01$. Фиолетовая – линия нейтральности L_σ , внутри «петли» система теряет устойчивость и возникают автоколебания. Синяя – кривая кратности L_Δ , она ограничивает область, в которой возникает м.с.с. (конкретно – 3 стационарных состояния, из них одно – неустойчивое). Видим, что для цилиндра исчезли и м.с.с., и автоколебания. Здесь присутствует лишь L_σ , но без «петли». Изменение геометрии бифуркационных кривых в зависимости от радиуса цилиндра при постоянной его высоте иллюстрирует Рис. 2. Как видно, с уменьшением радиуса (увеличением кривизны) области критического поведения так же уменьшаются, и при достаточно малой его величине полностью исчезают. Это представляется вполне естественным, поскольку на поверхности тонких трубок диффузия должна «размывать» все существенные для нашего рассмотрения особенности.

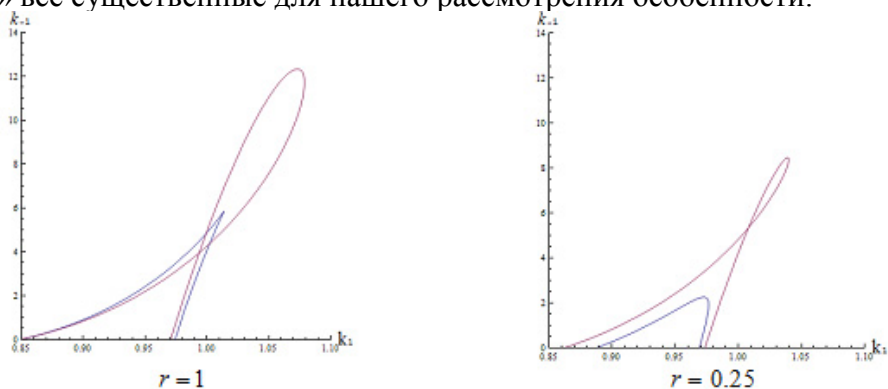


Рис. 2. Кривые нейтральности (фиолетовый цвет) и кратности (синий цвет) при разных значениях радиуса r цилиндра.

Список литературы

1. Жаботинский А.М. Концентрационные автоколебания. / А.М.Жаботинский.– М.: Наука, 1979.– 361 с.
2. Яблонский Г.С. Исследование кинетической модели реакции окисления на металлах / Г.С.Яблонский, В.И.Быков, В.И.Елохин // Кинетика модельных реакций гетерогенного катализа. – Новосибирск: Наука. – 1984.– С.55 – 107.
3. Быков В.И. Моделирование критических явлений в химической кинетике. / В.И.Быков.– М.: КомКнига, 2006.– 328 с.
4. Быков В.И. Нелинейные модели химической кинетики. / В.И.Быков, С.Б.Цыбенова.– М.: КРАСАНД, 2011.– 400 с.
5. Быков В.И. Моделирование реакции на поверхности катализатора. / В.И.Быков, С.Б.Цыбенова, М.Г.Слинько. // Докл.акад. наук. – 2003. – Т.388. – №6. С. 769-773.
6. Быков В.И. Макрокинетика каталитических реакций на поверхностях различной топологии. / В.И.Быков, Н.В.Киселев, С.Б.Цыбенова // Докл.акад. наук. – 2008. – Т.421. – №2. С. 195–198.
7. Быков В.И. Область множественности стационарных состояний в реакции окисления СО на платине / В.И.Быков, Ю.Г.Зархин, Г.С.Яблонский // Теор. и эксперим.химия. – 1980. – Т. 16, – № 4. С. 487–491.
8. Лешаков О.Э. Анализ критических явлений в пятистадийной реакции каталитического окисления оксида углерода. / О.Э.Лешаков, Е.А.Мамаш, А.Ф.Чульдун. // Моделирование неравновесных систем. Материалы 14-го всероссийского семинара, Красноярск – 2011, С. 148-151.
9. Лешаков О.Э. Критические явления в реакции каталитического окисления оксида углерода. / О.Э.Лешаков, Е.А.Мамаш // Сибирский журнал индустриальной математики – 2012. – Т. XV, – № 3(51). С. 70-76.
10. Лешаков О.Э. Критические явления в реакции каталитического окисления оксида углерода с учетом диффузии. / О.Э.Лешаков, Е.А.Мамаш // Моделирование неравновесных систем. Материалы 15-го всероссийского семинара, Красноярск – 2012, С. 126-129.
11. Лешаков О.Э. Анализ критических явлений в распределенной модели реакции каталитического окисления оксида углерода. / О.Э.Лешаков, Е.А.Мамаш // Моделирование неравновесных систем. Материалы 16-го всероссийского семинара, Красноярск – 2013, С. 69-72.
12. Лешаков О.Э. Моделирование критических явлений в реакции каталитического окисления оксида углерода в системе «реакция+диффузия». / О.Э.Лешаков, Е.А.Мамаш, М.П.Красильников. // Сибирский журнал индустриальной математики – 2013. – Т. XVI, – № 3(55), С. 116-121.

ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ СКОРОСТИ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ СТОХАСТИЧЕСКОМ ОНДУЛЯТОРЕ

В.М.Логинов^{1,2}

¹Красноярский государственный педагогический университет им.

В.П.Астафьева, каф. физики,

²Тувинский государственный университет, каф. физики, valog_1949@mail.ru

Рассмотрим движение нерелятивистской частицы с зарядом q и массой m в электрическом поле вида $\vec{E}(z) = (E\alpha(z), 0, 0)$ (электрический ондулятор). Примем, что частица в начальный момент времени находится в начале координат и имеет начальную скорость в направлении z , $\vec{V}(0) = (0, 0, V_0)$. Обсуждению особенностей поведения заряженных частиц в периодических ондуляторах посвящена обширная литература (см., например, [1-4]). В данной работе поле $\vec{E}(z)$ моделируется случайной функцией $\alpha(z)$ с заданными статистическими характеристиками. С учетом сказанного система стохастических уравнений, определяющих динамику частицы, принимает вид:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= qE\alpha(z), \\ \ddot{y} &= 0, \\ \ddot{z} &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Из последних двух уравнений системы (1), с учетом начальных условий, получаем $y(t) = 0$, $z(t) = V_0 t$. Первое уравнение системы (1) удобно представить в виде:

$$\frac{dV_x}{dz} \frac{dz}{dt} = \frac{qE}{m} \alpha(z),$$

или с учетом того, что $\frac{dz}{dt} = V_0$, получаем

$$\frac{dV_x}{dz} = \varepsilon \alpha(z), \quad (2)$$

где $\varepsilon = \frac{qE}{mV_0}$.

Характеристическая функция $\Phi_z(\mu)$ скорости частицы определяется как

$$\Phi_z(\mu) = \langle e^{i\mu V_x(z)} \rangle, \quad (3)$$

где μ – неслучайная переменная, угловые скобки здесь и далее означают, усреднение по ансамблю реализаций $\alpha(z)$. Нецентральные одноточечные моменты ρ_k скорости частицы определяются через производные от характеристической функции $\Phi_z(\mu)$ по переменной μ :

$$\rho_k \equiv \langle V_x^k(z) \rangle = \frac{1}{i^k} \frac{\partial^k \Phi_z(\mu)}{\partial \mu^k} \Big|_{\mu=0}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Конкретизируем модели случайного поля:

1. Дихотомический шум. Пусть $\alpha(z)$ представляет собой марковский дихотомический процесс (в отечественной литературе – случайный телеграфный сигнал) – случайная функция z , принимающая с одинаковой вероятностью значения $\pm \sigma$. Сред-

нее $\langle \alpha(z) \rangle = 0$, а корреляционная функция $K(|z - z'|) = \sigma^2 \exp(-\nu|z - z'|)$. Величина $z_c = \frac{1}{\nu}$ – задает характерный радиус спада корреляций поля. Физически обсуждаемая модель соответствует слоисто-неоднородной стохастической среде. Далее для простоты положим $\sigma = 1$.

Установим явный вид характеристической функции $\Phi_z(\mu)$, используя метод формул дифференцирования статистических средних [5]. Из (3), (2) имеем

$$\frac{d\Phi_z}{dz} = i\mu \left\langle e^{i\mu V_x} \frac{dV_x}{dz} \right\rangle = i\mu \varepsilon \langle \alpha(z) e^{i\mu V_x(z)} \rangle \equiv i\mu \varepsilon \Phi_1.$$

Из уравнения (2) следует, что скорость частицы $V_x(z) = \varepsilon \int_0^z \alpha(z') dz'$ представляет собой функционал «запаздывающего» типа от процесса α , в том смысле, что скорость частицы в точке z зависит от множества значений поля $\alpha(z')$ в точках z' удовлетворяющих условию $z' \leq z$. Формула дифференцирования (ФД) для рассматриваемой модели поля имеет вид [5]:

$$\frac{d}{dz} \langle \alpha(z) \phi_z[\alpha(z')] \rangle = -\nu \langle \alpha(z) \phi_z[\alpha(z')] \rangle + \left\langle \alpha(z) \frac{d\phi_z[\alpha(z')]}{dz} \right\rangle, \quad z' \leq z. \quad (5)$$

Здесь $\phi_z[\alpha(z')]$ – некоторый «запаздывающий» функционал α . Среднее Φ_1 представляет частный случай (5), где $\phi_z[\alpha(z')] = \exp(i\mu V_x(z))$. Применяя ФД (5) для преобразования среднего Φ_1 и исходное стохастическое уравнение (2), приходим к замкнутой системе дифференциальных уравнений первого порядка для переменных Φ_z и Φ_1 . Эта система сводится к классическому уравнению гармонического осциллятора в среде с трением

$$\frac{d^2 \Phi_z}{dz^2} + \nu \frac{d\Phi_z}{dz} + (\mu \varepsilon)^2 \Phi_z = 0. \quad (6)$$

Начальные условия при $z = 0$: $\Phi_0 = 1$, $\left. \frac{d\Phi_z}{dz} \right|_{z=0} = 0$.

Окончательно, характеристическая функция скорости нерелятивистской заряженной частицы в стохастическом ондуляторе, моделируемым марковским дихотомическим процессом, принимает вид

$$\Phi_z(\mu) = e^{-\frac{z}{2z_c}} \left[\frac{1}{2z_c \Delta} \operatorname{sh} \Delta z + \operatorname{ch} \Delta z \right], \quad \Delta = \sqrt{\left(\frac{1}{2z_c} \right)^2 - (\mu \varepsilon)^2}. \quad (7)$$

Наряду с моментами ρ_k интерес представляют кумулянты w_k , которые определяются через производные от логарифма характеристической функции:

$$w_k = \frac{1}{i^k} \left. \frac{\partial^k \ln \Phi_z(\mu)}{\partial \mu^k} \right|_{\mu=0}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Кумулянт первого порядка равен среднему, кумулянт второго порядка представляет собой дисперсию – центрированный момент второго порядка. Через кумулянты третьего и четвертого порядка выражаются соответственно коэффициенты асимметрии и эксцесса. Для симметричных относительно среднего значения распределений коэффици-

ент асимметрии равен нулю. Для гауссовых моделей кумулянты порядка выше второго обращаются в нуль, поэтому отличие от нуля кумулянтов третьего, четвертого и т.д. порядков указывает на негауссовость изучаемого распределения.

Используем, полученный выше результат и определим, как меняется средняя кинетическая энергия частицы при движении вглубь стохастического слоя. По условию задачи средняя кинетическая энергия равна

$$\langle E_{кин} \rangle = \frac{m \langle V_x^2(z) \rangle}{2} + \frac{mV_0^2}{2} = \frac{m\rho_2}{2} + \frac{mV_0^2}{2}.$$

Вычисляя момент ρ_2 с помощью (4),(7), получаем

$$\langle E_{кин} \rangle = \frac{mV_0^2}{2} + mz_c^2 \varepsilon^2 \left(\frac{z}{z_c} + e^{-\frac{z}{z_c}} - 1 \right). \quad (8)$$

Из (8) следует, что средняя кинетическая энергия нерелятивистской заряженной частицы является монотонно возрастающей функцией пути z , проходимой частицей. При малых z , $z \ll z_c$, средняя энергия растет квадратично по z . В противоположном пределе, когда линейный размер ондулятора много больше корреляционного радиуса поля, $z \gg z_c$, средняя кинетическая энергия растет пропорционально z . Обсудим вкратце поведение $\langle E_{кин} \rangle$ от параметром задачи. Имеем вместо (8)

$$\langle E_{кин} \rangle = \frac{mV_0^2}{2} + \frac{1}{m} \left(\frac{z_c qE}{V_0} \right)^2 \left(\frac{z}{z_c} + e^{-\frac{z}{z_c}} - 1 \right). \quad (9)$$

В случае $z \gg z_c$

$$\langle E_{кин} \rangle = az + b, \quad a = \frac{z_c}{m} \left(\frac{qE}{V_0} \right)^2, \quad b = \frac{mV_0^2}{2}. \quad (10)$$

Параметр a , определяющий скорость прироста энергии на дистанции тем больше, чем больше радиус корреляции поля. Сильно скореллированные флуктуации, обеспечивают больший прирост энергии. Массивные частицы разгоняются медленнее. Кроме того, коэффициент a уменьшается обратно пропорционально квадрату начальной скорости V_0 в направлении z . Физически это связано с тем, что для быстрых частиц характерное время пролета $\tau = z_c / V_0$ дистанции $z = z_c$ мало и флуктуации поля не успевают синхронизовать движение частицы. Для сравнения приведем известный результат для периодического ондулятора, когда $\alpha(z) = \sin kz$. При той же геометрии и тех же начальных условиях скорость частицы в направлении x равна $V_x(z) = \frac{qE}{mkV_0} \sin kz$. Усредненная по периоду колебаний $2\pi/k$ средняя кинетическая

энергия частицы $\bar{E}_{кин} = \frac{mV_0^2}{2} + \frac{1}{4m} \left(\frac{qE}{kV_0} \right)^2$.

Особенностью рассматриваемой модели является то, что результаты могут быть переформулированы в переменных времени, поскольку $z = V_0 t$. Приведем выражение для средней кинетической энергии частицы со временем:

$$\begin{aligned}\langle E_{кин} \rangle &= \frac{mV_0^2}{2} + \frac{1}{m} \left(\frac{z_c q E}{V_0} \right)^2 \left(\frac{V_0}{z_c} t + e^{-\frac{V_0 t}{z_c}} - 1 \right) = \\ &= \frac{mV_0^2}{2} + \frac{1}{m} (\pi q E)^2 \left(\frac{t}{\tau} + e^{-\frac{t}{\tau}} - 1 \right), \quad \tau = \frac{z}{V_0}.\end{aligned}$$

2. Гауссово поле. Рассмотрим случай, когда электрическое поле является статистически однородным гауссовым полем с произвольной корреляционной функцией $K(|z - z'|)$. По-прежнему полагаем $\langle \alpha(z) \rangle = 0$. Известно, что линейные преобразования гауссова процесса приводят снова к гауссовому процессу, но с другими характеристиками. Уравнение движения (2) является линейным, поэтому при гауссовом $\alpha(z)$ скорость частицы $V_x(z)$ также будет гауссовым процессом. Вид характеристической функции для гауссова процесса хорошо известен (см., например, [6]). Здесь получим классическое выражение несколько иным способом, воспользовавшись результатом [7]. Слегка обобщим задачу и допустим ненулевую начальную скорость V_{x0} в направлении x . При этом

$$\Phi_z(\mu) = \langle e^{i\mu V_x(z)} \rangle = \left\langle e^{i\mu V_{x0} + i\mu \int_0^z \alpha(z') dz'} \right\rangle. \quad (10)$$

В работе [7] показано, что среднее значение от некоторой нелинейной функции $\Psi(z, s) = \Psi(s + \mathcal{G}(z))$, где s – неслучайная переменная, несвязанная с $\mathcal{G}$, а $\mathcal{G} = \mathcal{G}(z)$ – гауссов процесс, подчиняется «уравнению диффузии» в пространстве переменных z и s с переменным коэффициентом диффузии:

$$\frac{\partial \langle \Psi(z, s) \rangle}{\partial z} = \frac{1}{2} \frac{d \langle \mathcal{G}^2(z) \rangle}{dz} \frac{\partial^2 \langle \Psi(z, s) \rangle}{\partial s^2}. \quad (11)$$

Применительно к рассматриваемой задаче

$$s = i\mu V_{x0}, \quad \mathcal{G}(z) = i\mu \int_0^z \alpha(z') dz', \quad \Psi(z, s) = e^{s + \mathcal{G}}, \quad \Phi_z(\mu) = \langle \Psi(z, V_{x0}) \rangle. \quad (12)$$

С учетом (12) уравнение (11) для интересующей нас характеристической функции принимает вид

$$\frac{\partial \Phi_z}{\partial z} = D(z) \frac{\partial^2 \Phi_z}{\partial V_{x0}^2}, \quad (13)$$

где переменный коэффициент диффузии $D(z)$ интегрально связан с корреляционной функцией поля:

$$D(z) = \int_0^z K(z - z') dz'. \quad (14)$$

К уравнению (13) следует добавить начальное условие при $z = 0$: $\Phi_0 = e^{i\mu V_{x0}}$.

Таким образом, интересно, что характеристическая функция скорости нерелятивистской заряженной частицы в рассматриваемой модели стохастического ондулятора является решением уравнения диффузии, где роль времени играет координата z , а в

качестве пространственной переменной выступает начальная скорость частицы V_{x0} , при этом коэффициент диффузии зависит от z и определяется корреляционной функцией поля.

С учетом начального условия общее решение уравнения диффузии (13) имеет вид

$$\Phi_z(\mu) = \frac{1}{2\sqrt{\pi p(z)}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\mu\xi} e^{-\frac{(V_{x0}-\xi)^2}{4p(z)}} d\xi,$$

где $p(z) = \int_0^z D(z') dz'$ или, окончательно:

$$\Phi_z(\mu) = e^{i\mu V_{x0} - \frac{\mu^2 p(z)}{2}}. \quad (15)$$

Выражение (15) хорошо известно. Коэффициент при μ , в общем случае, представляет собой среднее значение гауссовой величины, а $p(z)$ — ее дисперсию. Для рассматриваемой модели ондулятора $\langle V_x(z) \rangle = V_{x0}$ и $p(z) = \langle V_x^2(z) \rangle - \langle V_x(z) \rangle^2$. Если корреляционная функция гауссова поля экспоненциально спадает $K(|z - z'|) = \sigma_E^2 \exp\left(-\frac{|z - z'|}{z_c}\right)$, то нетрудно показать, что средняя кинетическая энергия частицы с $V_{x0} = 0$ растет с ростом z по закону (9), где нужно заменить E^2 на σ_E^2 .

Список литературы

1. Гинзбург В.Л. Теоретическая физика и астрофизика. Дополнительные главы /В.Л.Гинзбург—Москва: Наука. 1980. — 505 с.
2. Гольдин Л.Л. Физика ускорителей /Гольдин Л.Л. —Москва: Наука. 1983. —144 с.
3. Лебедев А.Н. Основы физики и техники ускорителей: Т.1. Ускорители заряженных частиц /А.Н.Лебедев, А.В.Шальнов — Москва: Энергоиздат. 1981. —192 с.
4. Винокуров Н.А. Ондуляторы и вигглеры для генерации излучения и других применений /Н.А.Винокуров, Е.Б.Левичев//Успехи физических наук. —2015. — Т.185. — №9. С.917-939.
5. Шапиро В.Е. Динамические системы при случайных воздействиях /В.Е.Шапиро, В.М.Логинов — Новосибирск: Наука. 1983. — 160 с.
6. Левин Б.Р. Теоретические основы статистической радиотехники /Б.Р.Левин — Москва: Радио и связь. 1989. — 656 с.
7. Логинов В.М. Влияние фликкер-шума на солитон уравнения Кортевега-де Фриза /В.М.Логинов //Журнал технической физики. —1991. — Т.61. — в.4. С.186-188.

АНАЛИЗ ВНЕШНИХ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ, СОПУТСТВУЮЩИХ СИЛЬНЫМ ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЯМ

А.Н. Мацулев¹, К.В. Симонов²

¹Институт химии и химической технологии СО РАН,

²Институт вычислительного моделирования СО РАН

simonovkv@icm.krasn.ru

Анализ сейсмической активности с целью поиска закономерностей, связанных с внешними космическими факторами, циклическими по своей природе, в случае успеха переводит астрономические явления (фаза Луны, соединения планет, парад планет и др.) в разряд предвестников землетрясений, которые в большом ряду других предвестников отличаются хорошей предвычислимостью. Определение хороших (робастных и действенных) предвестников землетрясений является актуальной проблемой в настоящее время.

Поиск сейсмической циклическости является составляющей частью систематического изучения предвестников и в конечном итоге предсказания землетрясений. При изучении сильных и наиболее опасных землетрясений большое значение имеет концепция триггера. Её суть в том, что отдельно выделяется период подготовки землетрясения, который делится на стадию созревания и стадию готовности к землетрясению, когда относительно слабого воздействия достаточно для начала лавинообразного сейсмического процесса – землетрясения.

Среди возможных триггеров особый интерес представляют периодические природные процессы, главным образом по причине их предсказуемости. Очевидными кандидатами на роль периодических триггеров выступают астрономические явления – движение Земли, Луны и Солнца, которые рассматриваются в «концепции барицентра» и близко связанной с ней модели «приливных сил».

Объект исследования: предвестники-структуры процесса подготовки сильного землетрясения общие для сейсмических процессов на Земле и внешние геофизические факторы. Предмет исследования: модели и методы, позволяющие учесть влияние внешних геофизических факторов на изучаемые геодинамические процессы при подготовке сильного землетрясения. Идея исследования: выявление резонансных и триггерных механизмов влияния внешних геофизических факторов на изучаемые геодинамические процессы.

Фактический материал: данные геодинамического мониторинга комплекса регистрируемых структур-предвестников для выделенных очаговых зон подготовки сильных землетрясений АССО [1]; эфемериды Луны от Лаборатории реактивного движения Калифорнийского технологического института [2], каталог землетрясений с магнитудой $M > 7$ от Геологической службы США [3-4].

Обсуждение результатов исследований.

Анализ гистограмм частоты землетрясений по календарным месяцам – годовой цикл. Как следует из сравнения гистограмм, представленных на рисунке 1 наибольшая сейсмическая активность имеет место в зимние месяцы, как для северного полушария, так и в целом по Земле. В литературе встречаются гистограммы сезонной зависимости землетрясений по регионам – это естественно, т.к. мы ожидаем, что изменение таких геофизических факторов, как температура, влажность, сезонные ветра должны сказываться в сейсмической активности в соответствующем регионе (рис. 1). Естественно получить такую сезонную гистограмму сильнейших землетрясений ($M > 7$) за период

времени с 1910 по 2015 годы по каталогу землетрясений, который сейчас исследуем, результат представлен на рисунке 1.

Анализ гистограмм частоты землетрясений по широтным поясам Земли. Под максимумами широтной гистограммы Луны имеется слабый подъем гистограммы землетрясений – это отражение влияния Луны на сейсмическую активность Земли и показывает ее значимость. Предварительный анализ данных, представленных на рисунке 2 (посередине, 2), указывает на то, что основные пики гистограммы «южный» и «северный» не совпадают с максимумами пребывания Луны на этих широтах.

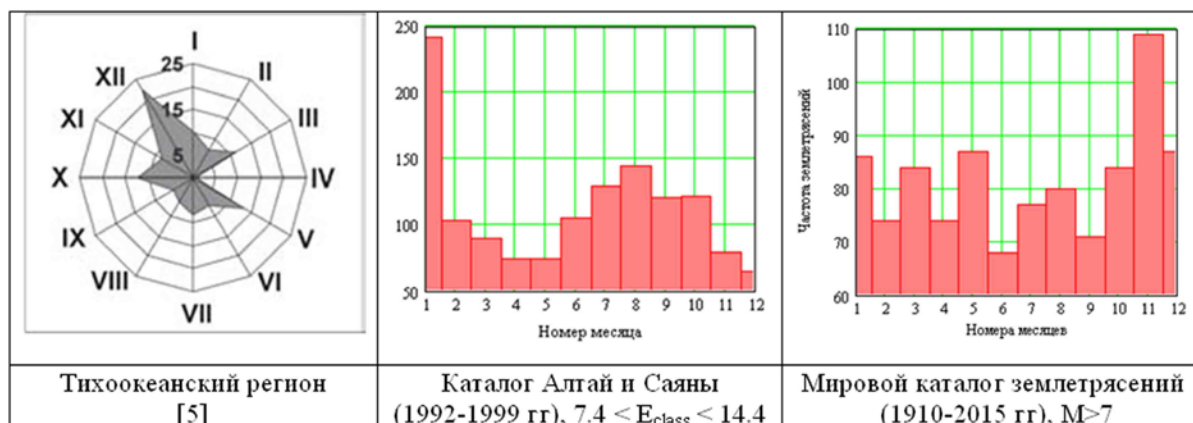


Рис. 1. Региональные и мировая гистограммы сезонной сейсмической активности по данным из разных источников.



Рис. 2. Распределение количества землетрясений по широтным поясам Земли. Форма «лунной» гистограммы (синий пунктир) связана с наклоном Лунной орбиты по отношению к Земному экватору (небесному экватору), который составляет $\sim 28^\circ$.

Если Луна в орбитальном движении проходит узлы орбиты, то ее склонение равно нулю, и в это время она находится над Земным экватором. Через неделю ее склонение становится максимальным -28° , например, на север, еще через неделю Луна снова проходит узел (второй) орбиты, проходя над экватором. Следующую неделю Луна в южном полушарии и снова максимальное склонение -28° , т.е. в этот момент ее трасса проходит над географической широтой $-28^\circ = 28^\circ$ ю.ш. Однако под максимумами гистограммы Луны (рис. 2, 2) имеется слабый подъем гистограммы землетрясений – это отражение влияния Луны на сейсмическую активность Земли (и показывает ее значимость). Как это влияние проявится на гистограмме, в которой частота землетрясений будет определяться в зависимости от разности широт эпицентра землетрясения и скло-

нения Луны (т.е. географической широты над которой Луна находится в зените) показано на рисунке 2 справа (2, 3).

Первая особенность, обращающая на себя внимание – размах шкалы интервалов широт на правом рисунке 2 (2, 3), стал больше, чем на среднем (2, 2), это означает, что Луна в момент землетрясения находилась в другом по отношению к эпицентру землетрясения полушарии (северном или южном, соответственно). Таких случаев не много, но их можно связать с действием Луны в концепции приливных сил, в которой две приливных волны на противоположных сторонах Земли. Т.е. Луна, находясь над широтой $+\lambda$, вызывает приливную волну на широте $-\lambda$. Таким образом, диапазон разницы широты и склонения расширился влево и вправо на $\sim 28^\circ$ – на максимальное склонение Луны.

Вторая особенность относится к правому рисунку 2 (2, 3) – появился слабый пик в середине гистограммы частот землетрясений, когда Луна находилась на той же широте, где произошло землетрясение – проявление корреляции (слабое). В середине гистограммы частот землетрясений появился слабый пик, когда Луна находилась над широтами, где произошло землетрясение – проявление корреляции (может быть слабое).

Анализ гистограмм частоты землетрясений от часового угла Луны в месте эпицентра землетрясения. Выполнив исследование влияние склонения Луны на землетрясения, естественно продолжить поиск взаимосвязей частоты землетрясений с таким быстро меняющимся параметром движения Луны как её часовой угол в месте землетрясения. Фактически это параметр больше связанный с самой Землей – её суточным вращением, т.к. Луна за солнечные сутки проходит только $\sim 1/28$ часть своей орбиты – относительно малая величина, столь же слабым может быть ожидаемый эффект.

Эфемериды, полученные с сайта JPL [2] содержат параметры движения Луны для топоцентрического наблюдателя, имеющего географические координаты (00 с.ш., 00 в.д.) и нулевую высоту над поверхностью Земли. Эти данные относительно *часового угла* Луны (HA_G – hourangle, Greenwich) необходимо пересчитать для наблюдателя, находящегося на географической долготе ϕ – HA_Q . Параметры HA & ϕ в геометрическом смысле эквивалентны углам, но имеют разные единицы измерения – часы ($-12 \leq HA \leq +12$) и градусы ($-180^\circ \leq \phi \leq +180^\circ$).

Если на Гринвиче часовой угол Луны HA_G , то восточнее Луна уже побывала раньше: $12\phi/180$ часов назад, т.е. ее часовой угол больше на долготу места наблюдения, измеренную в часах: $HA_Q = (HA_G + \phi \frac{12}{180})$. Вспомогательная величина HA_Q получит интервал измерения $(-24, +24)$ часа, который необходимо привести к стандартному интервалу $(-12, +12]$, но эту гистограмму, может быть, имеет смысл продолжить анализировать (рис. 3, справа).

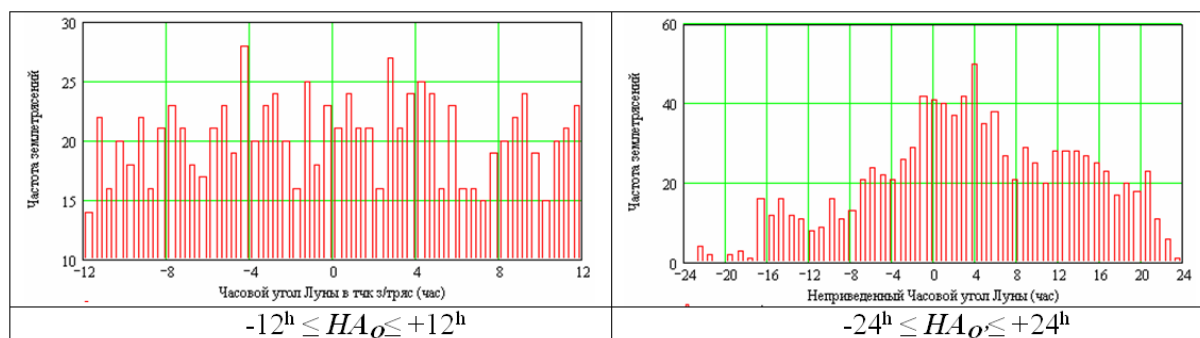


Рис. 3. Гистограмма частоты землетрясений в зависимости от часового угла Луны для наблюдателя в эпицентре землетрясения

Шкала часовых углов Луны, приведенная к стандартному 12-часовому диапазону изменения часовых углов равномерно заполнена, откуда можно предположить, что между частотой землетрясений и часовым углом Луны в эпицентре (рис. 3) закономерности не выявлено. Правая гистограмма на рисунке 3 оставляет надежду, что корреляции имеются и необходимо дальнейшее исследование.

Гистограммы частоты землетрясений от взаимного расположения между Землей, Луной и Солнцем. Методом гистограмм, возможно, обнаружен цикл землетрясений длинной около 2 лет, который обусловлен комбинированным влиянием Солнца и Луны на – Землю.

Если комбинировать 2 около месячных цикла – синодический и сидерический, то получим биения с периодом чуть больше одного года. Построим гистограмму, чтобы проверить, нет ли соответствующего цикла в каталоге землетрясений за 1910-2015 годы. Параметром развертки гистограммы выберем аддитивную величину **Per₂₀₀**, которую определим как сумму освещенности Луны – Il_L (0÷100%) и расстояния Земля-Луна в процентах от минимума до максимума – R_{EL} (0÷100%). $Per_{200} = Il_L + R_{EL}$; . Диапазон развертки гистограммы получается 200% (рис. 4).

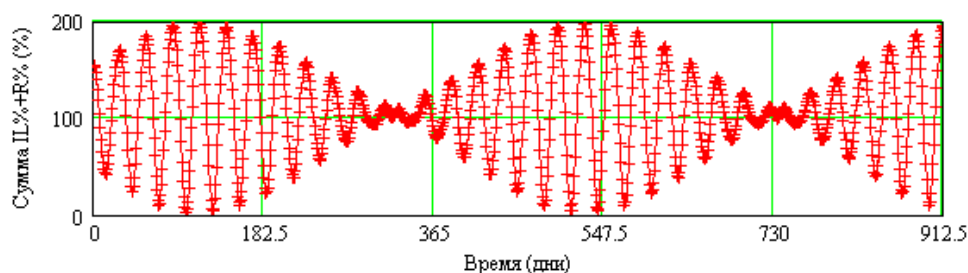


Рис. 4. Около годовой цикл, получающийся при наложении 2-х месячных циклов: синодического – освещенности Луны и сидерического – расстояния Земля-Луна. По оси Х время (2.5 года), считываемое в днях. По оси Y – сумма освещенности Луны (%) и расстояния Земля-Луна (min÷max => 0%÷100%).

Фурье-анализ биений в величине Per₂₀₀ (1910-2015 гг.). На рисунке 5 представлена зависимость величины **Per₂₀₀** вычисленная из эфемерид (красные крестики) и смоделированная при помощи табличных значений звездного и синодического месячного периода (синие линии). Очевидно, что со временем графики заметно расходятся.

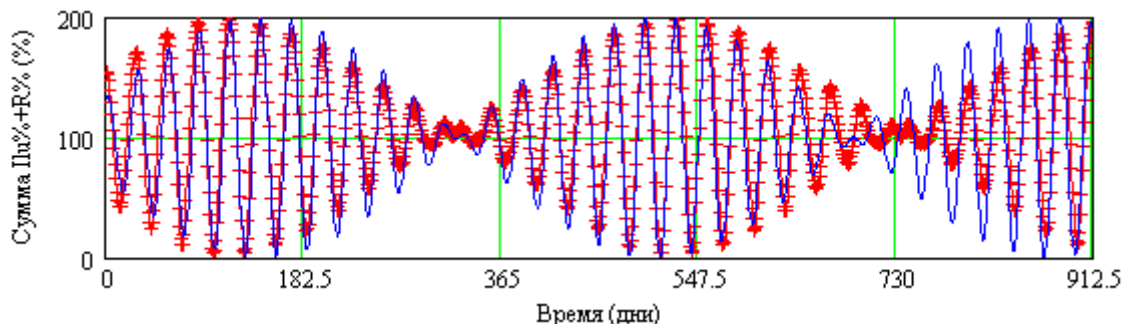


Рис. 5. Экспериментальные и теоретически предсказанные биения в величине Per₂₀₀ за 2.5 года (использовались данные NASA [2,7]).

Применение дискретного вейвлет-анализа. Поскольку, применительно к гистограмме, после анализа с помощью критерия Пирсона [8] стало ясно, что число интервалов в ней следует выбирать осмысленно, с учетом имеющихся у изучаемой системы степеней свободы (которое нам заранее не известно), то логичным является использование вейвлетов, применительно к данным для изучаемой гистограммы.

Простейшим и подходящим по физическому содержанию вейвлетом является вейвлет Дебеша, дискретные преобразования (быстрое прямое и обратное) для которого имеется в математическом пакете mathcad.

Гистограмму для анализа приготовили для полной длины волны биений (т.е. за время 823.61 день) величины **Per₂₀₀** и разбили на $2^{10}=1024$ число интервалов.

После этого выполнили прямое и обратное дискретное вейвлет-преобразование, но с отбрасыванием вейвлетов очень мелкого масштаба (отброшено 4 или 5 уровней из 10), которые в данном случае воспринимаются как шум. Далее оказалось, что в восстановленной гистограмме выявился ряд волн, представленных на рисунке 8.

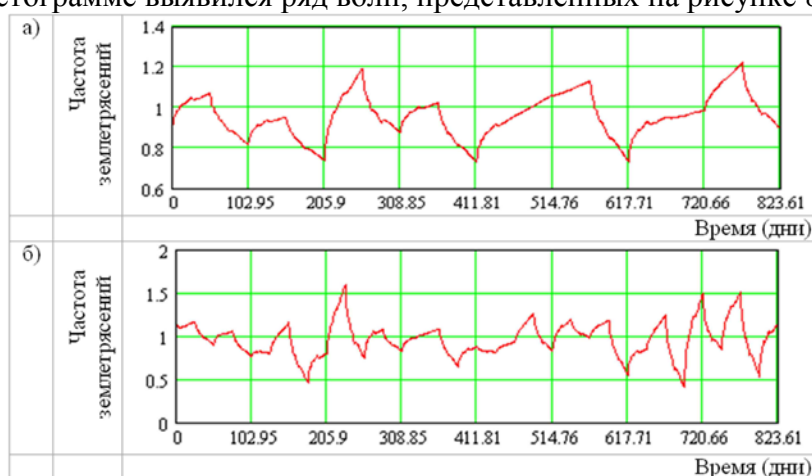


Рис. 6. Гистограмма частоты землетрясений для цикла с периодом времени 823.61 дня, обработанная вейвлетами Дебеша: а) отброшено 5 уровней мелкомасштабных вейвлетов (из 10-ти); б) отброшено 4 таких уровня.

Для того, чтобы понять какую часть из фактической сейсмической активности (гистограммы) занимает выделенная вейвлетами и показанная на рисунке 6 составляющая, обе они представлены на рисунке 7.

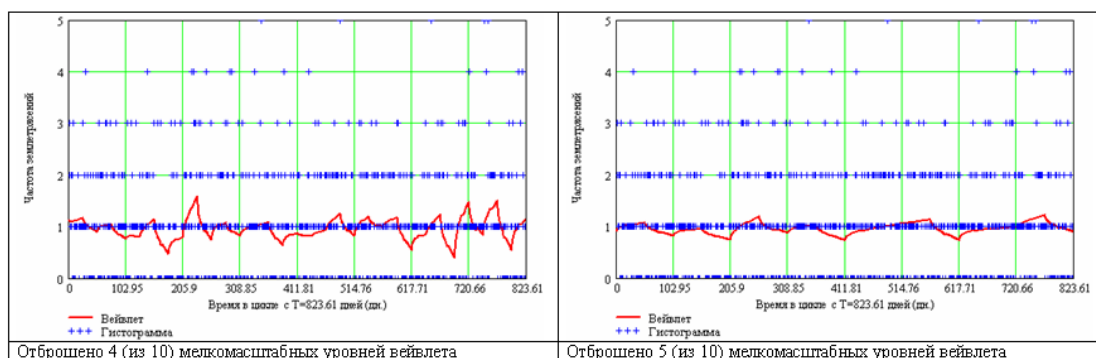


Рис. 7. Гистограмма частоты землетрясений (представлена синими плюсиками) вместе с низкочастотным трендом, выявленным вейвлет-анализом (красная линия), за период времени 823.61 дня.

Рисунок 7 показывает, что выявленный вейвлет-анализом низкочастотный тренд составляет незначительную часть общей сейсмической активности. Это можно показать численно, вычисляя средние значения и стандартное отклонение. Для обеих величин средние значения совпадают и равны 0.956 событий на интервал, стандартное отклонение исходной частоты землетрясений составляет 0.985 событий на интервал, для восстановленной частоты стандартное отклонение на 2 порядка меньше и равно 0.103 события на интервал, если отброшено 5 уровней; стандартное отклонение возрастает до 0.191, если отброшено 4 высокочастотных уровня вейвлетов.

Сопоставление этих чисел показывает, что стохастическая составляющая в сейсмической активности Земли является преобладающей.

Таким образом обоснована роль астрономических факторов в Земля-Луна как триггерного механизма возникновения сильнейших землетрясений. Предложена методика поиска закономерностей в данных геомониторинга - предвестников сильных землетрясений. Получены экспериментальные оценки возможных корреляций между сильными землетрясениями и факторами-предвестниками.

Список литературы

1. VI. Алтай и Саяны, 1992-1999 гг. Мировой центр данных по физике твердой Земли, Москва, Россия, [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: http://zeus.wdcb.ru/wdcb/sep/data/sdata/catalogs/cat_ALT9299.dat
2. HORIZONSWeb-Interface, [Электронный ресурс]. – Режим доступа: URL: <http://ssd.jpl.nasa.gov/horizons.cgi#top> (дата доступа 27.05.2016).
3. The SignificantEarthquakeDatabase, [Электронный ресурс]. – Режим доступа: URL: <http://www.ngdc.noaa.gov/nndc/struts/form?t=101650&s=1&d=1> (дата доступа 30.03.2016).
4. United States Geological Survey's (USGS) Earthquake Hazards Program, Search Earthquake Archives. [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: <http://earthquake.usgs.gov/earthquakes/search/> (дата доступа 03.04.2016).
5. Левин Б.В. О природе некоторых периодических изменений в сейсмическом режиме Земли // Сейсмология, цунами. Вестник ДВО РАН. 2006. – №1. – С. 51-58.
6. Левин Б.В., Чирков Е.Б. Особенности широтного распределения сейсмичности и вращение Земли // Вулканология и сейсмология. – 1999. – № 6. – С. 65-69.
7. NASA. Moonfactsheet. [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: <http://nssdc.gsfc.nasa.gov/planetary/factsheet/moonfact.html> (дата доступа 31.05.2016).
8. Пятницкий А.М. Расстояние Пирсона X^2 . [Электронный ресурс]. Режим доступа: URL: http://bioinformatics.ru/Data-Analysis/Pearson_chisquare_distance.html (дата доступа 31.05.2016).

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА ИОННЫХ РАСТВОРОВ В НАНОФИЛЬТРАЦИОННЫХ МЕМБРАНАХ ⁶

И.И. Рыжков¹, А.В. Минаков^{1,2}, Д.В. Лебедев¹

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск,
rui@icm.krasn.ru

²Сибирский федеральный университет, Красноярск

В последние годы все большее внимание уделяется изучению механизмов мембранного разделения ионных растворов. Эти исследования имеют большое прикладное значение в таких областях как опреснение воды [1], создание сенсоров [2], разработка медицинского оборудования [3] и др. Наночислительные мембраны с размером пор порядка нескольких нанометров являются перспективной технологией разделения растворов солей и органических веществ. Как правило, в растворах такие мембраны приобретают электрический заряд за счет диссоциации функциональных групп или адсорбции заряженных компонентов на поверхности пор. Это оказывает существенное влияние на транспорт ионных растворов через мембрану. Если стенки пор являются проводящими, то поверхностная плотность заряда может быть изменена путем подачи заданного потенциала на мембрану. Это открывает возможности управления ионной селективностью мембраны посредством внешнего воздействия [4].

Транспорт ионов через поры мембраны осуществляется посредством трех механизмов: конвекции, диффузии и электромиграции. Эти процессы могут быть описаны моделью на основе уравнений Навье – Стокса и Пуассона – Нернста – Планка, которая для одновалентного симметричного электролита принимает вид

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{U} \right) = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{U} - F(C_+ - C_-) \nabla \Phi, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_{\pm}}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_{\pm}, \quad \mathbf{J}_{\pm} = C_{\pm} \mathbf{U} - D_{\pm} \nabla C_{\pm} \mp \frac{D_{\pm} F}{RT} C_{\pm} \nabla \Phi - \frac{D_{\pm} C_{\pm}}{RT} \nabla \mu_{ex}, \quad (3)$$

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{F}{\varepsilon \varepsilon_0} (C_+ - C_-). \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{U}$ – вектор скорости, P – давление, ρ – плотность раствора, μ – динамическая вязкость, $C_{\pm}$ – концентрации положительных и отрицательных ионов, $D_{\pm}$ – коэффициенты диффузии ионов, T – температура, F – постоянная Фарадея, R – универсальная газовая постоянная, ε_0 – электрическая постоянная, ε – относительная диэлектрическая проницаемость, $\mu_{ex} = -RT \ln(1 - N_A(a_+^3 C_+ + a_-^3 C_-))$ – дополнительная составляющая электрохимического потенциала, учитывающая конечных размер ионов ($a_{\pm}$ – диаметры ионов, N_A – число Авогадро).

Вблизи границы раздела между стенкой поры и ионным раствором (электролитом) образуется двойной электрический слой. Одна часть этого слоя образована зарядом стенки, другая часть – ионами противоположного знака в растворе. Характерный

⁶ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 15–19–0017).

размер двойного электрического слоя определяется длиной Дебая, на которой происходит экранирование заряда стенки ионами раствора:

$$\lambda = \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_0 R T}{2 C_0 F^2}}. \quad (5)$$

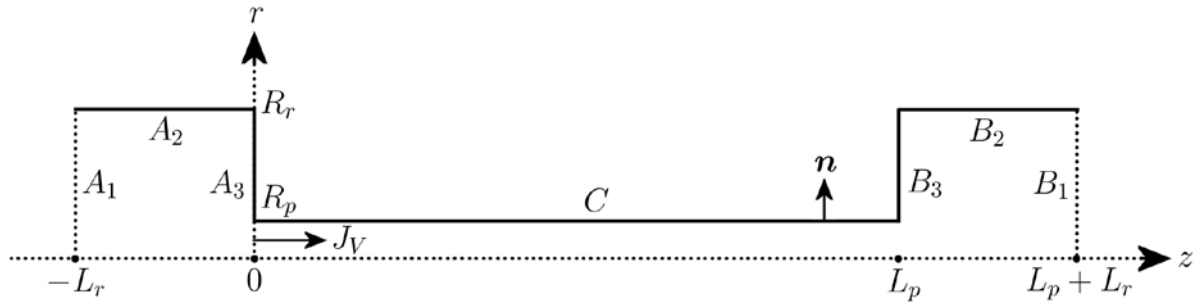


Рис. 1. Схема расчетной области.

При концентрации ионов $C_0 = 10$ мол/м³ длина Дебая составляет $\lambda = 3.04$ нм.

Рассмотрим стационарную задачу о транспорте ионов через пору мембраны. На рис. 1 показана схема расчетной области, которая состоит из цилиндрического канала (поры) длины L_p и радиуса R_p , соединяющего два цилиндрических резервуара длины L_r и радиуса R_r . На входе в резервуар A_1 задается постоянная концентрация ионов C_0 , нулевой потенциал и осевая скорость J_V , на выходе из резервуара B_1 – отсутствие диффузионного потока и градиента потенциала, а также давление $P = 0$. На стенках $A_{2,3}$, $B_{2,3}$ ставятся условия прилипания, непроницаемости и отсутствия градиента потенциала. На стенке канала C задается фиксированный потенциал Φ_0 или плотность заряда σ , а также ставятся условия прилипания и непроницаемости. Таким образом, граничные условия имеют вид:

$$\begin{aligned} A_1: & \quad U = 0, \quad W = J_V, \quad C_{\pm} = C_0, \quad \Phi = 0; \\ B_1: & \quad P = 0, \quad \partial C_{\pm} / \partial \mathbf{n} = 0, \quad \partial \Phi / \partial \mathbf{n} = 0; \\ A_{2,3}, B_{2,3}: & \quad U = 0, \quad W = 0, \quad J_{\pm} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \partial \Phi / \partial \mathbf{n} = 0; \\ C: & \quad U = 0, \quad W = 0, \quad J_{\pm} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \Phi = \Phi_0 \quad \text{или} \quad \varepsilon \varepsilon_0 \partial \Phi / \partial \mathbf{n} = \sigma. \end{aligned} \quad (6)$$

Для численной реализации описанной модели использовался программный комплекс вычислительной гидродинамики ANSYS Fluent 14.5 Academic Version. В расчетной области задавалась сетка (20 узлов и 1500 узлов в радиальном и осевом направлении поры). Стационарная задача решалась итерационным путем с помощью методов Coupled и SIMPLEC.

Расчеты проводились для водного раствора хлорида калия, который диссоциирует на ионы K^+ и Cl^- . Были взяты следующие размеры поры и резервуаров: $L_p = 1000$ нм, $R_p = 2$ нм, $L_r = 100$ нм, $R_r = 25$ нм. На входе в левый резервуар задавалась концен-

трация $C_0 = 10 \text{ мол/м}^3$ и осевая скорость $J_V = 100 \text{ мкм/с}$. Использовались следующие значения потенциала на стенке поры (в скобках приведены номера расчетных случаев): -0.02 В (1), -0.04 В (2), -0.06 В (3), -0.08 В (4), -0.10 В (5), -0.12 В (6), -0.14 В (7).

Профили потенциала и концентраций ионов в поперечном сечении в центре поры показаны на рис. 2 для указанных выше расчетных случаев. Отрицательный потенциал на стенке приводит к значительному повышению концентрации положительных ионов в поре, в то время как концентрация отрицательных ионов существенно снижается. Это связано с перекрытием двойных электрических слоев от противоположных стенок. С увеличением величины потенциала этот эффект усиливается, при этом растет неоднородность потенциала и концентраций в радиальном направлении.

Распределения потенциала, концентраций ионов и давления вдоль поры представлены на рис. 3. Они получены путем осреднения соответствующих величин по поперечному сечению поры. Из рис. 3 (с,d) видно, что концентрация положительных (отрицательных) ионов в поре с отрицательным потенциалом на стенке значительно возрастает (снижается) по сравнению с концентраций на входе в резервуар.

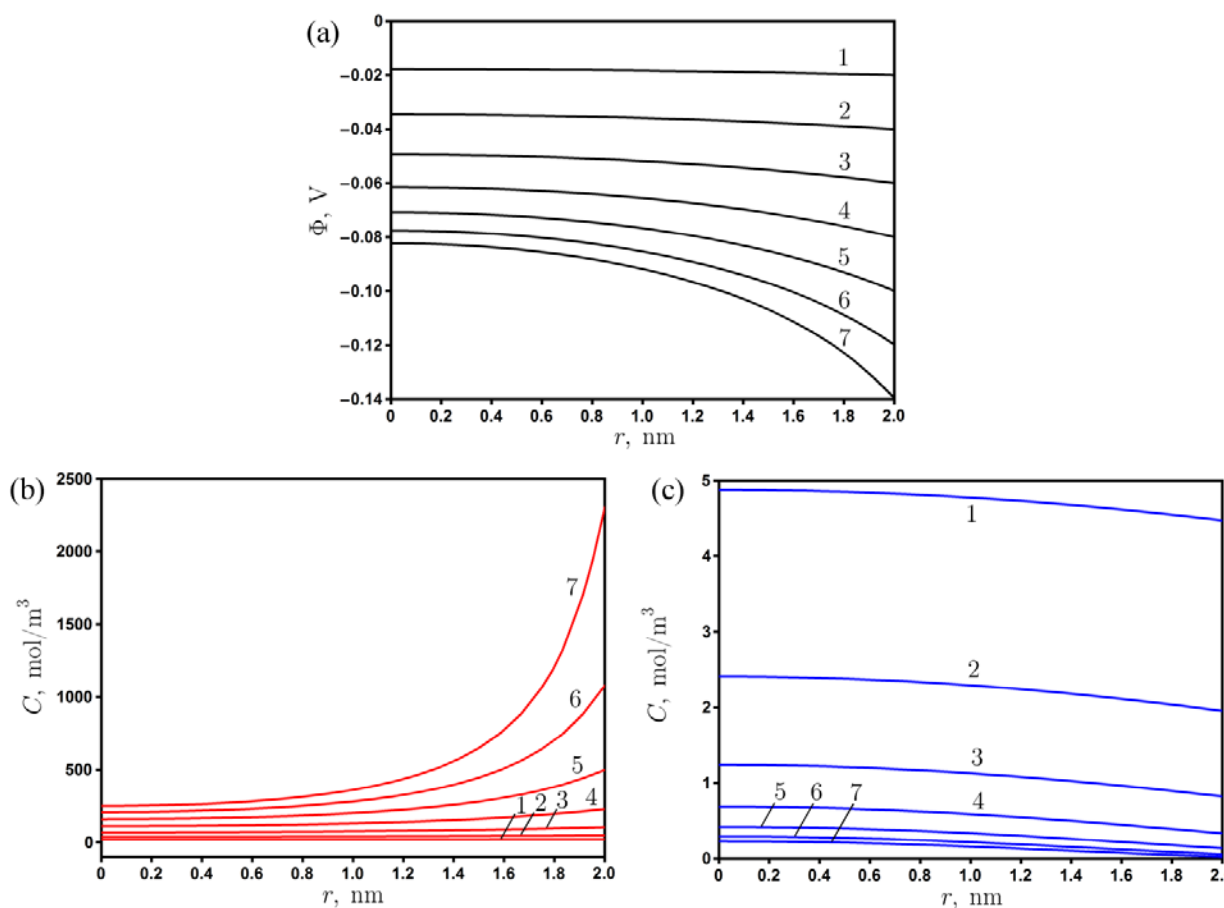


Рис. 2. Профили потенциала (а), концентрации положительного (b) и отрицательного (с) ионов в поперечном сечении поры.

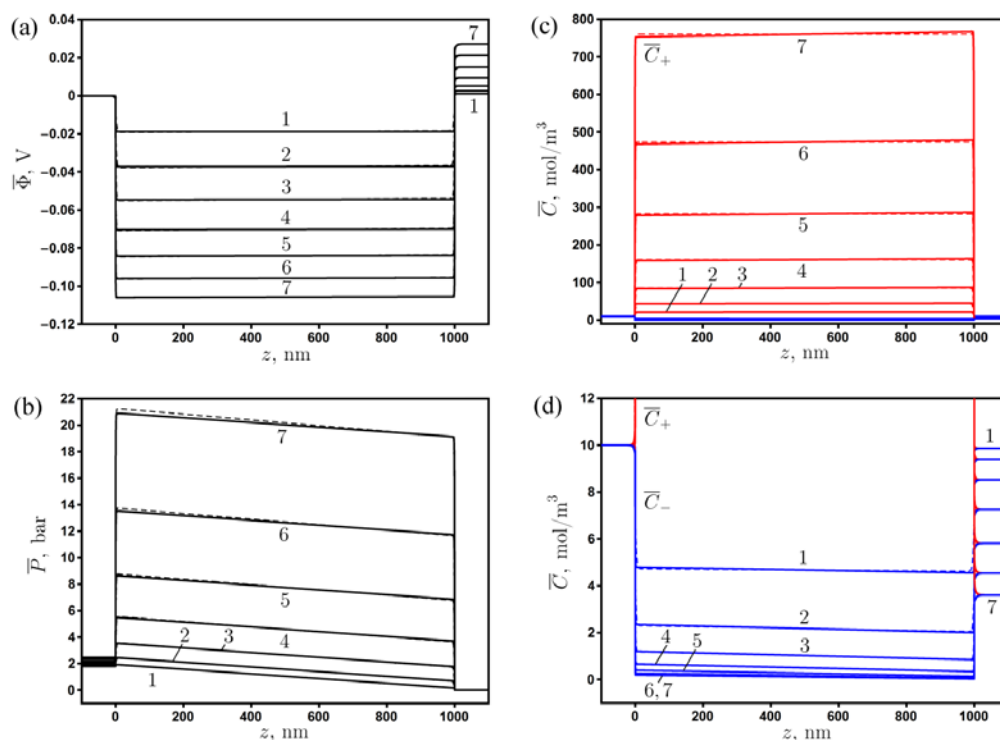


Рис. 3. Профили осредненных по поперечному сечению поры потенциала (а), давления (б), концентрации положительных и отрицательных ионов (с,д).

На входе в пору и выходе из нее происходит резкое изменение потенциала и концентраций. Величины скачков могут быть определены из условия равенства электрохимических потенциалов, которое приводит к соотношениям равновесия Донана. Кроме этого, на рис. 3 (б) показано, что давление также испытывает резкое изменение вблизи областей входа и выхода. Градиент давления компенсирует кулоновскую силу, действующую на нескомпенсированный заряд в электрическом поле (см. правую часть уравнения (1)). С величины потенциала на стенке концентрация соли на выходе из поры падает. Таким образом, в результате нанофильтрации раствора соли через мембрану с заряженными порами концентрация соли в растворе может быть существенно снижена [5].

Список литературы

1. Souhaimi M.K., Matsuura T. Membrane Distillation: Principles and Applications, Elsevier B.V., Amsterdam, 2011.
2. Rajaputra S., Mangu R., Clore P. et al. Multi-walled carbon nanotube arrays for gas sensing applications. Nanotechnology, 2008. V.19, Issue 34, p. 345502.
3. Seifalian A., Achala de Mel, Kalaskar D.M. Nanomedicine, One Central Press, Manchester, 2008.
4. M. Nishizawa, V.P. Menon, C.R. Martin, Metal nanotubule membranes with electrochemically switchable ion-transport selectivity, Science, 1995. V. 258, p. 268.
5. I.I. Ryzhkov, Minakov A.V. Theoretical study of electrolyte transport in nanofiltration membranes with constant surface potential / charge density. Journal of Membrane Science, 2016. V. 520, p. 515.

ТЕРМОДИФфуЗИОННОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ В БИНАРНЫХ СМЕСЯХ С ФАЗОВЫМ РАССЛОЕНИЕМ ЖИДКОСТЬ – ЖИДКОСТЬ ⁷

И.И. Рыжков¹, С.В. Козлова¹, М.И. Медведева^{1,2}

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск,
rii@icm.krasn.ru

²Сибирский федеральный университет, Красноярск

Для описания и предсказания процессов тепломассообмена в смесях необходимо знание коэффициентов переноса. К ним относятся коэффициенты теплопроводности, диффузии, а также термодиффузии (если перенос массы под действием градиента температуры, называемый также эффектом Соре, является существенным). Эти коэффициенты в общем случае зависят от температуры и концентрации компонентов смеси. Если эта зависимость слабая или неоднородности температуры и концентрации малы, то коэффициенты переноса можно считать постоянными. Однако, в бинарных смесях вблизи критической точки фазового расслоения жидкость – жидкость эффект термодиффузионного разделения может быть весьма значительным в силу очень слабой диффузии. В этом случае малая разность температур приводит к возникновению большой разности концентраций. При этом необходимо учитывать зависимость физических свойств от температуры и концентрации для корректного описания процесса разделения.

Поток массы компонента бинарной смеси в общем случае дается формулой [1]

$$J = -\rho D \nabla C - \rho C(1-C) D_T \nabla T, \quad (1)$$

где C – концентрация компонента, ρ – плотность смеси, D – коэффициент диффузии, D_T – коэффициент термодиффузии. Эти физические свойства являются функциями температуры T и концентрации C . Концентрация другого компонента смеси равна $1-C$.

Типичная фазовая диаграмма для бинарной смеси с фазовым расслоением показана на рис. 1. В области выше бинодали компоненты смеси полностью смешиваются, в области ниже бинодали смесь расслаивается на две фазы. Область между бинодалью и спинодалью соответствует метастабильному состоянию однофазной смеси. Бинодаль и спинодаль пересекаются в точке, соответствующей критической температуре растворимости ($T = T_C$). В работе [2] было показано, что асимптотическое поведение коэффициентов диффузии, термодиффузии и Соре при приближении к критической температуре из однофазной области описывается формулами

$$D \sim \left(\frac{T - T_C}{T} \right)^\gamma, \quad D_T \sim D_{T0}, \quad S_T = \frac{D_T}{D} \sim \left(\frac{T - T_C}{T} \right)^{-\gamma}, \quad (2)$$

где $T > T_C$, при этом $\gamma > 0$, D_{T0} – постоянные величины. Теоретический анализ показывает, что $\gamma = 0.67$ при $T \rightarrow T_C$ [2]. Таким образом, при приближении к критической температуре растворимости из однофазной области коэффициент диффузии стремится к нулю, коэффициент термодиффузии остается постоянным, в то время как коэффициент Соре стремится к бесконечности. В результате малые градиенты температуры могут вызывать значительные градиенты концентрации в стационарном состоянии (при $J = 0$, см. (1)).

Рассмотрим стационарное термодиффузионное разделение бинарной смеси в плоском слое, горизонтальные границы которого поддерживаются при различных по-

⁷ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15–01–03293).

стоянных температурах (рис. 2). Градиент температуры вызывает разделение смеси под действием эффекта термодиффузии. Такая конфигурация часто используется для экспериментального измерения коэффициентов диффузии и термодиффузии в смесях.

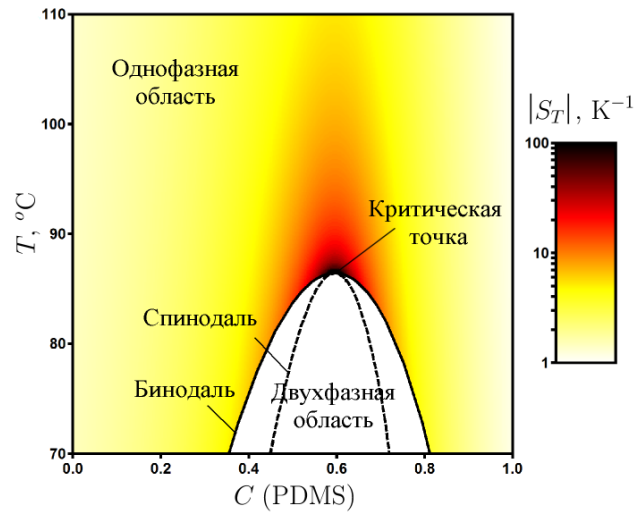


Рис. 1. Фазовая диаграмма бинарной смеси полимеров полидиметилсульфоксид (PDMS) – полиэтилметилсульфоксид (PEMS) [3]. Цветом показано распределение коэффициента S_{ore} .

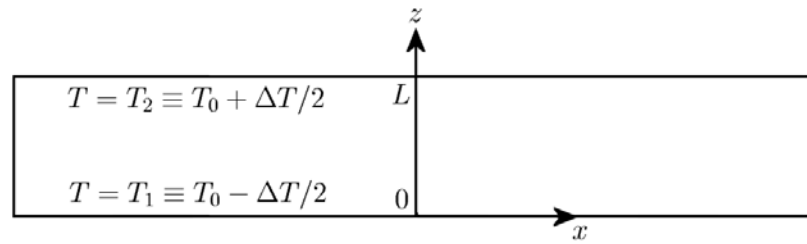


Рис. 2. Плоский слой с разностью температур между стенками.

Распределения температуры T и концентрации C в смеси описываются одномерными уравнениями переноса тепла и массы:

$$\frac{d}{dz} \left(\kappa(T, C) \frac{dT}{dz} \right) = 0, \quad (3)$$

$$\frac{d}{dz} \left(\rho(T, C) \left(D(T, C) \frac{dC}{dz} + C(1-C) D_T(T, C) \frac{dT}{dz} \right) \right) = 0. \quad (4)$$

Здесь κ – коэффициент теплопроводности. На границах слоя задаются значения температуры, а также ставится условие отсутствия диффузионного потока массы:

$$\begin{aligned} z=0: \quad T = T_1 \equiv T_0 - \Delta T / 2; \quad z=L: \quad T = T_2 \equiv T_0 + \Delta T / 2; \\ z=0, L: \quad D(T, C) \frac{dC}{dz} + C(1-C) D_T(T, C) \frac{dT}{dz} = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь T_0 – средняя температура, ΔT – разность температур между стенками. В случае постоянной теплопроводности κ решение уравнения (3) с учетом (5) имеет вид:

$$T = T_1 + (T_2 - T_1) \frac{z}{L} = T_0 + \frac{\Delta T}{L} \left(\frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right). \quad (6)$$

Интегрирование уравнения (4) с граничным условием (5) приводит к задаче о нахождении концентрации как функции температуры $C = C(T)$:

$$\frac{dC}{dT} = C(1-C)S_T(T, C), \quad (7)$$

$$C(T_1) = C_1. \quad (8)$$

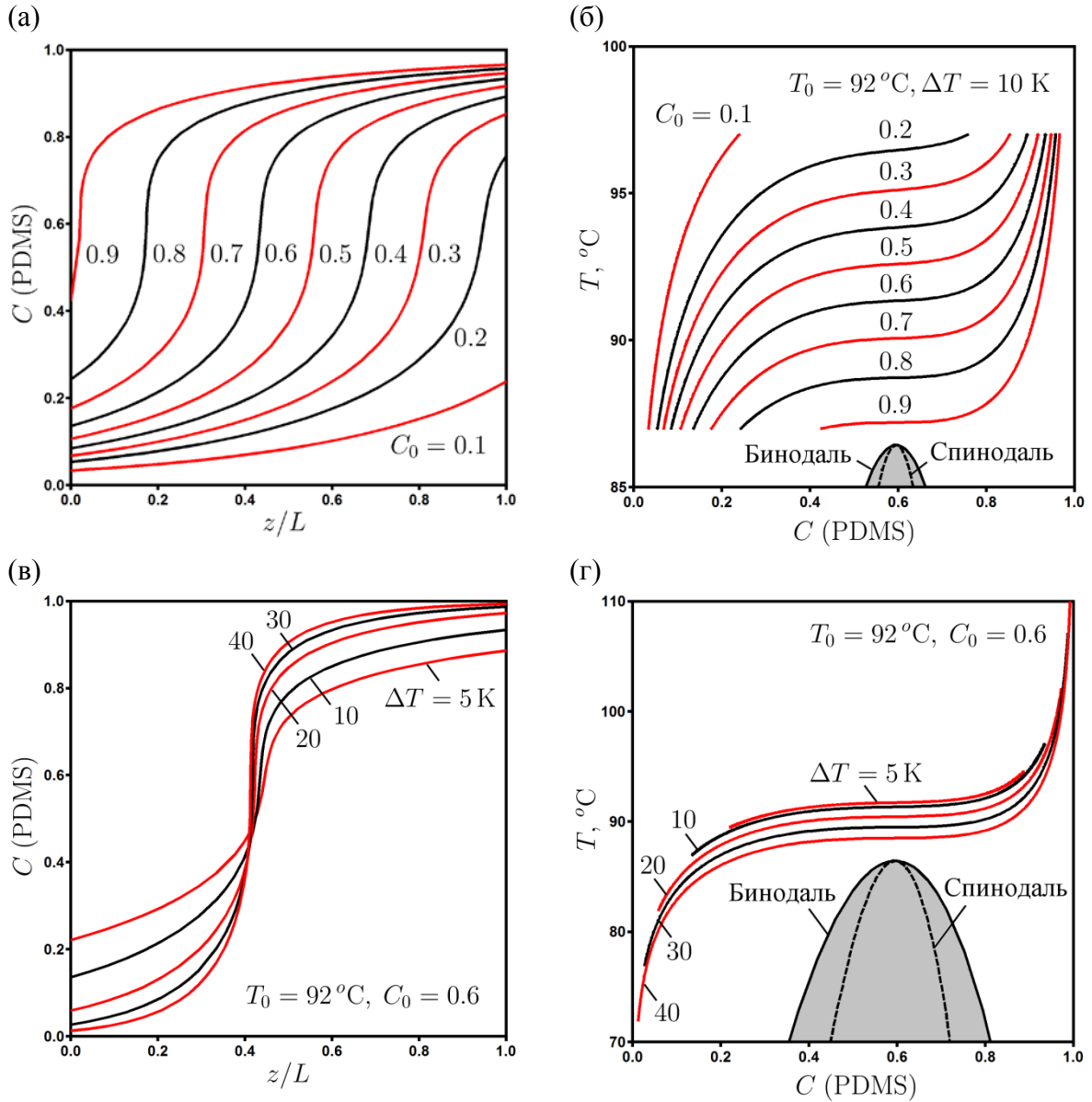


Рис. 3. Профили концентрации в смеси полимеров PDMS – PEMS в зависимости от средней концентрации (а,б) и разности температур между стенками (в,г).

Здесь C_1 – значение концентрации на стенке $z = 0$ (при $T = T_1$), которое определяется из условия сохранения массы

$$\int_{T_1}^{T_2} (C(T) - C_0) dT = 0 \quad (9)$$

в предположении $\rho = const$. Используя найденную зависимость $C(T)$ и решение (6), можно получить зависимость концентрации от координаты в виде $C = C(z)$.

В случае малых концентраций ($C \ll 1$) и зависимости коэффициента $S_{\text{оре}}$ от температуры вида $S_T = S_T(T)$, задача (7) – (9) имеет точное решение

$$C = \frac{C_0(T_2 - T_1) \exp\left(-\int_{T_1}^T S_T(\tau) d\tau\right)}{\int_{T_1}^{T_2} \exp\left(-\int_{T_1}^T S_T(\tau) d\tau\right) dT}. \quad (10)$$

Рассмотрим бинарную смесь полимеров, фазовая диаграмма которой показана на рис. 1. Коэффициенты диффузии и термодиффузии данной смеси даются формулами, основанными на аппроксимации экспериментальных данных [3]:

$$D = D^0 \frac{T - T_{sp}}{T} \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right), \quad D_T = D_T^0 \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right), \quad (11)$$

$$S_T = \frac{D_T}{D} = \frac{D_T^0}{D^0} \left(\frac{T - T_{sp}}{T}\right)^{-1},$$

где $T_{sp} = -423C^4 + 356.8C + 200.3$ К задает кривую спинодали, $D^0 = 24.7 \cdot 10^{-11}$ м²/с, $D_T^0 = -1.88 \cdot 10^{-11}$ м²/сК, $T_A = 1460$ К – постоянные величины. В данном случае задача (7)–(9) решалась численно.

На рис. 3 показаны профили концентрации $C = C(z)$, соответствующие стационарному термодиффузионному разделению в зависимости от средней концентрации C_0 (а) и приложенной разности температур ΔT (в). Данные профили также показаны в виде функций $T = T(C)$ на плоскости фазовой диаграммы в координатах C, T на рис. 3 (б,г). Видно, что вблизи критической температуры растворимости, соответствующей пересечению кривых бинодали и спинодали, даже малая разность температур в 5 К приводит к значительному разделению компонентов (более 60 %). При больших разностях температур (до 40 К) разделение становится практически полным, см. рис. 3 (в,г).

Таким образом, эффект стационарного термодиффузионного разделения в околокритических бинарных смесях может быть весьма значительным. Однако, в силу малости коэффициента диффузии, для достижения стационарного состояния может потребоваться достаточно много времени (так как характерное время процесса есть L^2 / D).

Список литературы

1. Рыжков И.И. Термодиффузия в смесях: уравнения, симметрии, решения и их устойчивость. Издательство СО РАН, 2013. 200 с.
2. Luettmer-Strathmann J. Thermodiffusion in the critical region. In Thermal non-equilibrium phenomena in fluid mixtures, edited by S. Wiegand and W. Kohler. p. 24–37. Springer, 2002.
3. Voit A., Krekhov W., Kohler W. Laser-induced structures in a polymer blend in the vicinity of phase boundary. Phys. Rev. E, 2007. V. 76, 011808.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФРАКЦИИ МОНОХРОМАТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЛАЗЕРА НА МОНОСЛОЕ ЭРИТРОЦИТОВ

Г.П.Саркисян^{1,2}, А.Г.Саркисян¹, А.М. Даниелян¹,

¹Институт химической физики НАН Республики Армения,

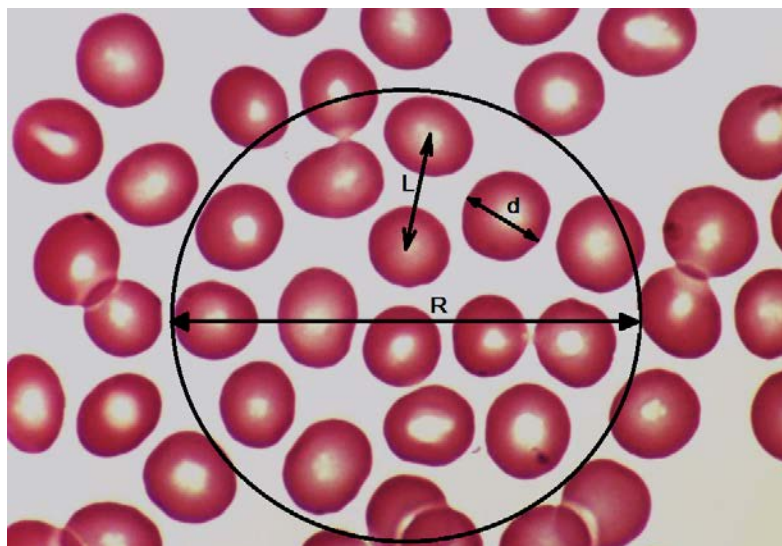
²Сибирский федеральный университет, Красноярск, РФ,

hrachya_sargsyan@mail.ru

Рассмотрим дифракцию монохроматического излучения лазера на мазке крови в идеализированном случае. Пусть клетки на мазке образуют систему дисков одинаковой толщины, и все диски имеют одинаковый диаметр.

При решении этой задачи была использована скалярная теория дифракции Фрунгофвра [1]. В основе разработанного подхода лежит развитый Кирхгофом математический аппарат, что является обобщением принципа Гюйгенса-Френеля. Согласно этому принципу дифракционная картина образуется в результате интерференции когерентных волн, идущих от вторичных источников, которыми являются точки дифрагирующего экрана. Приближение Кирхгофа для случая, когда размер диска много больше длины волны падающего излучения, дает хорошие результаты.

В реальных популяциях эритроцитов поперечные размеры клеток 5-7 раз превышают их толщину. Наличие такого различия между поперечными размерами и толщиной клеток позволяет ограничиваться двумерной задачей. Ясно, что такое ограничение приведет к дополнительным теоретическим ошибкам. Однако полученные экспериментальные данные подтверждают допустимость такого ограничения.



Модель препарата с одинаковыми клетками.

Для характеристики поля препарата введем некоторые линейные параметры.

I. L - среднее расстояние между центрами эритроцитов. Оно зависит от условий приготовления мазка. Предполагая отсутствие наложения (перекрывания) эритроцитов

(т.е. $L > d$), потребуем выполнение условия $L \gg \lambda$ (где λ - длина волны падающего излучения). Это позволяет рассматривать дифракцию на каждой клетке отдельно.

2. R - размер излучаемого объекта. Он определяется сечением пучка лазерного излучения. Например, для гелий-неонового лазера ЛГ-52-2 $R = 1 \text{ мм}$, т.е. площадь поперечного сечения пучка $= \pi \text{ мм}^2$. Простым вычислением можно показать, что при условии $d < L < 2d$ под пучком излучения одновременно попадают порядка 10^4 клеток. Этим подтверждается возможность дифрактометрического метода одновременно получить информацию о большом статистическом массиве.

В оптике известно, что в зоне дифракции Фраунгофера при выполнении условия

$$z \gg \frac{2\pi L^2}{\lambda}, \quad (1)$$

где z - расстояние между дифрагирующим экраном и плоскостью наблюдения, можно работать без собирающей линзы, принимая, что все параллельные лучи собираются в одной точке на экране наблюдения.

Вычисления резко упрощаются в случае, когда обеспечивается однородность и изотропность поля препарата. Будем рассматривать мазок как случайное точечное поле, подчиняющееся закону Пуассона, где каждая точка является центром одного эритроцита. При пуассоновском распределении центры эритроцитов образуют однородное и изотропное точечное поле. Плотность вероятности попадания n точек на участок площадью s определяется по формуле (см. работу [2]) :

$$w(n) = (ms)^n e^{-ms} / n! \quad (2)$$

где m - среднее число точек на единицу площади.

Следуя принципу построения дифракционной теории Френеля, согласно которому вторичные волны входят в интерференционное взаимодействие попарно, рассмотрим дифракцию на двух клетках. Так как клетки распределены согласно закону Пуассона, то для рассмотрения можно брать любые две точки (клетки).

Пусть центр первой клетки находится в начале прямоугольной системы координат, а центр второй клетки случайным образом расположен в изучаемом участке. Введем амплитуду поля $A(\vec{r}_1)$ - достигающего на экран наблюдения после дифракции на i -ой клетке, где $\vec{r}_i$ - радиус вектор i -ой клетки. Тогда, для первой клетки получим согласно [1]

$$A(0) = A_0 \left[\frac{2J_1(kwa)}{kwa} \right] \quad (3)$$

Для второй клетки в полярной системе координат амплитуда поля определяется выражением:

$$A(\vec{r}_1) = A(0) \exp(-iwr \cos \theta) \quad (4)$$

где $(\vec{r}_1)$ - радиус вектор центра второй клетки.

Формула (4) показывает, что клетки образуют пуассоновский фазовый экран.

Согласно [3] при интерференционном взаимодействии двух случайных полей средняя интенсивность интерференционной картины в точке (p, q) равна;

$$I(p, q) = \langle |A(p, q)|^2 \rangle I_1 + I_2 + 2|G|^2 \text{Re} B(\vec{r}_1) \quad (5)$$

где I_1, I_2 - интенсивность для каждой из клеток в отдельности, G - функция, равная в рассматриваемом случае единице в пределах клетки и нулю - за ее пределами, $B(\vec{r}_1)$ - функция автокорреляции поля $A(\vec{r}_1)$. Задача сводится к вычислению $B(\vec{r}_1)$. Ввиду однородности и изотропности поля препарата $B(\vec{r}_1)$ зависит только от величины $|\vec{r}_1|$. Согласно [3] функция автокорреляции $B(|\vec{r}_1|)$ записывается в вида:

$$B(r) = \int_0^r \int_0^{2\pi} A(0)A(\rho) \rho d\rho d\theta. \quad (6)$$

где (ρ, θ) - полярные координаты.

После подстановки $A(0)$ и $A(\rho)$ из формул (3) и (4) в (6) получаем для функции автокорреляции поля $A(\vec{r}_1)$:

$$B(r) = I_1 \int_0^r \int_0^{2\pi} \exp[-ikwpcos\theta] \rho d\rho d\theta \quad (7)$$

С помощью интегрального представления функций Бесселя I рода целого порядка [7]:

$$J_n(z) = \frac{i^{-n}}{\pi} \int_0^{2\pi} e^{-izcos\theta sin\theta} d\theta \quad (8)$$

и известного рекуррентного соотношения для $J_n(z)$:

$$\frac{d}{dz} \{z^{n+1} J_{n+1}(z)\} = z^{n+1} J_n(z) \quad (9)$$

выражение $A(\vec{r}_1)$ приводится к известной формуле, устанавливающей зависимость амплитуды поля в точке p экрана наблюдения от размера дифрагирующего объекта, его формы и характеристик падающего излучения:

$$A(p, q) = C'S \left[\frac{2J_1(kwa)}{kwa} \right], \quad (10)$$

где J_1 - функция Бесселя I рода I порядка.

Коэффициент

$$Q(w) = 2J_1(kwa)/(kwa) \quad (11)$$

отражает характер изменения амплитуды поля в плоскости наблюдения. Распределение интенсивности в дифракционной картине на экране наблюдения определяется следующим выражением:

$$I(p, q) = [A(p, q)]^2 = I_0 [2J_1(kwa)/(kwa)]^2 \quad (12)$$

где I_0 - интенсивность в нулевом направлении.

Нормированная функция распределения интенсивности в картине дифракции будет иметь такой вид:

$$K(w) = [2J_1(kwa)/(kwa)]^2 \quad (13)$$

Функция $K(w)$ отражает зависимость между размером объекта и углом дифракции. Действительно, после замены переменной $kwa = \pi\mu$, с учетом выражений $w = \sin\alpha$, $k = 2\pi/\lambda$, $a = d/2$, получаем

$$d \sin\alpha = \mu\lambda \quad (14)$$

где d - диаметр эритроцита; α - угол между направлением (p, q) и центральным направлением $(p=q=0)$; μ - параметр функции Бесселя.

Формула (14) является основной формулой галометрии - способ оценки размеров объектов методом дифракции световой волны на краях этих объектов.

Действительно, из (14) видно, что при $\mu = \text{const}$ и определенном значении длины волны, между диаметром круглого объекта (например, эритроцита) и синусом угла дифракции обеспечивается взаимно однозначное соответствие.

Простейшим способом решения обратной задачи дифракции – это измерение угла дифракции в точке экстремума (например, первого максимума) на экрана наблюдения, использование табличного значения μ для этой точки, подстановка этих величин в формулу (14) и вычисление размера:

$$d = \frac{\mu_{\text{экстр}} \lambda}{\sin\alpha_{\text{экстр}}} = \frac{\text{const}}{\sin\alpha_{\text{экстр}}} \quad (15)$$

где $\mu_{\text{экстр}}$ - значение параметра в точке экстремума, $\alpha_{\text{экстр}}$ - соответствующий угол дифракции, const - постоянная величина, при определенном значении длины волны (например, для гелий-неонового лазера $\lambda = 0.63$ мкм).

Выражение для $B(r)$ запишется в виде:

$$B(r) = 2\pi I_1 \frac{J_1(kw(r-d))(r-d)}{kw} \quad (16)$$

где I_1 - интенсивность для отдельной клетки. Предполагается, что $r-d > 0$.

Для пуассоновского фазового экрана средняя интенсивность дифракционной картины в некоторой точке на экране наблюдения определяется по формуле:

$$I(w) = \frac{1}{\pi L^2} \int_d^R \int_0^{2\pi} \{I_1 + I_2 + 2|G|^2 ReB(r) r dr d\varphi\}. \quad (17)$$

Здесь проведена нормировка по площади, охватывающая любую пару клеток.

С учетом выражения (16), а также (8) и (9), (17) записывается в виде:

$$I(w) = 2 \frac{(R-d)^2}{L^2} I_1 \left\{ 1 + \int_0^{R-d} (r-d)^2 J_1(kw(r-d)) * J_0(kw(r-d)) d(kw(r-d)) \right\} \quad (18)$$

Воспользуясь интегральным соотношением для функций Бесселя целого порядка (см. [6]):

$$\int_0^z t^2 J_1(t) J_0(t) dt = \frac{z^3}{4} \{J_1(z) J_0(z) + J_2(z) J_1(z)\}, \quad (19)$$

принимая во внимание рекуррентную формулу (9), выражение (18) записываем в виде:

$$I(w) = 2 \frac{(R-d)^2}{L^2} I_1 \left\{ 1 + \left[\frac{2J_1(kw(R-d))}{kw(R-d)} \right]^2 \right\} \quad (20)$$

При определенном значении $w \geq w_{1min}$ где w_{1min} - координата точки первого минимума в картине дифракции, второе слагаемое в больших скобках правой части выражения (20) всегда много меньше единицы. Величина $2 \frac{(R-d)^2}{L^2}$ пропорциональна числу клеток внутри сечения пучка лазерного излучения. Таким образом, в первом приближении можно принимать, что интенсивность дифракционной картины от одинаковых клеток в направлении $w = \sin \alpha$ на экране наблюдения складывается из интенсивностей всех клеток вместе:

$$I(w) = NI_1(w) \quad (21)$$

где N - число клеток, участвующих в образовании дифракционной картины, I_1 - интенсивность для отдельной клетки в точке w экрана наблюдения.

Полученный результат показывает, что из дифрактограммы (кривая распределения интенсивности дифракционной картины в плоскости наблюдения) множества одинаковых клеток можно установить диаметр эритроцитов, аналогично случаю одной клетки.

В реальных популяциях эритроцитов имеется анизоцитоз, который естественно приведет к изменению дифракционной кривой, по сравнению со случаем одинаковых клеток. Характер изменения дифрактограммы будет зависеть от характера анизоцитоза.

Список литературы

1. Саркисян Г.П., Дубынин В.Н., Мкоян Ф.А., Хлэбопрос Р.Г. Теоретические аспекты дифрактоэритрометрии. – Красноярск, 1984. - 30 с. (Препринт N 35Б/ИФ СО АН СССР).
2. Крамер Г. Математические методы статистики.- М.: Наука, 1975. 520с.
3. Юу Ф.Т.С. Введение в теорию дифракции обработки информации и галографию. - М.: Советское радио, 1979,- 304с.
4. Рытов С.М. Введение в статистическую радиофизику. Ч.1. Случайные процессы. - М.: Наука, 1979.
5. Ахманов С.А., Дьяков Ю.Е., Чиркин А.С. и др. Введение в статистическую радиофизику и оптику. - М.: Наука, 1981.
6. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Марычев О.И. Интегралы и ряды. Специальные функции. - М: Наука, 1983. -750с.
7. Справочник по специальным функциям с формулами, правилами и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовича и И. Стиган. - М.: Наука, 1979.-830с.

О ПРИМЕНЕНИИ ЦЕННОСТНОГО ПОДХОДА ДЛЯ АНАЛИЗА МЕХАНИЗМОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИФФУЗИИ

Г.П.Саркисян^{1,2}, А.Г.Саркисян¹, А.М. Даниелян¹,

¹Институт химической физики НАН Республики Армения,

²Сибирский федеральный университет, Красноярск, РФ,

hrachya_sargsyan@mail.ru

Приведем краткое содержание разработанного нами общего формализма для описания нелинейной диффузии в многокомпонентной среде [1; 3; 4; 6].

Представим, что физическое пространство разбито на ячейки с однородным химическим составом и опишем элементарные процессы переноса между ними. Пронумеруем эти ячейки римскими цифрами I и II и пометим все компоненты и величины, связанные с ними, верхними индексами I и II соответственно. Списки компонентов ячеек отличаются только верхним индексом: $A_1^I, \dots, A_n^I, A_1^{II}, \dots, A_n^{II}$.

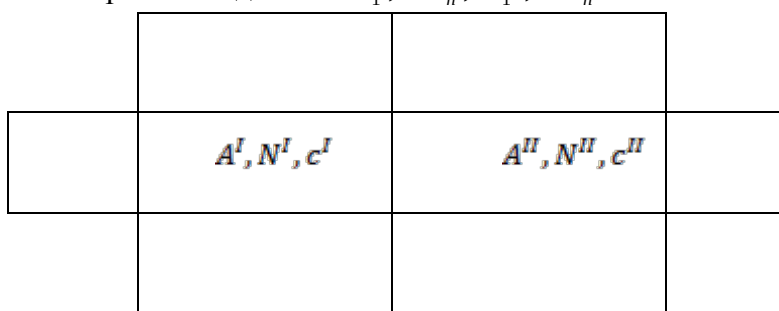


Рис.1. Модель ячеечного перескока с участием ближайших соседей

Механизм диффузии определяется как список элементарных переходов между ячейками, описываемых своими стехиометрическими уравнениями:

$$\sum_i \alpha_{ri}^I A_i^I + \sum_i \alpha_{ri}^{II} A_i^{II} \rightarrow \sum_i \beta_{ri}^I A_i^I + \sum_i \beta_{ri}^{II} A_i^{II} . \quad (1)$$

Коэффициенты $\alpha_{ri}^{I,II}$ и $\beta_{ri}^{I,II}$ являются неотрицательными. Обычно предполагают, что они являются целыми числами, но в специальных случаях необходимы и достаточны действительные числа. Элементарные акты (1) описывают диффузию и не включают химическое превращение компонент. Общее количество каждой компоненты совпадает с левой и с правой стороны (1):

$$\alpha_{ri}^I + \alpha_{ri}^{II} = \beta_{ri}^I + \beta_{ri}^{II} . \quad (2)$$

Каждый элементарный процесс (1) имеет два вектора потер $\alpha_r^{I,II}$ с координатами $\alpha_{ri}^{I,II}$ и два вектора на выходе $\beta_r^{I,II}$ с координатами $\beta_{ri}^{I,II}$, r – номер элементарного акта (стадии). Совокупность всех элементарных актов (перескоков между соседними ячейками) составляет механизм диффузии для данной системы при заданных внутренних и внешних условиях. Вследствие сохранения количества частиц всех типов (2), стехиометрические векторы процессов для ячеек отличаются только знаком координат:

$$\gamma_r = \gamma_r^I = -\gamma_r^{II} = \beta_r^I - \alpha_r^I = -(\beta_r^{II} - \alpha_r^{II}) . \quad (3)$$

Для скорости элементарного акта диффузии по механизму (1) в рамках закона действия масс (ЗДМ) записывается выражение:

$$w_r(c^I, c^II) = k_r \prod_i (c_i^I)^{\alpha_{ri}^I} \prod_i (c_i^{II})^{\alpha_{ri}^{II}}. \quad (4)$$

Например, для диффузии Фика мы имеем два элементарных процесса: $A_i^I \rightarrow A_i^{II}$ и $A_i^{II} \rightarrow A_i^I$. Соответствующие скорости реакции равняются $k_1 c_i^I$ и $k_2 c_i^{II}$.

Состав каждой ячейки можно представлять в виде вектора $N^{I,II}$. Компоненты этого вектора $N_i^{I,II} = V^{I,II} c_i^{I,II}$ составляют количество веществ A_i в соответствующей ячейке. В рамках модели ячеечного перескока с участием ближайших соседей уравнение кинетики будет иметь вид:

$$\frac{dN^I}{dt} = -\frac{dN^{II}}{dt} = \sum_J S^{I,J} \sum_r \gamma_r w_r(c^I, c^J), \quad (5)$$

где $S^{I,J}$ является площадью границы между ячейками I и J. Суммирование осуществляется по всем взаимодействующим парам (I, J).

Вектор потоков для компонента A_i до первого порядка по l имеет вид:

$$J_{ri} = -\gamma_{ri} [w_r(c(x), c(x+l)) - w_r(c(x+l), c(x))] = -d\gamma_{ri} \left(\prod_q c_q^{\alpha_{rq}^I + \alpha_{rq}^{II}} \right) \sum_j \frac{\alpha_{rj}^{II} - \alpha_{rj}^I}{c_j} \nabla c_j(x), \quad (6)$$

где $d = \text{const}(=kl)$, l – размер элементарной ячейки.

По аналогии с законом Фика, матрица коэффициентов диффузии по механизму (1), согласно выражению (6), имеет вид:

$$D_{rij}(c) = d \left(\prod_q c_q^{\alpha_{rq}^I + \alpha_{rq}^{II}} \right) \frac{\gamma_{ri} (\alpha_{rj}^{II} - \alpha_{rj}^I)}{c_j}. \quad (7)$$

Соответствующее уравнение диффузии имеет форму дивергенции:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(D(c) \nabla c), \quad (8)$$

где C – вектор концентраций, D – матрица коэффициентов диффузии в виде (7).

Характер общности данного математического аппарата *не позволяет* точно установить роль отдельной стадии и отдельного компонента в процессе диффузии. Необходима оценка *ценности* каждой стадии и каждого компонента в сложном процессе диффузии. Аналогичные задачи для сложных химических реакционных систем были решены путем применения ценностного подхода, заимствованного из нейтронной физики [2; 5; 7]. Основная задача *ценностного анализа* сложного диффузионного процесса – это определение *ценностного вклада* каждой *стадии* и каждого *компонента* для выделения базового механизма диффузии, для целенаправленного воздействия на диффузионный перенос, для выявления и исследования аномальных явлений («восходящая диффузия», спиnodальный распад и др.), для планирования диффузионно-лимитированного эксперимента (см. рис. 2).

В ценностном подходе кинетическая значимость отдельных стадий определяется посредством ценностных величин. Характерная особенность этих величин заключается в том, что они нацелены на выявление влияния вариаций скоростей стадий или же скоростей изменения состава компонентов в диффузионной зоне на величину выходного параметра сложного процесса диффузии. Варьированием скоростей стадий в большей степени выявляется системная связь между отдельными стадиями. Ценностное выявление значимости отдельной стадии учитывает взаимосвязь этой стадии с другими как по-

средством значения константы скорости стадии, так и непосредственно с помощью концентраций компонентов, участвующих в стадии.



Рис.2. Схема решения ключевых вопросов *ценностного анализа* сложного диффузионного процесса

Ценностные величины. Ценность отдельной стадии определяется как отношение отклика выбранной характерной динамической величины диффузионной системы в некий момент времени t на малое возмущение скорости r -й стадии в начальный момент времени t_0 . При этом скорость стадии варьируется путем изменения начальных условий (концентрации компонентов, константы скорости элементарных актов и т.д.). В этом случае для ценности r -й стадии $G_r(t)$ справедливо следующее выражение:

$$G_r(t) = \frac{\partial F[w_1(t), \dots, w_n(t)]}{\partial w_r} \bigg|_{w_r = w_r(t_0)}, \quad (9)$$

где $w_r(t)$ – скорость r -й стадии, $F(t)$ – динамический параметр, интегральное поведение которого характеризует выбранную величину диффузионного процесса, например, концентрацию компонентов в диффузионной зоне, критичность диффузионной системы и др.

Аналогично, ценность компонента реакционной системы определяется как отклик выбранного параметра в момент времени t на малое возмущение скорости изменения концентрации компонента в момент времени t_0 :

$$\psi_i(t) = \left. \frac{\partial F[f_1(t), \dots, f_n(t)]}{\partial f_i} \right|_{f_i = f_i(t_0)}, \quad (10)$$

где $f_i(t) = dc_i/dt$ – скорость изменения концентрации i -го компонента.

Из (9) и (10) следует, что ценность r -й стадии равна сумме произведений ценностей компонентов и отклика скорости изменения концентраций компонентов в диффузионной зоне на малое возмущение изменения скорости стадии:

$$G_r(t) = \sum_{i=1}^m \psi_i(t) \frac{\partial f_i}{\partial w_r}. \quad (11)$$

Определим *ценностный вклад* r -й стадии при выбранном параметре сложного процесса диффузии следующим образом:

$$h_r(t) = G_r(t) \cdot w_r(t), \quad r = 1, 2, \dots, n. \quad (12)$$

При определении вклада отдельной стадии мы предполагаем, что ее кинетической значимости существенную роль играет ценность стадии.

Аналогичным образом определим *ценностный вклад i -го компонента*:

$$b_i(t) = \psi_i(t) \cdot f_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (13)$$

Расчет ценностных величин. Примем методику определения ценностных величин путем нахождения сопряженных функций [2] с использованием подхода *гамильтоновской систематизации динамических систем*.

Представим выбранное свойство или, иначе говоря, *целевой функционал* сложного процесса диффузии в интегральной форме:

$$I(t) = \int_{t_0}^t F(t) dt. \quad (14)$$

Очевидно, что вклад стадии зависит от того, какое свойство сложной диффузионной стадии выбирается в качестве приоритетного. Если ставится цель выявить роль стадий в кинетике изменений концентрации i -го компонента, то целевой функционал представляется в виде:

$$I(t) = c_i(t) = \int_{t_0}^t f_i(t) dt. \quad (15)$$

Выявление вклада отдельных стадий в кинетике изменения концентраций нескольких компонентов будем осуществлять целевым функционалом вида:

$$I(t) = \sum_i c_i(t) = \sum_i \int_{t_0}^t f_i(t) dt. \quad (16)$$

Если в диффузионной системе число компонентов равно m , то (10) запишется в виде:

$$\psi_i(t) = \frac{\partial F}{\partial f_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (17)$$

или, в интегральной форме:

$$F = \sum_{i=1}^m \psi_i f_i + \text{const}. \quad (18)$$

Обозначим

$$H = -F + \sum_{i=1}^m \psi_i f_i. \quad (19)$$

Сравнивая (18) и (19), получим $H = \text{const}$ и, соответственно,

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial c_i} \frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial \psi_i} \frac{\partial \psi_i}{\partial t} \right) = 0. \quad (20)$$

Согласно (19), систему кинетических уравнений (8) можно представить в виде:

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \psi_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (21)$$

Тогда из (20) получается:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial c_i} + \frac{d\psi_i}{dt} \right) \frac{dc_i}{dt} = 0. \quad (22)$$

Условие (22) должно выполняться для любых концентраций C_i . Тогда:

$$\frac{d\psi_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial c_i}. \quad (23)$$

Таким образом, из выражений (19), (21) и (23) следует, что H представляет собой *гамильтониан* системы.

Ценности компонентов $\psi_i(t)$ определяются решением системы уравнений (23) совместно с кинетическими уравнениями (21). Необходимые для расчета ценностных величин начальные значения $\psi_i(t)$ определяются, учитывая выбранный параметр F в целевом функционале (14).

Преобразуем уравнение (19) к виду

$$F = -H + \sum_r^n G_r w_r = -H + \sum_r^n h_r = -H + \sum_i^m \psi_i f_i = -H + \sum_i^m b_i. \quad (24)$$

Из (24) следует, что уравнения (12) и (13) с точностью до постоянной величины характеризуют относительный вклад отдельной стадии и компонента в выбранном параметре F диффузионной системы.

Процедура расчета ценностных величин сводится к следующим этапам:

1) запись целевого функционала сложного процесса диффузии (уравнение (14)) и соответствующего гамильтониана системы (уравнение (19));

2) составление системы кинетических уравнений (8) и системы дифференциальных уравнений для функций $\psi_i(t)$ (ценностей компонентов), сопряженных концентрациям компонентов, согласно уравнению (23);

3) определение из целевого функционала (14) сопряженных функций $\psi_i(t_0)$ соответствующих компонентов для начального момента времени;

4) вычисление динамики величин $\psi_i(t)$ совместным решением системы кинетических уравнений (8) и дифференциальных уравнений сопряженных функций (23);

5) расчет временной зависимости ценностей и ценностных вкладов стадий и компонентов по уравнениям (11) - (13), соответственно.

В представленной интерпретации ценностный подход является методом локального анализа. Вместе с тем, ценностный метод используется как аппарат нахождения оптимального протекания диффузии. Это одновременно позволяет вычислять ценностные вклады стадий и компонентов диффузионной системы, соответствующие оптимальному значению целевой функции. Причем, оптимальное значение целевой функции диффузионной системы может быть найдено в широком интервале изменений параметров диффузионной зоны.

В заключение отметим, что ценностный метод выявления значимости стадий и компонентов в сложном процессе диффузии дает определенные преимущества при анализе кинетических моделей многокомпонентной нелинейной диффузии благодаря простоте расчетов и наглядности полученных результатов.

Список литературы

1. Горбань А.Н., Саркисян Г.П. Закон действия масс для нелинейной многокомпонентной диффузии и соотношения между ее коэффициентами // Кинетика и катализ. 1986. Т. 27. Вып. 2. – С. 527.
2. Льюинс Дж. Ценность. Сопряженная функция / пер. с англ. М.: Атомиздат, 1972. 174с.
3. Саркисян Г.П. Анализ механизмов нелинейной многокомпонентной диффузии в неразбавленных твердых растворах: дисс. ... к. ф.-м. н. Красноярск: ВЦ СО АН СССР, 1988. 136 с.
4. Саркисян Г.П. Математическая модель для обработки данных диффузионного эксперимента // Приволжский научный вестник. 2015. № 8(48). С.4-7.
5. Тавадян Л.А., Мартоян Г.А. Анализ кинетических моделей химических реакционных систем. Ценностный подход. Ереван: Гитутюн, 2005. 247 с.
6. Alexander N. Gorban, Hrachya P. Sargsyan and Hafiz A. Wahab. Quasichemical Models of Multicomponent Nonlinear Diffusion. // Mathematical Modelling of Natural Phenomena. 2011. Vol. 6. No. 5.P. 184-262.
7. Tavadyan L.A., Martoyan G.A. Analysis of Kinetic Models of Chemical Reaction Systems. Value Approach. N. Y.: Nova Publishers, Inc., 2014. 223p.

МЕТОДЫ И ПОКАЗАТЕЛИ РЕДУКЦИИ ДАННЫХ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ПО ПРЕЦЕДЕНТАМ

С. А Субботин

Запорожский национальный технический университет, subbotin.csit@gmail.com

Введение

Построение диагностических и распознающих моделей по прецедентам, как правило, является итеративным процессом, требующим значительных затрат времени для выборок большой размерности [1]. Поэтому для повышения скорости построения диагностических и распознающих моделей необходимо предварительно сокращать размерность данных.

Сокращение размерности выборки данных [2–14], как правило, обеспечивается посредством отбора информативных признаков и отбора наиболее значимых экземпляров из исходной выборки.

Известные методы отбора признаков [2, 14], как правило, основаны на переборной стратегии и оперируют некоторым показателем качества, характеризующим индивидуальную или совместную полезность признаков для решения соответствующей задачи. Для оценки информативности признаков используют широкий спектр показателей [14, 15], которые характеризуют полезность признаков с некоторой точки зрения. В общем случае, не только количественные, но и качественные оценки данных показателей могут не совпадать.

Методы выделения выборок (отбора экземпляров) [4–13], в свою очередь, также основаны на переборной стратегии и оперируют некоторым показателем качества, характеризующим индивидуальную или совместную полезность экземпляров для решения соответствующей задачи. Для оценки качества сформированной выборки возможно использовать широкий набор предложенных показателей [5, 6], которые на практике в общем случае качественно дают разные оценки ценности экземпляров.

Известные методы редукции данных [4–13] исходят из различных точек зрения на важность экземпляров и признаков, что может приводить противоречию между отбором экземпляров и признаков. Поэтому необходимо разработать метод редукции данных, осуществляющий отбор экземпляров и признаков исходя из одного общего представления об их информативности.

Целью данной работы являлось создание комплекса показателей, позволяющих количественно характеризовать ценность экземпляров и признаков, а также методов сокращения размерности выборок данных.

Постановка задачи

Пусть мы имеем исходную выборку $X = \langle x, y \rangle$ – набор S прецедентов о зависимости $y(x)$, $x = \{x^s\}$, где x^s – s -й экземпляр выборки, $y = \{y^s\}$, $s = 1, 2, \dots, S$, характеризующихся набором N входных признаков $\{x_j\}$, $j = 1, 2, \dots, N$, и выходным признаком y . Каждый s -й прецедент представим как $\langle x^s, y^s \rangle$, $x^s = \{x_j^s\}$, где x_j^s – значение j -го входного признака для s -го прецедента, y^s – значение выходного признака для s -го прецедента (экземпляра) выборки, $y^s \in \{1, 2, \dots, K\}$, где $K > 1$. Размерность выборки определим как $n = NS$.

Тогда задача синтеза модели зависимости $y(x)$ будет заключаться в определении таких структуры $F()$ и значений параметров w модели, при которых будет удовлетворен критерий качества модели $f(F(), w, \langle x, y \rangle) \rightarrow opt$, где opt – условное обозначение оптимума.

В случае, когда исходная выборка имеет большую размерность, перед построением модели необходимо решить задачу выделения обучающей выборки меньшего

объема (дано: $X = \langle x, y \rangle$, надо: $X' = \langle x', y' \rangle$, $x' \in x^s$, $y' = \{y^s | x^s \in \mathfrak{A}'\}$, $S' = |y'|$, $S' < S$, $f(\langle x', y' \rangle, \langle x, y \rangle) \rightarrow opt$).

Также при большом числе признаков, характеризующих экземпляры исходной выборки возникает необходимость решить задачу выделения подмножества наиболее информативных признаков из исходной выборки (дано: $X = \langle x, y \rangle$, надо: $X' = \langle x', y \rangle$, $x' \in x_j$, $N' = |x'|$, $N' < N$, $f(\langle x', y \rangle, \langle x, y \rangle) \rightarrow opt$).

Показатели информативности экземпляров и признаков

Поскольку масштаб значений признаков, которыми характеризуется выборка, может быть существенно различным, это может привести к подавлению одних признаков другими при сравнении экземпляров в процессе формирования выборки.

Для исключения данного негативного эффекта предлагается использовать нормированные расстояния как меру близости (меру подобия) экземпляров:

$$R(x^s, x^p) = R(x^p, x^s) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{x_j^s - x_j^p}{x_j^{\max} - x_j^{\min}} \right)^2, \quad s = 1, 2, \dots, S; p = s+1, s+2, \dots, S,$$

где $x_j^{\max}$, $x_j^{\min}$ – соответственно, максимальное и минимальное значения j -го признака.

Под локально влияющими на экземпляр x^s в окрестности радиуса δ будем понимать множество тех экземпляров обучающей выборки, которые удалены от экземпляра x^s не более чем на δ , $0 < \delta \leq 1$.

Показатель информативности экземпляра относительно внешних границ класса в локальной окрестности радиуса δ определим по формуле:

$$I_O(x^s) = \frac{1}{S_\delta(x^s)} \sum_{p=1}^S \{R(x^s, x^p) | R(x^s, x^p) \leq \delta, y^s = y^p, p \neq s\},$$

где S_δ – число экземпляров того же класса, что и класс экземпляра x^s , находящихся в его окрестности, не включая сам экземпляр x^s :

$$S_\delta(x^s) = \sum_{p=1}^S \{1 | R(x^s, x^p) \leq \delta, y^s = y^p, p \neq s\}.$$

Предложенный показатель I_O будет принимать значения в интервале $[0, 1]$. Чем больше будет значение показателя I_O , тем ближе экземпляр x^s к внешней границе соответствующего класса в локальной окрестности радиуса δ .

Показатель информативности экземпляра x^s относительно межклассовых границ в локальной окрестности радиуса δ определим по формуле:

$$I_C(x^s) = \frac{1}{1 + \sum_{p=1}^S \{R(x^s, x^p) | R(x^s, x^p) \leq \delta, y^s \neq y^p, p \neq s\}}.$$

Предложенный показатель I_C будет принимать значения в интервале $[(1 + NS)^{-1}, 1]$. Чем больше будет значение показателя I_C , тем ближе экземпляр x^s к межклассовой границе в локальной окрестности радиуса δ .

Показатель информативности экземпляра относительно внутриклассового центра в локальной окрестности радиуса δ определим по формуле:

$$I_B(x^s) = \frac{1}{1 + \min_{p=1, 2, \dots, S} \{R(x^s, x^p) | R(x^s, x^p) \leq \delta, y^s \neq y^p, p \neq s\}}.$$

Предложенный показатель I_B будет принимать значения в интервале $[(1 + N)^{-1}, 1]$. Чем больше будет значение показателя I_B , тем ближе экземпляр x^s к центру своего класса в локальной окрестности радиуса δ .

Комбинированный показатель информативности экземпляра относительно внешних границ класса и межкуксовых границ в локальной окрестности радиуса δ определим по формуле: $I_{OC}(x^s) = \max\{I_O(x^s), I_C(x^s)\}$.

Предложенный показатель будет принимать значения в интервале $[0, 1]$. Чем больше будет значение показателя I_{OC} , тем ближе экземпляр x^s к внешним границам класса и межкуксовой границе в локальной окрестности радиуса δ .

Комбинированный показатель информативности экземпляра относительно внешних границ класса и внутриклассового центра в локальной окрестности радиуса δ определим по формуле: $I_{OB}(x^s) = \max\{I_O(x^s), I_B(x^s)\}$. Предложенный показатель I_{OB} будет принимать значения в интервале $[0, 1]$. Чем больше будет значение показателя I_{OB} , тем ближе экземпляр x^s к внешним границам класса, к центру своего класса в локальной окрестности радиуса δ .

Комбинированный показатель информативности экземпляра относительно межкуксовых границ и внутриклассового центра экземпляра в локальной окрестности радиуса δ определим по формуле: $I_{BC}(x^s) = \max\{I_B(x^s), I_C(x^s)\}$. Предложенный показатель I_{BC} будет принимать значения в интервале $[(N2S + NS + N + 1)^{-1}, 1]$. Чем больше будет значение показателя I_{BC} , тем ближе экземпляр x^s к межкуксовой границе и ближе к центру своего класса в локальной окрестности радиуса δ .

Комбинированный показатель информативности экземпляра относительно внешних границ класса, межкуксовых границ и внутриклассового центра экземпляра в локальной окрестности радиуса δ : $I_{OBC}(x^s) = \max\{I_O(x^s), I_B(x^s), I_C(x^s)\}$. Предложенный показатель I_{OBC} будет принимать значения в интервале $[0, 1]$. Чем больше будет значение показателя I_{OBC} , тем ближе экземпляр x^s к к внешним границам класса, межкуксовой границе, ближе к центру своего класса в локальной окрестности радиуса δ .

Предложенный выше комплекс показателей может быть использован не только для отбора экземпляров, но также и для оценки информативности и отбора признаков.

Показатели индивидуальной информативности признаков можно определить по обобщенной формуле:

$$I_j^* = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S (I_*(x^s | x) - I_*(x^s | x \setminus x_j))^2,$$

где маркер "*" заменяется обозначением типа соответствующего показателя информативности экземпляров.

Данный показатель будет принимать значения от нуля до единицы. Чем больше будет значение данного показателя, тем сильнее влияние соответствующего признака на качество выборки с точки зрения выбранного типа показателей информативности экземпляров.

Показатели групповой информативности признаков можно определить по обобщенной формуле:

$$I_{\Omega}^* = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S (I_*(x^s | x) - I_*(x^s | x \setminus \Omega))^2,$$

где маркер "*" заменяется обозначением типа соответствующего показателя информативности экземпляров.

Данный показатель будет принимать значения от нуля до единицы. Чем больше будет значение данного показателя, тем сильнее влияние соответствующей группы признаков на качество выборки с точки зрения выбранного типа показателей информативности экземпляров.

Предложенный комплекс показателей может быть использован в методах редукции данных.

Методы редукции данных

Наиболее точным является метод редукции на основе стратегии полного перебора [14]. Данный метод сначала выполняет перебор всех возможных комбинаций экземпляров из исходной выборки. После чего оценивается их качество и выбирается одна комбинация, содержащая наименьшее число экземпляров, обеспечивающее приемлемый уровень качества. Затем выполняется перебор всех возможных комбинаций признаков. После чего оценивается их качество и выбирается одна комбинация признаков, содержащая наименьшее число признаков, обеспечивающее приемлемый уровень качества. Формально данный метод может быть представлен следующим образом.

0. Задать исходную выборку $\langle x, y \rangle$.

1. Редукция экземпляров. Сгенерировать все возможные комбинации экземпляров $\{\langle x', y' \rangle\}$ как подвыборки $\langle x, y \rangle$. Для каждой комбинации экземпляров $\langle x', y' \rangle$ оценить выбранный показатель качества $I(\langle x', y' \rangle)$. В качестве итоговой сокращенной выборки принять комбинацию $\langle x', y' \rangle$, содержащую наименьшее число экземпляров при приемлемом значении показателя качества $I(\langle x', y' \rangle)$.

2. Редукция признаков. Сгенерировать все возможные комбинации признаков для сокращенной выборки $\langle x', y' \rangle$. Для каждой комбинации признаков по сокращенной выборке $\langle x', y' \rangle$ оценить выбранный показатель качества $I(\langle x', y' \rangle)$. Оставить в сокращенной выборке $\langle x', y' \rangle$ только те признаки, которые входят в комбинацию, содержащую наименьшее число признаков при приемлемом значении показателя качества.

Данный метод потребует перебора $2^S - 1$ комбинаций экземпляров на этапе редукции экземпляров и $2^N - 1$ комбинаций признаков на этапе редукции признаков. Очевидно, что такой метод является самым медленным и вычислительно затратным. Его практическая применимость весьма ограничена.

Для устранения недостатков полного перебора возможно, оценив индивидуальную информативность признаков и экземпляров, последовательно удалять из исходной выборки некоторое подмножество наименее индивидуально информативных экземпляров и признаков, строя каждый раз по редуцированной выборке модель и оценивая показатель качества, до тех пор, пока признаков больше двух, экземпляров не меньше, чем классов, а точность модели является приемлемой.

Быстрый метод редукции данных, реализующий данные идеи, представим следующим образом.

1. Принять в качестве текущей выборки $\langle x', y' \rangle$ исходную выборку $\langle x, y \rangle$. Задать число удаляемых экземпляров S^* и число удаляемых признаков N^* .

2. Оценить индивидуальную информативность экземпляров и индивидуальную информативность признаков в выборке.

3. Если $S' > S^*$, то удалить S^* наименее индивидуально информативных экземпляров из текущей выборки. Если $N' > N^*$, то удалить N^* наименее информативных признаков из текущей выборки.

4. Построить распознающую модель по редуцированной выборке $\langle x', y' \rangle$.

5. Оценить ошибку построенной модели E по исходной выборке $\langle x, y \rangle$. Например, в качестве критерия ошибки можно использовать среднюю ошибку:

$$E = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \{1 | y^s_p \neq y^s\}.$$

6. Если ошибка E приемлемая, то принять в качестве текущей выборки редуцированную выборку и перейти к этапу 3; в противном случае – вернуть в качестве результата текущую выборку $\langle x', y' \rangle$.

Такой метод при выборе достаточно больших значений S^* и N^* будет обеспечивать очень быстрое сокращение размерности выборки, однако будет достигать этого за счет потери информации, что повлечет уменьшение точности. Поскольку данный метод требует построения модели, то его эффективность также будет зависеть от эффективности используемого метода построения модели.

Поскольку одновременная редукция экземпляров и признаков может в ряде практических приложений слишком быстро приводить к потере информации и, как следствие, точности синтезируемой модели, представляется целесообразным для таких случаев последовательно редуцировать данные, синтезируя модель для контроля потери информации, и тем самым обеспечивая более тщательный контроль редукции данных.

Последовательный метод редукции данных, реализующий данные идеи, представим следующим образом.

1. Принять в качестве текущей выборки $\langle x', y' \rangle$ исходную выборку $\langle x, y \rangle$. Задать число удаляемых экземпляров S^* и число удаляемых признаков N^* .

2. Оценить индивидуальную информативность экземпляров в исходной выборке.

3. Если $S' > S^*$, то удалить S^* наименее индивидуально информативных экземпляров из текущей выборки $\langle x', y' \rangle$.

4. Построить модель на основе текущей выборки и оценить ошибку модели по исходной выборке.

5. Если ошибка модели приемлемая и $S' > S^*$, то перейти к этапу 3; в противном случае – вернуть предыдущий набор экземпляров $\langle x', y' \rangle$.

6. Оценить индивидуальную информативность признаков по редуцированной текущей выборке $\langle x', y' \rangle$.

7. Если $N' > N^*$, то удалить N^* наименее информативных признаков из текущей выборки $\langle x', y' \rangle$.

8. Построить распознающую модель на основе текущей выборки $\langle x', y' \rangle$ и оценить ошибку модели E по исходной выборке $\langle x, y \rangle$.

9. Если ошибка модели E приемлемая и $N' > N^*$, то перейти к этапу 7; в противном случае – вернуть предыдущий набор признаков $\langle x', y' \rangle$.

Такой метод при выборе достаточно больших значений S^* и N^* будет обеспечивать быстрое сокращение размерности выборки, однако оно будет медленнее, чем у предыдущего метода. При этом данный метод за счет большего контроля ошибки сможет потенциально терять меньше информации, обеспечивая более тщательный отбор признаков. Тем не менее, поскольку данный метод требует построения модели, то его эффективность также будет зависеть от эффективности используемого метода построения модели.

Для комплекса предложенных показателей и методов сокращения размерности выборок данных существенным параметром является выбор размера окрестности δ .

Очевидно, что при большом значении δ в локальную окрестность экземпляра будет попадать большое число экземпляров, что сделает трудоемким расчет показателей информативности, однако позволит сопоставить соответствующий экземпляр с большим числом других экземпляров, обеспечивая более точную оценку важности экземпляра.

При малом значении δ в локальную окрестность экземпляра может не попасть ни одного экземпляра, либо попасть очень небольшое число экземпляров. Это не позволит обеспечить приемлемую точность оценивания важности экземпляров.

Предположим, что экземпляры равномерно распределены в пространстве признаков. Тогда в окрестности радиуса δ каждого экземпляра окажется порядка SV экземпляров, где $V = \pi^{0,5N} \delta^N / \Gamma(0,5N + 1)$, где Γ – гамма-функция.

Очевидно, что $S \gg SV$. Следовательно, $V \ll 1$. Зафиксировав N , получим $0 < \delta \ll \pi^{-0,5} \sqrt[3]{\Gamma(0,5N+1)} \leq 1$.

Эксперименты и результаты

Для проверки работоспособности предложенного комплекса показателей информативности экземпляров и признаков, а также методов редукции данных они были программно реализованы и исследованы на наборе синтетических выборок данных. Каждая выборка содержала экземпляры двух классов, характеризовавшиеся наборами признаков. Значения одной части признаков генерировались случайным образом. Значения другой части признаков определялись как комбинации значений некоторых признаков первой части. Характеристики синтетических выборок данных приведены в табл. 1.

Таблица 1

Характеристики синтетических выборок данных и сравнительная характеристика методов редукции данных (t – время, затраченное на формирование выборки, m – объем памяти ЭВМ, затраченный на формирование выборки)

№ вы-борки	Характеристики выборки			Метод полного перебора			Метод быстрой редукции			Последовательный метод редукции		
	N	S	n	t , с	m , Мб	E	t , с	m , Мб	E	t , с	m , Мб	E
1	10	20	200	0,5249	40,102	0	0,0111	0,004	0	0,0212	0,009	0
2	20	20	400	1,0486	160,039	0	0,0161	0,008	0,05	0,0336	0,018	0
3	20	20	800				0,0433	0,015	0,05	0,0845	0,036	0,05
4	40	40	1600				0,0642	0,031	0,08	0,1344	0,072	0,05
5	100	100	10000				0,4006	0,191	0,07	0,8402	0,448	0,05
6	500	500	250000				10,0032	4,802	0,06	21,0021	11,208	0,04
7	1000	1000	1000000				40,0109	19,109	0,06	84,1093	44,801	0,06

В первой серии экспериментов осуществлялось сравнение методов по затратам ресурсов и достигнутой точности (ошибке) моделей, синтезированных по редуцированным выборкам. Во второй серии экспериментов исследовался вопрос выбора значения δ .

В табл. 1 представлены результаты сравнения затрат ресурсов предложенных методов редукции данных при решении синтетических задач редукции данных. Как видно из табл. 1, метод полного перебора является наиболее затратным как по используемым вычислительным ресурсам, так и по ресурсам памяти. Метод быстрой редукции является наиболее эффективным с точки зрения затрат ресурсов, а метод последовательной редукции требует несколько больше вычислительных ресурсов и ресурсов памяти, по сравнению с быстрым методом редукции. Метод полного перебора обеспечивает наибольшую точность, однако из-за ограничений по ресурсам не имеет широкой практической применимости. Метод быстрой редукции в среднем обеспечивает несколько большую ошибку по сравнению с последовательным методом редукции.

На рис. 1 представлены результаты проведенных экспериментов по подбору значения δ для разных значений числа используемых признаков N .

Как видно из рис. 1, с увеличением числа признаков N также возрастает практический порог для задания значения δ . При этом даже для небольших N вполне приемлемым является значение $\delta = 0,5$.

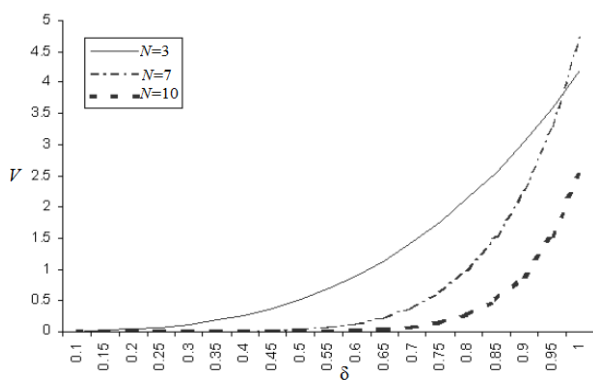


Рис. 1. Графики зависимостей V от δ для разных значений N

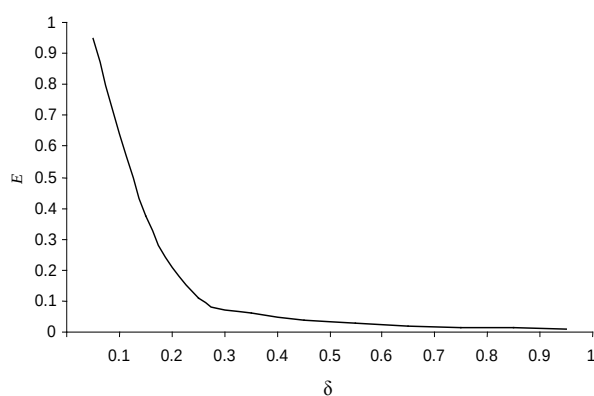


Рис. 2. График усредненной зависимости ошибки полученных моделей E от δ

На рис. 2 представлен график усредненной зависимости ошибки полученных моделей E от величины δ . Как видно из рис. 2, при относительно малых значениях δ наблюдается наибольшая средняя ошибка E , которая существенно сокращается с увеличением значения δ . Наиболее сильное падение ошибки наблюдается в диапазоне значений $\delta < 0,4$.

Разработанные методы осуществляют редукцию выборки данных в рамках единого подхода к оценке индивидуальной информативности признаков и экземпляров, что позволяет сократить объем вычислений по сравнению с традиционным подходом, когда задачи отбора экземпляров и признаков решаются отдельно в рамках разных парадигм. Это позволяет существенно снизить затраты как вычислительных ресурсов, так и ресурсов памяти. Метод полного перебора позволяет обеспечить наиболее точный результат решения задачи отбора информативных признаков и экземпляров минимального объема. Однако с практической точки зрения для большинства приложений данный метод оказывается не применимым. Быстрый и последовательный методы редукции позволяют решать задачу сокращения размерности данных за приемлемое с практической точки зрения время. При этом методы обеспечивают требуемую точность при правильном подборе величины δ .

Результаты проведенных экспериментов позволяют рекомендовать задавать на практике значение δ порядка 0,5. При этом для больших выборок и малом числе признаков значение δ можно сокращать до 0,3–0,4. Для малых выборок, описываемых большим числом признаков значение δ можно задавать порядка 0,7–0,8.

Выводы

С целью решения задачи сокращения размерности данных при построении диагностических и распознающих моделей разработано математическое обеспечение, позволяющее осуществлять формирование выборок и отбор признаков в рамках единого подхода к оценке их значимости.

Научная новизна полученных результатов состоит в том, что:

- впервые предложен комплекс показателей, позволяющих количественно характеризовать индивидуальную ценность экземпляров и признаков в локальной окрестности в пространстве признаков;
- получили дальнейшее развитие методы переборного поиска, которые модифицированы путем учета в поисковых операторах предложенных индивидуальных оценок информативности экземпляров и признаков а также метода сокращения размерности выборок данных для решения задач диагностирования и распознавания.

Практическая значимость полученных результатов заключается в том, что предложенные методы и комплекс показателей программно реализованы и исследованы при задач сокращения размерности данных. Проведенные эксперименты подтвердили рабо-

тоспособность разработанного математического обеспечения и позволяют рекомендовать его для использования на практике.

Перспективы дальнейших исследований состоят в том, чтобы определить более быстрые способы расчета предложенных показателей информативности экземпляров, изучить их взаимосвязь с качеством синтезируемых моделей, исследовать предложенное математическое обеспечение на более широком классе практических задач диагностирования и распознавания образов.

Список литературы

1. Интеллектуальные информационные технологии проектирования автоматизированных систем диагностирования и распознавания образов : монография / С.А.Субботин, Ан. А. Олейник, Е. А. Гофман, С.А. Зайцев, Ал. А.Олейник ; под ред. С. А. Субботина. – Харьков : Компания СМИТ, 2012. – 318 с.
2. Russell E. L. Data-driven diagnosis Data-driven Methods for Fault Detection and Diagnosis in Chemical Processes / E. L. Russell, L. H. Chiang, R. D. Braatz. – London : Springer-Verlag, 2000. – 192 p. DOI: 10.1007/978-1-4471-0409-4
3. Computational intelligence: a methodological introduction / [R. Kruse, C. Borgelt, F. Klawonn et. al.]. – London: Springer-Verlag, 2013. – 488 p. DOI: 10.1007/978-1-4471-5013-8_1
4. Олешко Д. Н. Построение качественной обучающей выборки для прогнозирующих нейросетевых моделей / Д. Н. Олешко, В. А. Крисилов, А. А. Блажко // Штучний інтелект. – 2004. – № 3. – С. 567–573.
5. Subbotin S. A. The training set quality measures for neural network learning / S. A. Subbotin // Optical memory and neural networks (information optics). – 2010. – Vol. 19. – № 2. – P. 126–139. DOI: 10.3103/s1060992x10020037
6. Субботин С. А. Критерии индивидуальной информативности и методы отбора экземпляров для построения диагностических и распознающих моделей / С.А. Субботин // Біоніка інтелекту. – 2010. – № 1. – С. 38–42.
7. Encyclopedia of survey research methods / ed. P. J. Lavrakas. – Thousand Oaks: Sage Publications, 2008. – Vol. 1–2. – 968 p. DOI: 10.1108/09504121011011879
8. Hansen M.H. Sample survey methods and theory / M. H. Hansen, W. N. Hurst, W. G. Madow. – Vol. 1 : Methods and applications. – New York: John Wiley & Sons, 1953. – 638 p.
9. Кокрен У. Методы выборочного исследования / У. Кокрен ; пер. с англ. И. М. Сониной ; под ред. А. Г. Волкова, Н. К. Дружинина. – М.: Статистика, 1976. – 440 с.
10. Multivariate analysis, design of experiments, and survey sampling / ed. S. Ghosh. – New York: Marcel Dekker Inc., 1999. – 698 p.
11. Smith G. A deterministic approach to partitioning neural network training data for the classification problem : dissertation ... doctor of philosophy in business / Smith Gregory. – Blacksburg: Virginia Polytechnic Institute & State University, 2006. – 110 p.
12. Bernard H. R. Social research methods: qualitative and quantitative approaches / H. R. Bernard. – Thousand Oaks: Sage Publications, 2006. – 784 p.
13. Chaudhuri A. Survey sampling theory and methods / A. Chaudhuri, H. Stenger. – New York: Chapman & Hall, 2005. – 416 p.
14. Субботін С. О. Інтелектуальні системи : навч. посіб. / С. О. Субботін, А. О. Олійник; під заг. ред. проф. С. О. Субботіна. – Запоріжжя : ЗНТУ, 2014. – 218 с.
15. Биргер И. А. Техническая диагностика / И. А. Биргер. – М.: Машиностроение, 1978. – 240 с.

ОЦЕНКА ВОЗДЕЙСТВИЯ ФАКТОРОВ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ НА ЗДОРОВЬЕ НАСЕЛЕНИЯ Г. КРАСНОЯРСКА

О.В. Тасейко, Е.Н. Бельская

Сибирский государственный аэрокосмический университет
имени ак. М.Ф. Решетнева, Красноярск,
taseiko@gmail.ru

1. Введение

Оценка влияния экологических параметров на устойчивое развитие территорий является одним из актуальных направлений исследований, поскольку экономическое развитие территорий, как правило, сопровождается негативным воздействием на состояние окружающей среды. Устойчивое развитие территорий предполагает снижение рисков развития, в первую очередь, индивидуальных стратегических рисков потери человеком жизни и здоровья [1].

К фундаментальной задаче разработки методологии оценки риска здоровью относится решение проблемы оценки свойств аддитивности действия факторов риска, в том числе разнородных. Существующие методы оценки риска здоровью принимают гипотезу об аддитивном действии факторов, поскольку считается, что при достаточно низких уровнях экспозиции, которые встречаются в реальной ситуации, учетом характера комбинированного действия можно пренебречь [2].

В качестве таких разнородных факторов рассматривалось влияние климатических параметров и загрязнения воздуха на здоровье населения на примере г. Красноярск. Поскольку жаркая погода и загрязнение воздуха часто совпадают по времени, то определить воздействие на здоровье каждого из этих факторов в отдельности затруднительно.

Целью работы являлся анализ совместного влияния климатических факторов и загрязнения воздуха на уровни смертности населения г. Красноярск.

2. Объект исследования

Для характеристики качества атмосферного воздуха г. Красноярск использовались данные государственной сети мониторинга, за период с 2001 по 2005 гг. В расчетах использовались такие климатические параметры, как температура атмосферного воздуха, относительная влажность и скорость ветра, измеряемые на фоновой для города метеостанции с периодичностью в 3 часа [3].

Двумя основными загрязнителями воздуха в периоды сильной жары являются озон и РМ₁₀ (твердые частицы диаметром до 10 мкм). Общее воздействие, скорее всего, превышает аддитивный эффект от одновременных воздействий жары и загрязнения [4]. Поскольку измерения содержания озона на постах государственной наблюдательной сети г. Красноярск не выполняются, состояние атмосферного воздуха оценивалось содержанием твердых частиц (РМ) и веществ, влияющих на уровни содержания озона. В приземном слое атмосферы основными предшественниками озона являются оксиды азота (NO_x) и летучие органические соединения (ЛОС), химические реакции между ними, в присутствии солнечного излучения, являются основным его источником. Для построения модели использовались среднесуточные концентрации оксидов азота, бензола, толуола, ксилола, этилбензола и формальдегида.

Согласно данным Территориального органа Федеральной службы Государственной статистики по Красноярскому краю (Красноярскстат) по распределению умерших по причинам смерти в Красноярске, наиболее распространенными заболеваниями являются новообразования, болезни органов дыхания и кровообращения [5]. Для проведения дальнейших исследований были выбраны болезни органов дыхания и кровооб-

ращения, характеризующиеся чувствительностью к загрязнению воздуха и климатическим факторам.

3. Используемые методы

Для оценки наличия взаимосвязи между метеорологическими факторами и количеством смертей рекомендуется использовать многомерный регрессионный анализ для дискретных зависимых переменных (многомерный регрессионный анализ Пуассона, отрицательный биномиальный регрессионный анализ) [6]. Выбор конкретной модели зависит от параметров рядов, характеризующих входные переменные. Для использования регрессионного анализа Пуассона ряды данных должны соответствовать требованию равенства дисперсии и среднего, поскольку распределение Пуассона однопараметрическое. Это требование обязательно только для прогнозируемого ряда (показателей смертности). Для выполнения этого условия выполнялась предварительная обработка рядов. На первом шаге исключались «выбросы» временных рядов. При обнаружении выскакивающих значений количества случаев того или иного показателя, которые выходят за пределы трех стандартных отклонений, они заменялись значением, соответствующим двум стандартным отклонениям. Затем проводилось сглаживание рядов методом скользящего среднего. Эти преобразования позволили подтвердить применимость пуассоновской модели для анализируемых данных.

В рамках рассматриваемой задачи к данным мониторинга состояния окружающей среды, не предъявляется особых требований, но они характеризуются наличием пропуска данных, как по значениям метеопараметров (температуры, влажности), так и по значениям концентраций вредных веществ. Заполнение пропусков – необходимое условие получения «полных» сведений на вход программ анализа. В работе реализованы следующие методы обработки статистических данных: метод исключения некомплектных значений, заполнение средним по присутствующим значениям в выборке и метод определения среднего значения по присутствующим значимым данным (по группам) с использованием программы MicrosoftExcel.

Зависимость смертности от загрязнения и высоких температур анализировалась с помощью Пуассоновской регрессионной модели [7]:

$$\log(\mu_t) = \beta_0 + \beta_1 \cdot X_{1,t} + \dots + \beta_k \cdot X_{k,t}$$
$$\mu = e^{\beta_0} \cdot e^{\beta_1 \cdot X_{1,t}} \cdot \dots \cdot e^{\beta_k \cdot X_{k,t}},$$

где μ_t – прогнозируемый параметр (пуассоновская переменная), $X_{1,t} \dots X_{k,t}$ – влияющие переменные, $\beta_1 \dots \beta_k$ – параметры модели, β_0 – свободный член, t – параметр времени, k – количество влияющих переменных. Пуассоновская переменная в данном случае характеризует количество смертей от климатозависимых заболеваний. Влияющие переменные – это метеорологические параметры, такие как температура и влажность воздуха, скорость ветра, и концентрации загрязнителей в атмосферном воздухе. Параметры модели устанавливают значимость вклада соответствующих влияющих переменных. Свободный член не связан с влияющими переменными и характеризует фоновые колебания пуассоновской переменной.

4. Результаты и обсуждение

Для подбора коэффициентов модели и преобразований временных рядов использовалась программа Statistica. На первом этапе оценивалась автокорреляционная функция для выявления трендов и сезонных составляющих рядов. Трендовая компонента была выявлена во временных рядах смертности, как от болезней органов кровообращения, так и дыхания, и выполнялась корректировка рядов с целью снижения влияния трендов. Основные параметры полученных моделей представлены в Таблицах 1, 2.

Таблица 1 – Расчетные коэффициенты модели прогноза смертности населения от сердечно-сосудистых заболеваний

Влияющие переменные	Оценка параметра, β_i	Лаг, дни	Стандартная ошибка	P	Прирост смертности, %
Свободный член	2,5	-	0,13	<0,001	12,1
Температура	0,005	-	0,002	0,016	1,00
	-0,006	1	0,003	0,034	0,99
Скорость ветра	-0,016	1	0,008	0,031	0,98
	0,018	4	0,008	0,016	1,02
	0,018	13	0,008	0,015	1,02
Влажность	-0,003	1	0,001	0,001	0,99
NO ₂	0,017	4	0,007	0,015	1,00
Бензол	0,008	4	0,003	0,004	1,00
	-0,008	7	0,004	0,024	1,02
	0,007	9	0,003	0,019	1,02

Для оценки адекватности модели рассматривался параметр отношения отклонения измеренных значений показателя смертности от рассчитанных к степеням свободы (Stat/Df = devianceratios). В хорошо соответствующей модели значение этого отношения должно быть близким к 1 [8]. Значения коэффициентов составили 1,07 и 1,23 для моделей прогноза смертности населения от сердечно-сосудистых заболеваний и органов дыхания соответственно. Дополнительно оценивалось визуальное соответствие фактических данных и прогнозных значений.

Таблица 2 – Расчетные коэффициенты модели прогноза смертности населения от болезней органов дыхания

Влияющие переменные	Оценка параметра, β_i	Лаг, дни	Стандартная ошибка	P	Прирост смертности, %
Свободный член	2,5	-	0,12	<0,001	12,7
Температура	-0,007	3	0,003	0,021	0,99
Скорость ветра	0,025	-	0,006	<0,001	1,03
	-0,018	1	0,007	0,013	0,98
NO	-0,012	2	0,006	0,046	0,99
Фенол	-0,016	3	0,008	0,050	0,98
	0,020	4	0,008	0,011	1,02
	-0,026	7	0,007977	0,0001	0,97
Бензол	-0,007	9	0,003395	0,037	0,99
	0,007	12	0,002636	0,006	1,0
Этилбензол	-0,018	7	0,024464	0,454	0,98

Параметр, дающий наибольший вклад в увеличение смертности в полученной модели косвенно характеризует все факторы, не связанные с климатическими процессами и загрязнением воздуха [9]. Он учитывает все медленные колебания смертности: сезонные, многолетние, зимние эпидемии и др., характерный временной период которых больше корреляционного радиуса зависимости смертности от учитываемых в модели параметров. Этот множитель аппроксимировался непараметрической сглаживающей функцией с числом степеней свободы DF = 368 (т.е. зависящей от значений ежедневной смертности за год).

В результате выполненных расчетов получены две модели, каждая из которых имеет 10 значимых параметров β_i (Таблицы 1 и 2). При этом влияющих факторов выявлено меньше и для обеих моделей общими являются такие метеорологические факторы, как температура, скорость ветра и, в качестве параметра состояния загрязнения атмосферы, – содержание бензола.

Также приблизительно одинаков вклад совокупности учитываемых в модели факторов в изменение уровней смертности – около 10%. При этом, если смотреть соотношение параметров в модели, смертность от болезней органов дыхания в большей степени зависит от уровня загрязнения атмосферы, а от болезней сердечно-сосудистой системы от метеорологических параметров. Эти результаты показывают возможность дальнейшего улучшения качества моделей за счет введения специфических метеорологических параметров, например волн тепла и холода, в одну модель и дополнительных загрязняющих веществ в другую.

Результаты, полученные в данной работе, могут быть использованы для совершенствования системы мониторинга состояния здоровья населения и среды обитания, для прогнозирования, в связи с изменением климата, а также для предупреждения и профилактики заболеваний, чувствительных к климатическим факторам.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и ККФПН и НТД в рамках научного проекта № 16-47-240766 р_а.

Список литературы

1. Научные основы прогнозирования и прогнозные показатели социально-экономического и научно-технологического развития России до 2030 года с использованием критериев стратегических рисков / Н.А. Махутов, Б.Н. Кузык, Н.В. Абросимов – М. ИНЭС, 2011. – 137 с.
2. Анализ риска здоровью в стратегии государственного социально-экономического развития : монография / Г.Г. Онищенко, Н.В. Зайцева, И.В. Май [и др.]; под общ. ред. Г.Г. Онищенко, Н.В. Зайцевой. – М.; Пермь: Изд-во Перм. нац.исслед. политехн. ун-та, 2014. – 738 с.
3. Архив погоды. URL: <http://rp5.ru/> (дата обращения 09.11.2015).
4. Руководство. План действий по защите здоровья населения от воздействия аномальной жары. Министерство здравоохранения. URL: <http://www.minzdrav.saratov.gov.ru/doc/detail.php?ID=24371> (Дата обращения: 13.09.2016)
5. Статистический бюллетень № 8-5.2. Здравоохранение в г. Красноярске в 2012 году. Территориальном органе федеральной службы государственной статистики по Красноярскому краю, Красноярск, 2013 г. 15 с.
6. МР 2.1.10.0057-12. 2.1.10. «Состояние здоровья населения в связи с состоянием окружающей среды и условиями проживания населения. Оценка риска и ущерба от климатических изменений, влияющих на повышение уровня заболеваемости и смертности в группах населения повышенного риска. Методические рекомендации», (утв. Роспотребнадзором 17.01.2012). URL: (Дата обращения: 23.02.2016).
7. Тасейко О.В., Бельская Е.Н., Сугак Е.В. Оценка риска здоровью населения г. Красноярска от волн тепла / Безопасность и живучесть технических систем: материалы и доклады / V Всероссийская конференция (Красноярск, 12-16 октября 2015 года): в 3 т.; научн. ред. В.В. Москвичев. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2015. – Т. 2. – С. 189-193.
8. Понарин Э.Д., Лисовский А.В., Зеликова Ю.А. Модели для пуассоновских зависимых переменных: можно ли прогнозировать результативность футбольных матчей? / Э.Д. Понарин, А.В. Лисовский, Ю.А. Зеликова // Социология: 4М. 2013. № 36. – С. 36-64.
9. Роберт И. Кабаков. R в действии. Анализ и визуализация данных в программе R / пер. с англ. Полины А. Волковой. – М.: ДМК Пресс, 2014. – 588 с.

НОВЫЕ СЛЕДСТВИЯ ГИПОТЕЗЫ ДИНАМИЧЕСКОГО СКЕЙЛИНГА ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА

В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф.Катанова,
Институт естественных наук и математики, каф. теоретической физики и информационных технологий в образовании, udodov@khsu.ru

1. Введение

Критические индексы и гипотеза подобия (скейлинга) лежат в основе современной теории критических явлений и фазовых переходов (ФП) [1-16]. Оказывается, можно получить некоторые соотношения между динамическими и статическими (термодинамическими) критическими индексами путем распространения на кинетические явления гипотезы статического скейлинга [4]. В классических работах считалось, что критическая температура положительна. Однако в последние десятилетия значительное внимание привлекали так называемые квантовые ФП [5, 6, 8, 9], для которых температура ФП $T_c = 0$. Ранее было показано, что равенство $T_c = 0$ приводит к новым следствиям из гипотез статического и динамического скейлинга [12, 17]. В данной работе выведены дополнительные следствия гипотезы динамического подобия при равенстве нулю температуры ФП или при критической температуре, стремящейся к нулю, для многокомпонентного параметра порядка.

II. Гипотеза динамического скейлинга. Однокомпонентный параметр порядка

Напомним основные определения [4]. Для времени релаксации параметра порядка τ вводятся два кинетических индекса y и z

$$\tau \propto (-\varepsilon)^{-y}, \quad \varepsilon \rightarrow -0, \quad k = 0, \quad y > 0, \quad (1)$$

где $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число, λ – длина волны,

$$\varepsilon = T - T_c, \quad (2)$$

$$\tau \propto k^{-z}, \quad \varepsilon = 0, \quad z > 0. \quad (3)$$

Предполагается, что гипотеза динамического скейлинга имеет вид [4]

$$\tau = |\varepsilon|^{-y} f(k\xi), \quad \varepsilon \rightarrow 0, \quad (4)$$

где ξ – корреляционная длина. Здесь $f(x) = f(k\xi)$ – функция одного аргумента, причем

$$f(0) = \text{const} > 0. \quad (5)$$

Отсюда можно показать, что (ν – критический индекс корреляционной длины)

$$y = \nu z, \quad (6)$$

это равенство считается прямым следствием гипотезы динамического скейлинга [4].

Индекс ν в теории фазовых переходов (ФП) Ландау для ФП 2-го рода равен [1, 3]

$$\nu = \frac{1}{2}. \quad (7)$$

Оказывается, в теории Ландау-Халатникова ФП 2-го рода кинетический индекс y равен [4]

$$y = 1. \quad (8)$$

Если критическая температура равна нулю $T_c = 0$, то этот результат не изменится.

Индекс z для однокомпонентного параметра порядка в теории Ландау-Халатникова равен [4]

$$z = 2, \quad (9)$$

это остается верным и при нулевой критической температуре. Подставляя (7), (8) и (9) в (6), найдем, что гипотеза динамического скейлинга выполняется для однокомпонентного параметра порядка как для $T_C > 0$, так и для $T_C = 0$.

III. Новые следствия гипотезы динамического подобия при нулевой критической температуре для многокомпонентного параметра порядка

Рассмотрим теперь системы, в которых параметр порядка имеет несколько компонент η_i , но эффективный гамильтониан зависит (в однородной системе) только от суммы их квадратов [4]. Если рассматривать η_i как вектор, то эффективный гамильтониан не зависит от его направления [4]. Примером является чисто обменный ферромагнетик, энергия которого (в нулевом магнитном поле) не зависит от направления вектора намагниченности, который является параметром порядка [4] (описывается изотропной моделью Гейзенберга). Другой пример – жидкий гелий-4, у которого роль параметра порядка играет волновая функция конденсата [4]

$$\eta = (n_0)^{1/2} e^{i\phi}. \quad (10)$$

Эта комплексная функция представляет собой совокупность двух независимых величин (вещественная и мнимая части), но энергия однородной жидкости зависит только от квадрата модуля [4]

$$|\eta|^2 = n_0,$$

где n_0 – плотность конденсата Эйнштейна из атомов гелия. Подобные системы имеют мягкую моду, связанную с колебаниями направления вектора параметра порядка; частота этих колебаний обращается в нуль в точке ФП [4].

Рассмотрим жидкий гелий-4 [4]. В этом случае мягкой модой является второй звук, который впервые предсказал Л.Д. Ландау. Вблизи точки перехода он представляет собой совместные колебания сверхтекучей скорости и энтропии. Колебания этой скорости означают колебания фазы ϕ конденсатной волновой функции [4]. Закон дисперсии этих колебаний имеет вид (фононы) [4]

$$\omega = u_2 k, \quad (11)$$

$$u_2 = \left(\frac{TS^2 \rho_s}{C_p \rho_n} \right)^{1/2}, \quad (12)$$

u_2 – скорость второго звука, S – энтропия, C_p – теплоемкость единицы объема жидкости, ρ_s (ρ_n) – плотность сверхпроводящей (нормальной) компоненты. При приближении к точке перехода $T \rightarrow T_C$ плотность ρ_s стремится к нулю по закону [4, 15] (Джозефсон, 1966 г.)

$$\rho_s \propto (T_\lambda - T)^{\frac{2-\alpha}{3}} = (-\varepsilon)^{\frac{2-\alpha}{3}}, \quad (13)$$

где α – критический индекс теплоемкости [1-4]:

$$C_p \propto |\varepsilon|^{-\alpha}. \quad (14)$$

Закон стремления к нулю скорости u_2 зависит от знака индекса α . Если $\alpha > 0$, так что

$$\varepsilon \rightarrow 0, C_p \rightarrow +\infty, \quad (15)$$

то [4]

$$u_2 \propto |\varepsilon|^{(1+\alpha)/3}, \alpha > 0. \quad (16)$$

Если же $\alpha < 0$, то теплоемкость стремится к конечному пределу, тогда получим [4]

$$u_2 \propto |\varepsilon|^{(2-\alpha)/6}, \alpha < 0, T_C = T_\lambda > 0. \quad (17)$$

Сначала рассмотрим случай положительного индекса теплоемкости α , что возможно для некоторых квантовых фазовых переходов. Можно показать, что в этом случае верна формула

$$\nu(z-1) = (1+\alpha)/3, T_C > 0 (\alpha > 0). \quad (18)$$

Индекс теплоемкости найдем из выражения [1-3]

$$\alpha = 2 - d\nu, (T_C > 0), \quad (19)$$

следовательно,

$$\nu(z-1) = ((3-d\nu)/3) = 1 - \frac{d\nu}{3}, T_C > 0 (\alpha > 0). \quad (20)$$

Делим это равенство на индекс корреляционной длины ν и находим кинетический индекс z

$$z = 1 + \frac{1}{\nu} - \frac{d}{3}, T_C > 0 (\alpha > 0). \quad (21)$$

Для трехмерного пространства формула принимает короткий вид

$$z = \frac{1}{\nu}, T_C > 0, d = 3 (\alpha > 0). \quad (22)$$

Это значит, что (см. (6))

$$z\nu = 1 = y, T_C > 0, d = 3 (\alpha > 0).$$

Общая формула выглядит следующим образом

$$\nu(z-1) = ((2+S_I-d\nu)/3), T_C \geq 0 (\alpha \geq 0), \quad (23)$$

где S_I – функция имеет форму [12 – 14, 17]

$$S_I = \left(\frac{T_C}{T} \right)^n, \quad T > T_C = T_\lambda. \quad (24)$$

Здесь n – положительная константа, которая может быть найдена из сопоставления с экспериментом или из микроскопической теории, или путем компьютерного моделирования.

Заметим, что если $T_C \rightarrow 0$, то критический индекс α не может оставаться положительным (это противоречит третьему началу термодинамики). При этом α может стать отрицательным (см. ниже), а может обратиться в нуль. Разберем последний случай. Проще всего использовать формулу (18), куда подставить $\alpha = 0$

$$\nu(z-1) = 1/3, T_C \geq 0 (\alpha = 0), \quad (25)$$

следовательно, индекс z равен (для сравнения см. (21) и (22))

$$z = 1 + 1/(3\nu), T_C \geq 0 (\alpha = 0). \quad (26)$$

Теперь разберем случай $\alpha < 0$, что соответствует, например, жидкому гелию-4, для которого [4, 15]

$$\alpha \approx -(0,025 \pm 0,005) < 0. \quad (27)$$

Согласно более новым данным [16] $\alpha \approx -0,012 < 0$.

Применим теперь гипотезу динамического скейлинга, согласно которой вблизи точки ФП закон дисперсии должен иметь форму [4]

$$\omega = k^z f(k\xi), \quad (28)$$

что можно переписать в виде

$$\omega = k^z f(k\varepsilon^{-\nu}) = k^z f_1 \left[(k\varepsilon^{-\nu})^{\frac{1}{\nu}} \right] = k^z f_1 \left(\frac{\varepsilon}{k^{\nu^{-1}}} \right). \quad (29)$$

Рассмотрим область упорядоченной фазы $T < T_C$, $\varepsilon = T - T_C < 0$. Требование, чтобы при $k\xi \ll 1$ закон дисперсии был линеен по волновому числу k означает, что если $k \rightarrow 0$, тогда аргумент функции f_1 стремится к минус бесконечности и при этом функция f_1 является степенной [4]

$$\omega = k^z f_1 \left(\frac{\varepsilon}{k^{\nu^{-1}}} \right) \propto k^z \left(\frac{\varepsilon}{k^{\nu^{-1}}} \right)^{B_1} \propto k^1. \quad (30)$$

Отсюда можно показать, что

$$B_1 = \nu(z-1). \quad (31)$$

Используя вышеприведенные формулы, найдем [4]

$$\nu(z-1) = (2-\alpha)/6, \quad T_C > 0 \quad (\alpha < 0). \quad (32)$$

Известна формула, следующая из гипотезы статического скейлинга [1-3]

$$2-\alpha = d\nu, \quad (T_C > 0) \quad (33)$$

где d – размерность пространства. Из последних двух формул следует [4]

$$z = 1 + d/6, \quad (\alpha < 0) \quad (34)$$

что для трехмерного пространства дает [4] (см. для сравнения (21), (22) и (26))

$$z = \frac{3}{2} \quad (\alpha < 0, \quad d = 3). \quad (35)$$

Эта формула верна как для $T_C > 0$, так и для случая $T_C = 0$ (для трехмерного пространства).

Известно, что в смеси жидких изотопов гелия He^3 и He^4 критическая температура может стремиться к нулю [15]. В этом случае выражение (33), следовательно, и (32) меняют свой вид [12, 17] (см. (24))

$$rd = 1 + S_I - \alpha = r, \quad (36)$$

r – род ФП в смысле Бакстера [2, 12]. Подставляя (36) в (32) приходим к результату [17]

$$\nu(z-1) = \frac{r}{6} = (1 + S_I - \alpha)/6, \quad T_C \geq 0, \quad (37)$$

который верен при любом значении критической температуры и описывает переход $T_\lambda \rightarrow 0$. Новизна ситуации заключается в том, что критический индекс z зависит от температуры и $T_\lambda = T_C$, от которых зависит S_I – функция (см. (24)). Если $T_\lambda = 0$, $T > 0$, что возможно для смеси жидких He^3 и He^4 [15], то S_I -функция равна нулю и получим

$$\nu(z-1) = \frac{r}{6} = (1-\alpha)/6, \quad T_C = T_\lambda = 0, \quad (T > 0, \alpha < 0). \quad (38)$$

Так как индекс α для жидкого гелия близок к нулю (см. (27)), то род ФП согласно (38) почти равен единице, что не удивительно, так как в соседней области фазовой диаграммы наблюдается расслоение на две фазы с разными концентрациями He^3 , то есть фазовое равновесие первого рода [15]. Заметим также, что из экспериментальной фазовой диаграммы для смеси жидких изотопов He^3 и He^4 [15] следует, что именно высокотемпературная фаза является сверхтекучей при $T \rightarrow 0$.

Формула (37) является интерполяционной и нуждается в экспериментальной проверке и теоретическом осмыслении.

Теперь вычислим динамический индекс y . Согласно (10) параметр порядка для сверхтекучего гелия есть волновая функция конденсата Эйнштейна атомов гелия. Пусть фаза Φ этой волновой функции равна

$$\Phi = \omega t, \quad (39)$$

где частота имеет вид

$$\omega = \omega_1 + i\omega_2. \quad (40)$$

Если ω_1 и ω_2 вещественны, то мнимая часть частоты зависит от волнового числа

$$\text{Im } \omega = \omega_2 \propto \omega_k. \quad (41)$$

Отсюда найдем для параметра порядка сверхтекучего гелия

$$\eta = n_0^{1/2} e^{i\Phi_1} e^{i\omega_2 t} = n_0^{1/2} e^{i\Phi_1} e^{-\omega_2 t} \propto e^{-\omega_k t}, \quad (42)$$

где ω_k играет роль обратного времени релаксации для колебаний фазы Φ . Время релаксации модуля параметра порядка $n_0^{1/2}$ не совпадает с таковым для фазы Φ , но по смыслу масштабной инвариантности оба времени равны по порядку величины при [4]

$$k\xi \approx 1 \Rightarrow k \approx 1/\xi. \quad (43)$$

Время релаксации обратно пропорционально частоте и учитывая (30), (31) и (43), найдем известную скейлинговую формулу для однокомпонентного параметра порядка [4]

$$y = \nu z = \nu' z, \quad (44)$$

однако сейчас верно выражение (34)

$$z = 1 + d/6, \quad (\alpha < 0, T_C > 0) \quad (45)$$

и (44) примет вид

$$y = \nu(1 + d/6) = \nu + \frac{d\nu}{6}. \quad (46)$$

Учитывая (33), получим

$$y = \nu + \frac{2-\alpha}{6} \quad (T_C > 0, \alpha < 0) \quad (47)$$

или исключая индекс ν

$$y = (2-\alpha) \left(\frac{1}{d} + \frac{1}{6} \right) \quad (T_C > 0, \alpha < 0). \quad (48)$$

Для трехмерного пространства получим более простой результат [4]

$$y = ((2-\alpha)/2) = 1 - \frac{\alpha}{2} \quad (T_C > 0, \alpha < 0). \quad (49)$$

В теории ФП 2-го рода Ландау критический индекс теплоемкости α равен нулю [1, 3], следовательно, индекс $y = 1$, что совпадает с результатом теории Ландау для однокомпонентного параметра порядка [4].

Если критическая температура равна нулю, то результаты меняются [12-14]. Формула (33) принимает вид

$$d\nu = 1 - \alpha \quad (T_C = 0). \quad (50)$$

Следовательно, (48) переписывается в форме

$$y = (1-\alpha) \left(\frac{1}{d} + \frac{1}{6} \right) \quad (T_C = 0, \alpha < 0). \quad (51)$$

Для трехмерного пространства получим новую формулу

$$y = \frac{(1-\alpha)}{2} = \frac{1}{2} - \frac{\alpha}{2} \quad (T_C = 0, \alpha < 0, d = 3), \quad (52)$$

что существенно отличается от известного результата (49) [4]. Поскольку для сверхтекучего гелия индекс α близок к нулю, то $y = 1/2$, что в два раза отличается от обычного значения $y = 1$. Это значит, что для смеси изотопов сверхтекучего гелия зависимость времени релаксации параметра порядка от температуры при $T_C \rightarrow 0$ становится существенно более слабой, чем при $T_C > 0$ для обычного изотопа He^4 .

Формулы для общего случая имеют вид

$$y = \nu + \frac{d\nu}{6} = \nu + \frac{1 + S_I - \alpha}{6} \quad (\alpha < 0), \quad (53)$$

$$y = (1 + S_I - \alpha) \left(\frac{1}{d} + \frac{1}{6} \right) \quad (T_C \geq 0, \alpha < 0). \quad (54)$$

Для трехмерного пространства получим еще одну общую формулу

$$y = z\nu = \frac{3\nu}{2} = \frac{1 + S_I - \alpha}{2} \quad (d = 3, T_C \geq 0, \alpha < 0). \quad (55)$$

S_I -функция представлена выражением (24) [12-14, 17]. Новые формулы для многокомпонентного параметра порядка (53) – (55) справедливы для любой критической температуры как положительной, так и для $T_C = 0$, а также описывают переход $T_C \rightarrow 0$ для смеси изотопов сверхтекучего гелия. К сожалению, критические индексы для смеси изотопов сверхтекучего гелия в последнем случае, видимо, экспериментально не измерены.

IV. Заключение

Показано, что большинство следствий гипотезы динамического скейлинга справедливы как при положительной критической температуре T_C , так и при $T_C \rightarrow 0$. Если критическая температура равна нулю, то соотношения динамического скейлинга, содержащие критический индекс теплоемкости, меняют свой вид. Однако это не говорит о нарушении гипотезы скейлинга. Предложены новые интерполяционные формулы для кинетических индексов z и y , справедливые для фазовых переходов (ФП) с многокомпонентным параметром порядка η_i (когда свободная энергия зависит только от модуля $|\eta_i|$) при изменении температуры, как при $T_C > 0$, так и при $T_C = 0$. Эти интерполяционные формулы верны для любой размерности пространства и для любого знака критического индекса теплоемкости α , однако реальный объект для проверки – смесь жидких изотопов He^3 и He^4 при температурах, близких к абсолютному нулю, когда $\alpha < 0$.

Показано, что для смеси изотопов сверхтекучего гелия He^3 и He^4 зависимость времени релаксации параметра порядка от температуры (задается индексом y) при $T_C \rightarrow 0$ становится существенно более слабой ($y \rightarrow 1/2$), чем при $T_C > 0$ для обычного изотопа He^4 , когда $y \approx 1$ [4]. Для проверки предложенной теории желательно экспериментальное измерение критических индексов для смеси изотопов гелия при температуре, стремящейся к абсолютному нулю, что сопряжено со значительными сложностями.

Кроме того, проверка полученных результатов возможна для многих квантовых ФП [6] при $T_C \rightarrow 0$ (а также при $T_C > 0$), например, для сверхпроводников или для ферромагнетика $Ce_{2.15}Pd_{1.95}In_{0.9}$ [8], для изотропных гейзенберговских ферромагнетиков, а также путем численных расчетов на моделях. Выяснение связи новых интерполяционных формул для кинетических индексов z и y с квантовыми фазовыми пере-

ходами – дело будущего. Безусловно, нужны и новые экспериментальные данные по критическим индексам вблизи абсолютного нуля.

Список литературы

1. Stanley H.E. Introduction to phase transitions and critical phenomena / H.E.Stanley. — Clarendon press, Oxford, 1971. — 308 p.
2. Baxter R.J. Exactly Solved Models In Statistical Mechanics / R.J.Baxter. — Academic press, London, New York, Sydney, Tokyo, Toronto, 1982. — 502 p.
3. Ландау Л.Д. Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1. 4-е изд. / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. — М., Наука, 1995. — 608 с.
4. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 10. Физическая кинетика. / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М., Наука, 1979. — 528 с.
5. Rechester A.B. Contribution to the theory of second-order phase transitions at low temperatures / A.B.Rechester // Soviet physics JETP. — 1971. — Т.33. — № 2. С.782 – 796.
6. Sachdev S. Quantum phase transitions / S.Sachdev. — Yale University, New Haven, USA, 1999.
7. Abrikosov A.A. Fundamentals of the Theory of Metals / A.A.Abrikosov. — Amsterdam, North-Holland, 1988.
8. Sereni J.G. Searching for a Quantum Critical Point in Rh doped ferromagnetic $Ce_{2.15}Pd_{1.95}In_{0.9}$ / J.G.Sereni, M.Giovannini, M.Gomez Berisso, A.Saccone // Journal of Physics: Conference Series. — 2012. — Т.391. — С.012062.
9. Cano A. Low-temperature structural phase transitions: phonon-like and relaxation order-parameter dynamics / A.Cano, A.P.Levanyuk // Phys. rev. B. — 2004. — Т.70. — С.064104.
10. Udodov V. Heat capacity and new classification of phase transitions of fractional order: Ising model/V.Udodov// Bulletin of the APS. March Meeting. — 2013. — V.58. — № 1. — С17. С.00003.
11. Удодов В.Н. Характер фазового перехода в одномерной традиционной модели Изинга и переходы дробного рода / В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных систем // материалы 12 Всерос. семинара. Ред.В.В.Слабко. — Красноярск: ИВМ СО РАН, ИПК СФУ. — 2009. — С.175 – 180.
12. Удодов В.Н. Гипотеза подобия при низких температурах. / В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных систем // материалы 17 Всерос. семинара. Ред.М.Г.Садовский. — Красноярск: ИВМ СО РАН, ИПК СФУ. — 2014.
13. Удодов В.Н. Новая классификация фазовых переходов и кроссовер при низких температурах с изменением рода перехода на единицу / В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных систем // материалы 15 Всерос. семинара. Ред.В.В.Слабко. — Красноярск: ИВМ СО РАН, ИПК СФУ. — 2012. — С. 204 – 209.
14. Udodov V. Violating of the Essam-Fisher and Rushbrooke Relationships at Low Temperatures/ V.Udodov// World Journal of Condensed Matter Physics. — 2015. — Т.5. — №2. — С. 55-59. <http://dx.doi.org/10.4236/wjcmp.2015.52008>
15. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. — М., Наука, 1982. — 382 с.
16. Погорелов А.А. О критических индексах для λ -перехода в жидком гелии / А.А.Погорелов, И.М.Суслов // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — Т.86. — Вып.1. — С. 41-47.
17. Удодов В.Н. Динамическая масштабная инвариантность при низких температурах. / В.Н.Удодов // Моделирование неравновесных систем // материалы 18 Всерос. семинара. Ред.М.Г.Садовский. — Красноярск: ИВМ СО РАН, ИПК СФУ. — 2015. — С. 112-118.

ВЫЯВЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ РЕЖИМОВ И УСЛОВИЙ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КОАГУЛЯЦИИ ЖИДКОДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ В ИМПУЛЬСНОМ РЕЖИМЕ⁸

В.Н.Хмелёв¹, Р.Н.Голых¹, Р.С.Доровских¹, Е.В.Ильченко¹, В.А.Шакура¹,
В.А.Нестеров¹,

¹Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ,
кафедра методов и средств измерений и автоматизации, romangl90@gmail.com

Образование устойчивых жидкодисперсных систем со взвешенными твёрдыми веществами (буровые растворы, растительные экстракты, плодово-ягодные напитки и т. д.) сопровождается множеством процессов современных нефтяных, химико- и биотехнологических производств. Для получения конечного продукта требуемого качества, как правило, стоит необходимость в отделении твёрдой фазы жидкодисперсной системы от несущей. Сроки естественного осаждения взвешенных веществ или их отделения с помощью фильтрующих материалов (например, бентонита) иногда настолько продолжительны (вплоть до нескольких месяцев) [1–2], что ни о каком масштабном производстве больших объемов продукции не может быть и речи. Низкая эффективность существующих способов очистки жидкодисперсных сред от взвешенных частиц обусловлена малым размером последних (как правило, не более 10 мкм).

Одно из перспективных направлений повышения эффективности отделения взвешенных частиц в жидкости – предварительное их укрупнение (коагуляция) [2] под воздействием ультразвуковых (УЗ) колебаний. Однако возможность возникновения кавитации [3, 4], приводящей к вторичному разрушению образующихся агломератов, требует сильного ограничения интенсивности УЗ колебаний (например, для маловязких жидкостей значениями не более 0,5 Вт/см²), что тем самым ограничивает эффективность коагуляции.

В связи с этим необходим поиск новых подходов к организации УЗ воздействия, позволяющих увеличить акустическую энергию, вводимую в жидкость, не допуская при этом возникновения кавитации.

Один из перспективных подходов к увеличению предельно допустимой вводимой УЗ энергии в докавитационном режиме – УЗ воздействие в виде волновых пакетов конечной длительности (рис. 1) 0,5...10 мс, меньшей периода их следования 1...20 мс (коротких импульсов) [5].

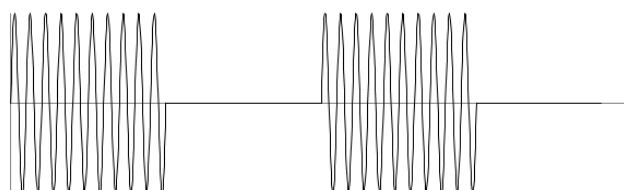


Рис.1. Форма колебаний ультразвуковых импульсов.

В этом случае кавитационные ядра за время длительности волнового пакета не успевают вырасти с начальных размеров $10^{-8}...10^{-7}$ м, до размеров 10^{-6} мкм и более, необходимых для реализации кавитационного режима [5]. Тем самым предельно допустимая интенсивность УЗ колебаний, при которой поддерживается устойчивый докавитационный режим, увеличивается.

⁸ Исследование выполнено при финансовой поддержке Гранта Президента РФ № МК-4515.2016.8

Как следствие, такая организация УЗ воздействия может повысить эффективность коагуляции жидкодисперсных систем по сравнению с непрерывным воздействием.

Однако, несмотря на увеличение пороговой интенсивности, другим фактором, ограничивающим эффективность коагуляции, в этом случае будет скважность импульса (отношение длительности к периоду следования). Это обусловлено тем, что суммарная энергия УЗ импульсного воздействия пропорциональна наряду с интенсивностью импульса его скважности. Поэтому задача выявления оптимальных параметров УЗ импульса (по интенсивности, длительности и периоду следования), обеспечивающих максимальную эффективность коагуляции жидкодисперсных систем, является актуальной.

Для решения поставленной задачи разработана модель коагуляции твёрдых частиц в жидкой среде при УЗ импульсном воздействии, которая состоит из двух частей:

1) *анализ формирования кавитационных зародышей* для выявления оптимальных параметров импульса (интенсивность, длительность и период следования), реализующих докавитационный режим и одновременно обеспечивающих максимальное значение вводимой УЗ энергии;

2) *анализ сближения и укрупнения частиц (коагуляции)* для выявления эволюции их дисперсного состава с течением времени под воздействием УЗ импульсов с выявленными оптимальными параметрами.

Анализ модели формирования кавитационных зародышей проводился на основе уравнения диффузии газа в кавитационную полость [5]:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{\frac{8}{3} \pi D C_0 R_0 \left(\frac{p_m}{p_0} \right)^2}{\left(1 - \xi^2(R_0) \right)^2 + \left(\frac{\omega}{\omega_0(R_0)} \right)^4 \frac{\omega^2 \eta^2}{K_c^2(R_0)}} - 4 \pi D_r C_0 R_0; \quad (1)$$

где m – масса газа внутри пузырька, кг; D – коэффициент прямой диффузии растворённого газа в жидкости, $\text{м}^2/\text{с}$; D_r – коэффициент обратной диффузии растворённого газа в жидкости, $\text{м}^2/\text{с}$; R_0 – радиус кавитационного зародыша, м; p_m – амплитуда звукового давления в жидкости, Па; p_0 – статическое давление в жидкости; ω – круговая частота акустического воздействия, с^{-1} ; ω_0 – резонансная частота кавитационного пузырька, с^{-1} ; K_c – коэффициент сжимаемости кавитационного пузырька, равный $K_c = -\frac{1}{V} \frac{dV}{dp} = \frac{1}{\rho p_0}$.

В результате анализа формирования кавитационных зародышей установлено, что воздействие в импульсном режиме позволяет увеличить вводимую УЗ энергию до 1,5 раз по сравнению с непрерывным воздействием. При этом кавитация не возникает.

Для обеспечения максимума вводимой энергии в докавитационном режиме длительность импульса не должна превышать 3 мс. При этом для более высоковязких жидкостей оптимальная длительность меньше, из-за того, что вязкость препятствует возникновению кавитации и увеличивает пороговую интенсивность.

Анализ сближения и укрупнения частиц проводился на основе уравнения Смолуховского [5]:

$$\frac{\partial n_k}{\partial t}(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} \beta_{i,k-i} n_i(t) n_{k-i}(t) - n_k \sum_{i=1}^{\infty} \beta_{i,k} n_i(t); \quad (2)$$

где n_k – счётная концентрация частиц, имеющих размер $d_0 \sqrt[3]{k}$ (d_0 – размер наименьшей

частицы, м), м^{-3} ; $\beta_{i,k}$ – вероятность столкновения частиц с размерами $d_0\sqrt[3]{i}$ и $d_0\sqrt[3]{k}$, $\text{м}^3/\text{с}$.

Входящая в уравнение (2) вероятность столкновения определяется согласно полученному выражению (3):

$$\beta_{i,j} = \frac{1}{2} \frac{\tau}{T} (d_i + d_j)^2 \sqrt{\frac{2I}{\rho c}} H_{i,j} + \frac{\pi I}{\pi I_0} \frac{(d_i + d_j)^2}{6\mu} \left(\frac{1}{d_i} + \frac{1}{d_j} \right) \int_0^\pi h(f_{21}) f_{21} \sin \theta d\theta; \quad (3)$$

где d_i, d_j – размеры частиц, м; $H_{i,j}$ – модуль разности комплексных коэффициентов увлечения частиц в УЗ поле; τ – длительность импульса, с; T – период следования импульсов, с; I_0 – опорная интенсивность, равная $1 \text{ Вт}/\text{см}^2$; f_{21} – сила гидродинамического взаимодействия частиц при интенсивности импульса $1 \text{ Вт}/\text{см}^2$; I – интенсивность УЗ колебаний, $\text{Вт}/\text{см}^2$; ρc – волновое сопротивление жидкости, $\text{Па}\cdot\text{с}/\text{м}$; μ – вязкость жидкости, $\text{Па}\cdot\text{с}$.

На основании уравнения (2) и выражения для вероятности столкновения (3) рассчитывались зависимости времени коагуляции от размера исходных частиц и вязкости несущей жидкости для случаев УЗ воздействия в непрерывном и импульсном режиме (рис. 2, 3).

Под временем коагуляции понимается время, на протяжении которого суммарная концентрация частиц $n(t) = \sum_{i=1}^{\infty} n_i(t)$ падает до значения 0,1 от первоначальной $0,1n(0)$. Во всех расчётах частота УЗ воздействия принималась равной 22 кГц, а интенсивность, длительность и период следования импульсов выбирались оптимальными для данной вязкости жидкой фазы, при которых обеспечивается максимальная вводимая УЗ энергия и одновременно поддерживается докавитационный режим.

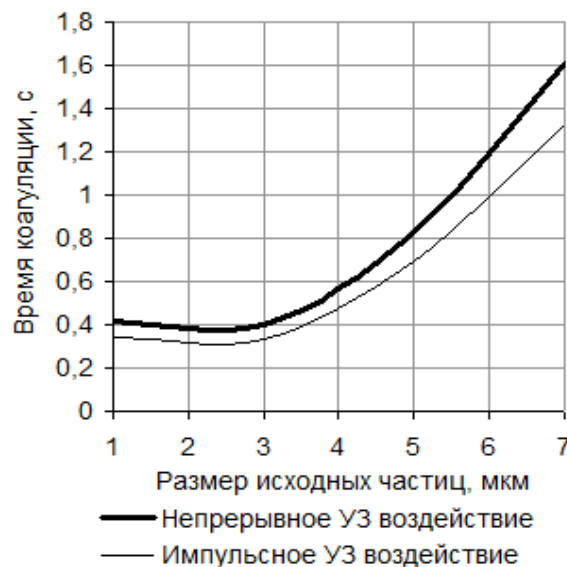


Рис.2. Зависимость времени коагуляции от размера исходных частиц при непрерывном и импульсном УЗ воздействии (вязкость несущей жидкости $1 \text{ мПа}\cdot\text{с}$).

Согласно представленным зависимостям (рис. 2) достижимый эффект от УЗ импульсного воздействия слабо зависит от размера исходных частиц, и коагуляция в жидкости с вязкостью $1 \text{ мПа}\cdot\text{с}$ ускоряется на 17...19% по сравнению с воздействием в непрерывном режиме. Однако достижимый эффект от применения импульсного воз-

действия тем выше, чем больше вязкость жидкости (рис. 3). Например, в жидкости с вязкостью 100 мПа·с коагуляция частиц при импульсном УЗ воздействии происходит до 1,5 раз эффективнее по сравнению с непрерывным воздействием.

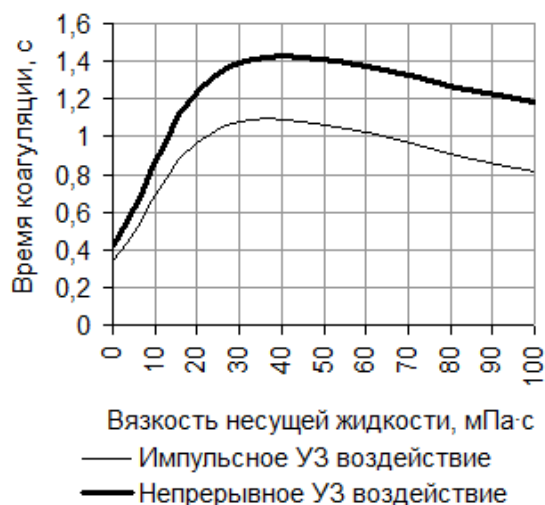


Рис.3. Зависимость времени коагуляции от вязкости несущей жидкости при непрерывном и импульсном УЗ воздействии (размер исходных частиц 1 мкм).

Полученные результаты могут служить основой для проектирования и выбора режимов работы УЗ импульсного оборудования, реализующего эффективную коагуляцию жидкодисперсных систем.

Список литературы

1. Khmelev, V.N. Evaluation of the area of intensive coagulation of dispersed-phase particles in emulsion and suspension due to high-intensive ultrasonic treatment / V.N. Khmelev, Y.M. Kuzovnikov, S.N. Tsyganok, S.V. Levin, S.S. Khmelev // International Workshop and Tutorials on Electron Devices and Materials, EDM Proceedings. – Novosibirsk: NSTU, 2012. – P. 140–144.
2. Kuzovnikov, Y.M. Studying of coagulation and sedimentation of small hard particles in liquid medium during ultrasonic treatment / Y.M. Kuzovnikov, S.S. Khmelev, S.N. Tsyganok, V.N. Khmelev // 11th Annual International Conference and Seminar on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices, EDM'2010 – Proceedings. – Novosibirsk: NSTU, 2010. – P. 281–284.
3. Khmelev, S.S. Evaluation of optimum modes and conditions of ultrasonic cavitation influence on high-viscous and non-newtonian liquid mediums / S.S. Khmelev, V.N. Khmelev, R.N. Golykh // Romanian Journal of Acoustics and Vibration. – Bucharest: Universitatea Politehnica Bucuresti, 2015. – V. 12. – Iss. 1. – P. 20–28.
4. Khmelev, V.N. Determination of ultrasonic effect mode providing formation of cavitation area in high-viscous and non-newtonian liquids / V.N. Khmelev, R.N. Golykh, A.V. Shalunov, S.S. Khmelev, K.A. Karzakova // International Conference of Young Specialists on Micro/nanotechnologies and Electron Devices, EDM. – Novosibirsk: NSTU, 2014. – P. 203–207.
5. Khmelev V.N. Evaluation of Optimum Modes of Ultrasonic Pulsed Influence for Coagulation In Liquid-Dispersed Medium / V.N. Khmelev, R.N. Golykh, M.V. Khmelev, V.A. Shakura, A.V. Shalunov, R.V. Barsukov // 17th International Conference on Micro/nanotechnologies and Electron Devices, EDM'2016. – Novosibirsk: NSTU, 2016. – P. 225–231.

ОБ УСЛОВИЯХ СКВОЗНОГО ПРОХОЖДЕНИЯ АСТЕРОИДНЫХ ТЕЛ ЧЕРЕЗ АТМОСФЕРУ ЗЕМЛИ БЕЗ СТОЛКНОВЕНИЯ С ЕЕ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Д. Е. Хренников¹, А. К. Титов¹, А. Е. Ершов^{1,2}, С. В. Карпов^{1,3}

¹ Сибирский государственный аэрокосмический университет
имени академика М. Ф. Решетнева,

² Институт вычислительного моделирования СО РАН,

³ Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, karpov@iph.krasn.ru

Проблема движения в атмосфере Земли крупных космических тел (КТ), способных выпасть на поверхность планеты в виде метеоритов, представляет в настоящее время большой интерес. Не менее актуальной задачей является исследование условий прохождения таких тел сквозь атмосферу даже без столкновения с поверхностью Земли, поскольку порождаемые этим прохождением ударные волны обладают колоссальным разрушительным действием [1 – 4].

Крупные КТ (размером 1–10 км и более), несущие потенциальную опасность столкновения с Землей, обнаруживаются обычными астрономическими наблюдениями. Тела промежуточных размеров начали регистрироваться сравнительно недавно. Наблюдение за такими телами и интерпретация наблюдательных данных позволяет выяснить, какова вероятность их столкновения с Землей, каковы их свойства, характерные особенности пролета через атмосферу и последствия падений. Выяснение этих вопросов позволит более точно оценить степень астероидной опасности.

Одной из фундаментальных проблем метеорной физики служит определение доатмосферной массы болидообразующих тел, поскольку интенсивность метеорного явления определяется кинетической энергией тела при входе в атмосферу планеты. При этом известно, что скорость тел при входе в атмосферу Земли лежит в относительно узком диапазоне $11.2 < V_e < 72.8$ км/с, так что разброс значений вклада фактора скорости в кинетическую энергию не превышает 50 раз. Вместе с тем значение массы метеорного тела может изменяться в существенно более широком диапазоне: от долей грамма (микрометеоры) до десятков миллионов тонн и более (Тунгусское космическое тело), то есть — на 13–15 порядков.

Целью работы является оценка влияния на траекторию КТ его прохождения через плотные слои атмосферы с учетом действующих сил, начальной скорости, массы и ее изменения в процессе пролета, а также получение доказательств и определение условий возможного прохождения крупного КТ сквозь атмосферу с незначительной потерей массы без столкновения с Землей. Полученные результаты сопоставляются с наблюдательными данными по Тунгусскому космическому телу с оцениваемой высотой взрыва около 10–15 км для получения доказательств в пользу новой версии Тунгусского явления, объясняющей отсутствие метеоритного материала на поверхности Земли в районе эпицентра.

Прежде всего, представим схему, поясняющую вхождение КТ в атмосферу Земли относительно выбранной системы координат ХУ (рис. 1). Высота входа в атмосферы КТ отсчитывается от значения $h = 160$ км, при котором температура КТ начинает возрастать [2]. Этот слой атмосферы обозначен на рис. 1 величиной h (этим же параметром обозначается текущая высота КТ относительно поверхности Земли). Угол входа в атмосферу относительно системы координат и данной точки поверхности Земли является одним из важнейших параметров задачи и обозначается β (угол наклона траектории по отношению к плоскости горизонта).

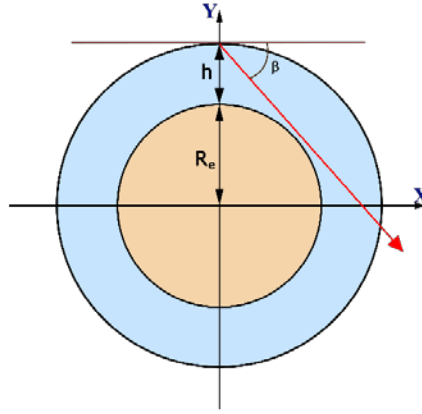


Рис.1. Схема движения космического тела в атмосфере Земли и угол входа в атмосферу (β) в данной точке относительно системы координат XY. R_e — радиус Земли. Траектория КТ обозначена линией со стрелкой.

Баллистика КТ определяется системой уравнений, включающих в себя уравнение движения под действием приложенных сил — силы аэродинамического сопротивления $\mathbf{F}_f$ и силы тяжести $\mathbf{F}_g$ [1]:

$$M \frac{d\mathbf{V}}{dt} = -\frac{1}{2} c_d \rho_a V^2 S \frac{\mathbf{V}}{V} + M\mathbf{g}, \quad \mathbf{F}_g = M\mathbf{g}, \quad \mathbf{g} = -\frac{GM_e}{r^3} \mathbf{r}, \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{V}. \quad (1)$$

Здесь M , $\mathbf{V}$ — масса и скорость тела относительно Земли, t — время; G — гравитационная постоянная, $\mathbf{g}$ — ускорение свободного падения, M_e — масса Земли. Отметим, что в уравнении (1) пренебрегается вкладом в баллистику КТ подъемной силы, возникающей в случае тел сильно несферической (плоской) формы (принимая, что форма КТ близка к сферической), а также реактивной силы, возникающей из-за несимметричного сублимационного потока.

В соответствии с имеющимися представлениями [1], основной вклад в силу аэродинамического сопротивления вносит разность давлений между фронтальной и тыловой частью поверхности КТ (в условиях образования вакуумной полости вблизи тыловой поверхности). Выражение для силы сопротивления имеет следующий вид [1]:

$$\mathbf{F}_f = -\frac{1}{2} c_d \rho_a(h) V^2 S \frac{\mathbf{V}}{V}, \quad (2)$$

где c_d — коэффициент аэродинамического сопротивления, $\rho_a(h)$ — плотность атмосферы на высоте h , S — площадь миделева сечения тела, зависящая от его текущей массы и размера (см. выражение (3)). В этом выражении начальные значения площади сечения и массы КТ обозначены как S_0 и M_0 (показатель $2/3$ соответствует частному случаю — форме КТ близкой к сферической) [2]:

$$S(t, M) = S_0 \left(\frac{M(t)}{M_0} \right)^{2/3}. \quad (3)$$

Реальный учет зависимости $S(t, M)$ осуществляется при численном решении дифференциального уравнения (1) на каждом шаге итерации при изменении массы КТ. Отметим, что вклад в аэродинамическое сопротивление за счет передачи импульса от молекул при столкновении КТ с набегающим потоком воздуха оказывается незначительным и в существующих моделях им пренебрегают [1,3,4].

Коэффициент аэродинамического сопротивления зависит от числа Рейнольдса и может быть найден из известных экспериментальных данных [5]. Экспериментально

измеренная величина коэффициента сопротивления КТ в общем случае зависит от числа Рейнольдса (Re), которое представляет собой отношение сил инерции к силам сопротивления, действующим на КТ, и которое определяется выражением $Re = \frac{VR}{\nu}$.

Применительно к решаемой задаче здесь ν — кинематическая вязкость воздуха. При скорости V от 10 до 40 км/с, радиусе (R) КТ порядка нескольких десятков метров и коэффициенте кинематической вязкости воздуха на высоте полета от $5 \cdot 10^{-5}$ м²/с и более, значение числа Рейнольдса превышает 10^{10} [2]. В соответствии с [5], если число Рейнольдса достигает превышает $1.5 \cdot 10^5$, то наблюдается резкое падение c_d до 0.1, которое не превышает этого значения при дальнейшем увеличении Re . Для проверки влияния этого коэффициента на баллистику КТ значение c_d варьировалось в диапазоне $0.01 \leq c_d \leq 0.1$. Использование в расчетах максимального значения c_d соответствует наиболее экстремальным условиям движения КТ в атмосфере. Зависимость плотности атмосферного воздуха от высоты определяется экспериментальными данными [6]. Уравнение (4) описывает потерю массы КТ при движении в атмосфере с учетом изменения ее плотности по высоте:

$$\frac{dM}{dt} = -\frac{c_h \rho_a(h) V^3 S}{2H}, \quad (4)$$

где H — суммарная теплота сублимации материала КТ, c_h — коэффициент лучистого теплообмена, который показывает долю кинетической энергии набегающего потока молекул, расходуемой на сублимацию материала КТ [2].

В соответствии с имеющимися представлениями, основной вклад в процесс потери массы КТ вследствие его нагрева существенно выше температуры плавления вносит лучистый теплообмен между КТ и пограничным слоем ударной волны [1], температура которого у поверхности КТ может достигать нескольких тысяч градусов [2]. При этом вклад конвективного теплообмена с поверхностью КТ считается пренебрежимо малым [1]. Подробно данная проблема обсуждается в работе [2].

Одним из сложных вопросов в расчетах лучистого теплообмена является определение значения коэффициента лучистого теплообмена (c_h). На его величину влияет скорость движения в атмосфере, высота полета, плотность воздуха, температура пограничного слоя и характер процессов в нем (диссоциация и ионизация молекул воздуха), степень черноты излучающей и поглощающей поверхности и т.д. В соответствии с имеющимися данными [1], в зависимости от высоты и скорости полета, значения этого параметра лежат в диапазоне $0.01 \leq c_d \leq 0.1$ [1,3] (максимальное значение — на высоте около 10 км). С учетом того, что скорость потери массы достигает максимума при $c_h = 0.1$, в расчетах будет использоваться именно это значение.

Степень черноты для излучающей и поглощающей поверхности принимается близкой к единице из-за высокой температуры поверхностей и образования плотной высокотемпературной плазмы. Температура для железного КТ на высоте 12 км может превышать 6000К.

Уравнение движения КТ (1) с переменной массой (4) решались численно методом Эйлера и Рунге-Кутты.

Отметим, что в разработанной модели не анализируется процесс фрагментации КТ [7,8], поскольку его начальные размеры принимаются значительными (от 50 до 200 метров), при которых большая часть тела сохраняется, несмотря на экстремальные внешние воздействия. В первую очередь это касается железных КТ, что связано с высокой однородностью его внутренней структуры.

Для демонстрации возможностей разработанного нами программного продукта выполнены расчеты изменения траектории сферического КТ из железа радиусом 50 м при прохождении через атмосферу на минимальной высоте 10 км. Показано, что при данных параметрах возмущение траектории КТ характеризуется углом отклонения от начального направления, который достигает 10 градусов.

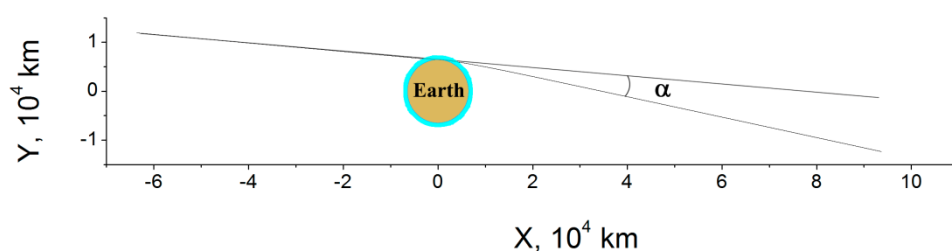


Рис.2. Изменение траектории КТ при сквозном пролёте через атмосферу.

Параметры КТ — радиус 50 м, скорость входа в атмосферу 25 км/с.

На рис. 3 изображены траектории движения космического тела при разных углах входа в атмосферу. Траектория 6 соответствует полной потере массы, траектория 7 — столкновению с поверхностью Земли. Остальные траектории соответствуют сквозному прохождению КТ через атмосферу. Данные о скорости выхода КТ из атмосферы представлены ниже.

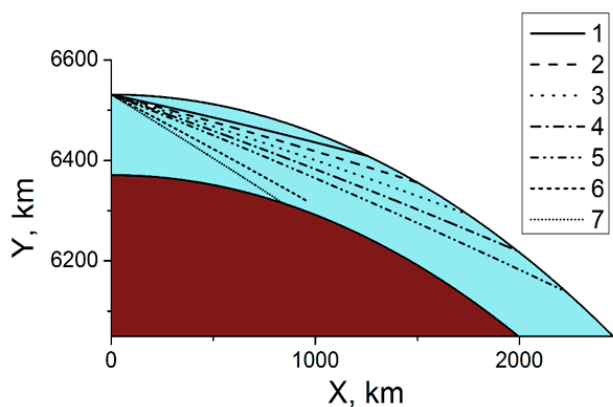


Рис.3. Траектории пролёта КТ в атмосфере при углах входа (β) от 5° до 9° .

1 — $\beta = 5^\circ$, 2 — $\beta = 6^\circ$, 3 — $\beta = 7^\circ$, 4 — $\beta = 8^\circ$, 5 — $\beta = 9^\circ$ (материал — железо), 6 — $\beta = 12^\circ$ (материал — лёд), 7 — $\beta = 14^\circ$ (материал — железо).

Параметры КТ — радиус 50 м (для 6 и 7 — 25 м), начальная скорость 25 км/с.

С помощью использованной модели исследованы изменения характеристик КТ из железа при его движении в атмосфере: изменение массы КТ, а также скорость потери массы для тел с радиусом 100, 50 и 25 метров на длине траектории сквозного про-

хождения атмосферы при фиксированном наборе параметров. Исследованы изменения скорости КТ на длине траектории и изменения высоты полета для трех размеров тел — 100, 50 и 25 м. Полученные результаты показывают, что при таких размерах скорость КТ относительно Земли существенно не снижается, что позволяет КТ оставаться на околосолнечной орбите. Отмечается более существенное падение скорости КТ радиусом 25 м по сравнению с радиусом 100 и 50 м.

В таблице представлены результаты расчетов, описывающих условия прохождения сквозь атмосферу Земли КТ с радиусом 100, 50 и 25 м из железа, камня и льда.

Таблица

Максимальная и минимальная доли оставшейся массы КТ (относительно исходного значения) из разных материалов при различной начальной скорости и исходных размерах.

Железо			Камень			Лед		
100 м	0 м	25 м	100 м	0 м	25 м	100 м	50 м	25 м
90%	40%	25%	40%	5%	10%	0	0	0
15 км/с	12 км/с	11.5 км/с	5 км/с	2.5 км/с	14 км/с	12-40 км/с	12-40 км/с	12-40 км/с
10-40%	10%	0	20%	<10%	0	0	0	0
20-40 км/с	25-40 км/с	18-22 км/с	20-25 км/с	20-25 км/с	>20 км/с	12-40 км/с	12-40 км/с	12-40 км/с

Как видно из таблицы, наибольшая доля сохранившейся массы наблюдается у КТ из железа с радиусом 100 м при низких начальных скоростях. При увеличении скоростей вдвое остаточная масса падает в четыре раза. Аналогичные тенденции наблюдаются для КТ из камня с существенно большей потерей массы. Для ледяного КТ при любых начальных скоростях и размерах имеет место полная потеря массы.

В заключении о проверке достоверности гипотез о природе Тунгусского космического явления с помощью разработанной модели. В настоящее время существует около 100 гипотез о природе Тунгусского явления, среди которых в какой-то степени научно обоснованными являются 3–4 версии. К ним относятся падение на Землю малого астероида размером несколько десятков метров, состоящего из традиционных материалов – металла или камня, а также льда, характерного для кометных ядер. Наиболее вероятным материалом Тунгусского КТ называется лед. В соответствии с описанными в литературе наблюдательными данными, имеются несколько вариантов расположения и протяженности траектории Тунгусского КТ — от 450 до 600 км, с направлением распространения от «юг-север» до «восток-запад». При этом называется угол входа в атмосферу 30°.

Расчеты показывают, что сохранение массы ледяного КТ на траектории падения на поверхность Земли при угле входа в атмосферу 30° составляет 40%, 11% и 0.000002% массы (при радиусе КТ 100, 50 и 25 м) и различных скоростях входа в атмосферу при длине траектории до момента падения около 325 км. При для радиусов 100 и 50 м наблюдается падение КТ с сохранением 15% и 0.0005% массы, для радиуса 25 м имеет место полная потеря массы при длине траектории падения около 320 км. Сохра-

нение значительной частиц исходной массы при падении КТ приводит к образованию кратера. С учётом того, что в районе эпицентра отсутствуют кратеры, а реальная длина траектории по результатам визуальных наблюдений составляет около 450–600 км, что в полтора раза больше расчетного значения, утверждение о ледяном происхождении КТ, входящего в атмосферу под углом 30° , является необоснованным.

Показано, что изменение массы ледяного КТ с радиусом 100 м на длине траектории сквозного прохождения при малых углах входа в атмосферу со значительным сохранением массы возможно лишь при минимальной высоте более 40 км, что противоречит экспериментальным данным — 10–15 км. Выполненные расчеты показали, что длина траектории ледяного КТ при прохождении тела через атмосферу при малых углах входа до момента полной потери его массы даже при радиусе 100 м не превышает 1400 км.

Таким образом, наиболее реалистичной версией, объясняющей Тунгусский феномен, является КТ из железа минимально подверженное фрагментации, двигавшееся с востока на запад, и способное пройти сквозь атмосферу на минимальной высоте 10–16 км при длине траектории около 3000 км. Этим же могут объясняться оптические эффекты, связанные с сильной запыленностью атмосферы над Европой, которые вызвали яркое свечение ночного неба в последующие сутки.

Список литературы

1. Стулов В. П. Аэродинамика болидов / В. П. Стулов, В. Н. Мирский, А. И. Вислый. — М.: Наука. — 1995.
2. Бронштэн В. А. Физика метеорных явлений / В. А. Бронштэн. — М.: Наука. — 1981.
3. Андрущенко В. А. Моделирование падения Челябинского метеорита / В. А. Андрущенко Н. Г. Сызранова, Ю. Д. Шевелев // Компьютерные исследования и моделирование. — 2013. — Т.5, № 6. С. 927 – 940.
4. Nemchinov I. L. Penetration of large meteoroids into the atmosphere: theory and observations / I. L. Nemchinov, O. P. Popova, O. V. Teterev // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. — 2013. — V. 72, 2013. P. 1194–1223.
5. Кутателадзе С. С. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление / С. С Кутателадзе. — М.: Энергоатомиздат. — 1990.
6. <http://files.school-collection.edu.ru/dlrstore/540b006e-c9e3-3851-261c-2fccdd5568a7/1011820A.htm>
7. Барри Н. Г. Модель разлета фрагментов разрушенного метеороида / Н. Г Барри // Вестник Московского Университета, Сер.1, Математика. Механика. — 2005. — №4. С. 56–59.
8. Стулов В.П. Сравнительный анализ моделей дробления метеорных тел / В. П. Стулов, Л. Ю. Титова // Астрономический вестник. — 2001. — Т.35, № 4. С. 345–349.
9. Дудоров А. Е. Движение и разрушение челябинского метеороида в атмосфере / А. Е. Дудоров, А. Е. Майер // Вестник Челябинского госуниверситета. — 2014. — №1. С. 47–57

ОБ ОПТИМАЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ ПИРОЛИЗА В КИНЕТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ⁹

С.Б. Цыбенкова, В.И. Быков, С.Д. Варфоломеев, С.М. Ломакин

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, tsybenova@mail.ru

В настоящее время пиролиз является простым и относительно недорогим способом получения жидкого топлива, которое легко хранится, транспортируется и очищается для получения топлив высокого качества [1–10]. Известно, что пиролиз биомассы и тяжелых фракций нефти обеспечивает получение газообразной, жидкой и твердой фракций, соотношение между которыми зависит от условий пиролиза. Фундаментальное исследование процессов пиролиза биомассы будет способствовать дальнейшему развитию методов получения жидких топлив.

В нашей работе [10] приведена кинетическая модель высокоскоростного пиролиза и показано, что в нестационарном температурном режиме достигается большая производительность по сравнению со стационарным режимом. Ранее нами была создана лабораторная пиролизная установка непрерывного действия со шнековой подачей углесодержащего сырья, в которой быстрый нагрев биомассы осуществляется за счет индукционного нагрева ферромагнитного реактора токами высокой частоты. Как показывает опыт, флеш-пиролизная установка эффективно работает в нестационарном режиме, что согласуется с результатами кинетических исследований [10].

В данной работе сформулирована задача оптимального управления температурным режимом в проточном реакторе идеального вытеснения и показано, что вид оптимальной температуры существенно зависит от соотношений энергий активаций целевых и побочных реакций, а также от структуры основных реакций пиролиза (последовательных, параллельных или последовательно-параллельных схем превращений).

По всей видимости, при оптимизации режима флеш-пиролиза необходимо учитывать химическую природу сырья, которое можно условно разделить на два типа:

- 1) синтетические полимеры с преимущественно последовательной исходной схемой превращений;
- 2) природные биополимеры, для которых исходная схема превращений является параллельной или смешанной.

Кинетическая модель реактора идеального вытеснения, в котором протекают две последовательные реакции



где A_1 – исходное сырье, A_2 – целевой продукт, A_3 – побочный продукт, имеет вид:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = -k_1(T) f_1(c_1), \quad (2)$$

$$\frac{dc_2}{d\tau} = k_1(T) f_1(c_1) - k_2(T) f_2(c_2), \quad (3)$$

⁹ Работа поддержана РФФИ, грант №16-03-00123А (2016–2018 гг).

где c_1, c_2 – концентрации веществ A_1 и A_2 соответственно, τ – время контакта, k_i – константы скоростей реакций:

$$k_i(T) = k_i^0 \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right), \quad i=1,2, \quad (4)$$

k_i^0 – предэкспоненты, E_i – энергии активации. Функции $f_i(c_i)$ задаются в соответствии с кинетическим порядком реакции (1): в простейшем случае для реакции первого порядка $f_i(c_i) = c_i$, $i=1,2$. Кинетическая модель (2), (3) рассматривается при заданных входных данных:

$$c_i(0) = c_i^0, \quad i=1,2, \quad (5)$$

Время контакта τ_k считается также заданным:

$$0 \leq \tau \leq \tau_k. \quad (6)$$

Задача оптимального управления температурой $T(\tau)$ формулируется следующим образом: найти такой режим изменения температуры с ограничениями:

$$T_* \leq T(\tau) \leq T^*, \quad \tau \in [0, \tau_k], \quad (7)$$

при котором достигается максимальный выход целевого продукта:

$$\max_T c_2(\tau_k). \quad (8)$$

Можно показать [15], что решение оптимальной задачи (1)–(8) существенно зависит от соотношения энергий активации реакций (1): $E_1 > E_2$, в этом случае оптимальная температура $T_{\text{опт}}$ может принимать лишь граничные значения T_* или T^* , при любых соотношениях остальных параметров $T_{\text{опт}}$ имеет релейный характер, рис. 1; $E_1 < E_2$: возможный характер $T_{\text{опт}}(\tau)$ показан на рис. 1, где видно, что оптимальная температура имеет падающий характер, криволинейный участок ее изменения может быть найден в результате процедуры, основанной на применении принципа максимума Л.С. Понтрягина [15].

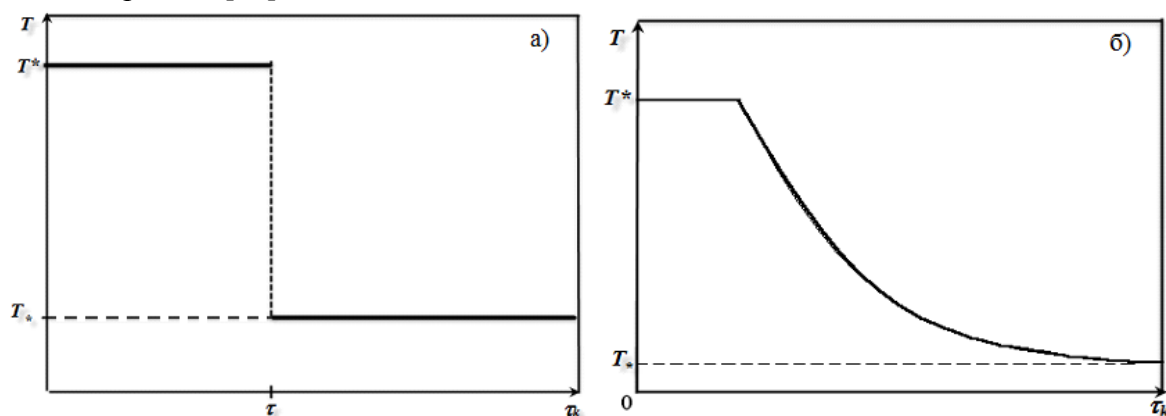


Рис. 1. Структура оптимального температурного профиля для последовательной схемы превращений (1): а) релейный характер $T(\tau)$ при $E_1 > E_2$; б) падающий режим $T(\tau)$ при $E_1 < E_2$.

Для параллельной схемы превращений



кинетическая модель записывается так:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = -k_1(T) f_1(c_1) - k_2(T) f_2(c_1), \quad (10)$$

$$\frac{dc_2}{d\tau} = k_1(T) f_1(c_1). \quad (11)$$

Для кинетической модели (10), (11) задача оптимального управления температурой формулируется как и выше: для заданных начальных условий (5) на отрезке (6) необходимо найти такой профиль $T(\tau)$, который доставляет максимум выхода полезного продукта (8) при ограничениях (7).

Как и для (1), для параллельной схемы превращений (9) оптимальный температурный режим существенно зависит от соотношения энергий активации: если $E_1 > E_2$, то $T_{\text{опт}}(\tau)$ принимает лишь граничные значения T_* , T^* , рис. 2; если $E_1 < E_2$, то оптимальная температура имеет возрастающий характер, рис. 2.

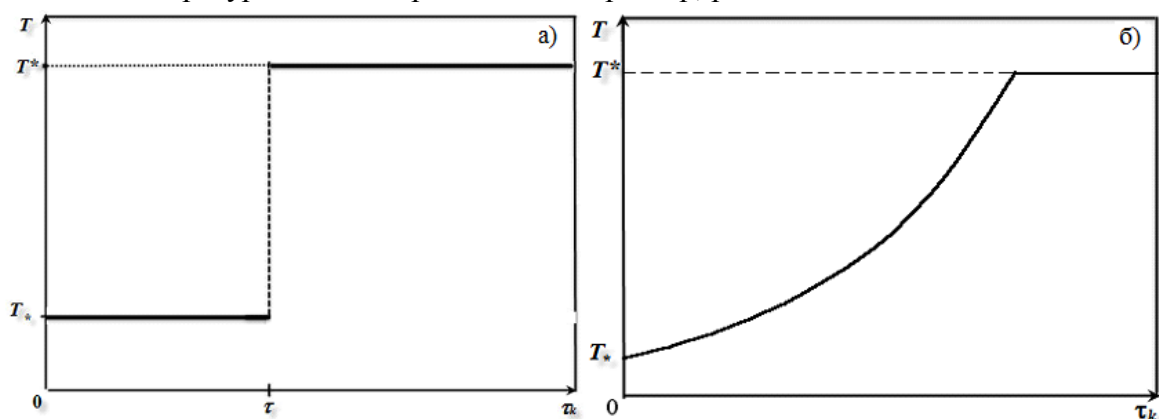


Рис. 2. Структура оптимальной $T(\tau)$ для параллельной схемы (9): а) релейная температура при $E_1 > E_2$; б) возрастающий температурный режим при $E_1 < E_2$.

Схемой, объединяющей (1) и (9), является последовательно-параллельная реакция:



где A_2 – целевой продукт; A_3 , A_4 – побочные продукты. Схеме (12) отвечает кинетическая модель:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = -k_1(T) f_1(c_1) - k_2(T) f_2(c_1), \quad (13)$$

$$\frac{dc_2}{d\tau} = k_1(T) f_1(c_1) - k_3(T) f_3(c_2). \quad (14)$$

Как и выше, для модели (13), (14) может быть поставлена и решена задача оптимального управления температурой $T_{\text{опт}}(\tau)$ при условиях (5)–(8). Можно показать, что и здесь оптимальный режим существенно зависит от соотношения энергий активации E_1, E_2, E_3 . При определенном соотношении этих параметров температура $T_{\text{опт}}(\tau)$ может иметь релейный характер, т.е. может принимать лишь граничные значения T_* , T^* (режим типа: включить – выключить). Кроме того, $T_{\text{опт}}(\tau)$ может содержать падающий и возрастающий участки управления. Реальные профили оптимальной температуры, естественно, зависят от конкретных значений параметров процесса: нижней и верхней предельно допустимых температур T_*, T^* ; времени контакта τ_k ; кинетических параметров k_i^0, E_i ; наблюдаемых скоростей отдельных стадий $f_i(c_i)$; начальных условий c_i^0 и др.

Важным этапом оптимизации режима флеш-пиролиза является выбор для того или иного вида сырья основной схемы превращений – последовательной, параллельной или смешанной. Как показывают результаты нашего исследования, от этого зависит структура нестационарного управления пиролизной установкой – в трубчатом реакторе вытеснения со шнековой подачей биомассы. Необходимо отметить, что химический состав сырья может существенно влиять на схему пиролизических превращений. В среднем состав отходов содержит более 50% биомассы и гораздо меньшее количество синтетических полимеров [14]. Поэтому схема пиролизического превращения таких отходов может быть представлена системой последовательно-параллельных реакций (12). С другой стороны, при пиролизе отходов различных производств химической промышленности, включая кабельную и трубную индустрию, общая схема пиролизических превращений представляет собой систему последовательных реакций.

Таким образом, в работе сформулирована и решена задача оптимального управления температурным режимом пиролиза углеродсодержащего сырья в проточном реакторе идеального вытеснения и показано, что вид оптимального температурного профиля существенно зависит от соотношения энергий активации целевых и побочных реакций, а также от структуры основных реакций пиролиза. Так, для последовательно-параллельной схемы превращений оптимальный температурный профиль содержит участки с падающей и возрастающей температурой. Это позволяет дать верхние предельно возможные оценки производительности реакторов переработки углеродсодержащего сырья.

Список литературы

1. Варфоломеев С.Д. Биотоплива / С.Д. Варфоломеев, Е.Н. Ефременко, Л.П. Крылова // В: Физическая химия биопроцессов. Ред. С.Д. Варфоломеев. – М.: КРАСАНД. – 2014. – С.725–767.
2. Моисеев И.И. Альтернативные источники органических топлив / И.И. Моисеев, С.Д. Варфоломеев, Н.А. Платэ // Вестник РАН. – 2006. – Т.76. – №5. С.427 – 437.

3. Варфоломеев С.Д. Энергоносители из возобновляемого получения сырья. Химические аспекты / С.Д. Варфоломеев, И.И. Моисеев, Б.Ф. Мясоєдов // Вестник РАН. – 2009. – Т.79. – №7. С.595 – 604.
4. Onay O. Influence of pyrolysis temperature and heating rate on the production of bio-oil and char from safflower seed by pyrolysis, using a well-swept fixed-bed reactor / O. Onay // Fuel Processing Technology. – 2007. – V.88. – P.523 – 531.
5. Maher K.D. Pyrolysis of triglyceride materials for the production of renewable fuels and chemicals /K.D. Maher, D.C. Bressler // Bioresource Technology. – 2007. – V.98. – №12. P.2351 – 2368.
6. Bridgwater A.V. Renewable fuels and chemicals by thermal processing of biomass/ A.V. Bridgwater// Chem. Eng. Journal. – 2003. – V.91. – №2–3. P.87 – 102.
7. Bridgwater A.V. A techno-economic comparison of power production by biomass fast pyrolysis with gasification and combustion / Bridgwater A.V., A.J. Toft, J.G. Brammer // Renewable and sustainable energy reviews. – 2001. – V.6. – №3. P.181 – 246.
8. McCall M.J. Fuel and fuel blending components from biomass derived pyrolysis oil/ M.J. McCall, T.A. Brandvold // Patent US 0253948 A1. – 2009. – P.181 – 248.
9. Быков В.И. Кинетические закономерности импульсного пиролиза углеродсодержащего сырья в режиме осциллирующего изменения температуры / В.И. Быков, С.М. Ломакин, С.Б. Цыбенова, С.Д. Варфоломеев // Доклады Академии Наук. – 2015. – Т.462. – №1. С.52 – 54.
10. Basu P. Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction. Second Ed./ P. Basu. – Elsevier, London, 2013. – 550 p.
11. Lomakin S.M. Thermal degradation of biodegradable blends of polyethylene with cellulose and ethylcellulose / S.M. Lomakin, S.Z. Rogovina, A.V. Grachev, E.V. Prut, Ch.V. Alexanyan // Thermochimica Acta. – 2011. – V.521. –№1–2. P.66 – 73.
12. Moldoveanu S.C. Techniques and instrumentation in analytical chemistry / S.C. Moldoveanu. – Elsevier, Amsterdam – Lausanne – New York – Oxford – Shannon – Singapore –Tokyo, 1998. – 509 p.
13. Цейтин К.Ф., Мурашов В.Е., Островкин И.М. Отходы производства и потребления. Экологическая безопасность: учеб. пособие / К.Ф. Цейтин, В.Е. Мурашов, И.М. Островкин. – М.: ГАСИС, 2009. – 408 с.
14. Быков В.И. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов / В.И. Быков, В.М. Журавлев. – РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2011. – 308 с.

АНАЛИЗ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО РАЗНЫМ ОБЛАСТЯМ ЗНАНИЯ, ПОДДЕРЖАННЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Р.А. Чиженкова

Институт биофизики клетки РАН, *chizhenkova@mail.ru*

За последние десятилетия произошла переоценка значимости фундаментальной науки для развития цивилизации, а также политического и экономического благополучия современного общества [4, 5, 8]. Однако, результаты, получаемые при фундаментальных исследованиях, в принципе не могут быть непосредственно внедрены в какие-либо технологии и, следовательно, иметь "самоокупаемость". В связи с этим существует необходимость их экономической поддержки со стороны государства, которая и привела в середине XX столетия к организации соответствующих фондов в ряде стран [4, 6].

Российский Фонд Фундаментальных Исследований (РФФИ) был создан в самом начале становления нашего нового государства - в 1992 г. [1, 2]. Материалы относительно 20-летнего юбилея РФФИ отражены в специальном выпуске журнала "Вестник РФФИ" [3]. Но оказалось, что за все эти годы так и не был выполнен подробный анализ научных направлений проектов, поддержанных Фондом, что и послужило стимулом проведения наших соответствующих библиометрических исследований [9, 11-13].

Настоящая работа посвящена библиометрическому анализу научных направлений издательских научных проектов, поддержанных РФФИ за 20-летний период его деятельности, что полностью отсутствует в открытых публикациях.

Материалы и методы

Представленные здесь сведения основываются на материалах, опубликованных в Информационных бюллетенях (ИБ) РФФИ, выходящих раз в год и освещающих итоги прошедшего конкурса, которые позволяют определять количественные особенности последнего по разным областям знания.

Для каждого года составлялась обширная таблица с учетом данных по разным областям знания относительно чисел выделенных грантов и поданных заявок. На основе этого вычислялась процентная вероятность поддержки проектов. Затем проводили объединение результатов по анализируемым рубрикам за весь временной период и вычисляли статистическую значимость различия величин, принадлежавших к разным рубрикам. Для статистического анализа использовали сравнение двух выборочных долей вариант.

Результаты и обсуждение

Издательские проекты самостоятельно рассматривались в РФФИ с 1995 г. В 1993 и 1994 гг. они представляли единую рубрику совместно с инициативными проектами. На основании официальных сведений, приводимых в ИБ РФФИ, мы попытались выделить поддержанные издательские проекты из общего перечня грантов и в эти годы. За период с 1993 по 2012 гг. РФФИ в целом оказало финансовую поддержку 4605 издательским проектам. Однако поскольку задача данной работы заключалась в анализе научных направлений поддержанных издательских проектов, пришлось временной период материала ограничить 1995-2012 гг., в течение которого был поддержан 4521 проект.

Научные проекты имели отношение к следующим областям знания: (1) "Математика, информатика, механика"; (2) "Физика и астрономия"; (3) "Химия и науки о материалах"; (4) "Биология и медицинская наука"; (5) "Науки о Земле"; (6) "Науки о человеке и обществе"; (7) "Информационные технологии и вычислительные системы"; (8) "Фундаментальные основы инженерных наук". Табл. 1 представляет количественные характеристики поддержанных издательских проектов по указанным областям знания.

Таблица 1

Сравнение чисел поддержанных издательских проектов по представленным областям знания со средним значением по общему массиву

Области знания	Число грантов	% от суммы (4521)	Критерий U. Сравнение со средним
Математика, информатика, механика	1085	24.00	<u>14.31</u>
Физика и астрономия	566	12.52	0.05
Химия и науки о материалах	305	6.75	<u>9.37</u>
Биология и медицинская наука	739	16.35	<u>5.18</u>
Науки о Земле	850	18.80	<u>8.27</u>
Науки о человеке и обществе	630	13.94	2.00
Информационные технологии и вычислительные системы	113	2.50	<u>19.26</u>
Фундаментальные основы инженерных наук	233	5.15	<u>12.60</u>
Итого	4521	100	
Среднее	565.13	12.50	

Примечание: Статистически достоверные значения подчеркнуты ($U > 2.58$ соответствует $p < 0.01$).

Табл.1 демонстрирует, что имело место явное преобладание числа поддержанных проектов по области знания: "Математика, информатика, механика" (24.00% от общего числа). Второе место занимало число проектов по области знания "Науки о Земле" (18.80% от общего числа). Третье место отмечалось у числа проектов по области знания "Биология и медицинская наука" (16.35% от общего числа). Весьма низкие числа были у проектов по областям знания "Химия и науки о материалах" (6.75% от общего числа), "Фундаментальные основы инженерных наук" (5.15% от общего числа) и "Информационные технологии и вычислительные системы" (2.50% от общего числа).

Оценка полученных результатов относительно финансовой поддержки РФФИ издательских научных проектов по разным областям знания возможна только при выяснении ее вероятности при подаче соответствующих заявок.

К сожалению, числа поданных заявок по издательским проектам с указанием областей знания в ИБ приведены только с 2002 г. Общее число поданных заявок по издательским проектам за данный 11-летний период составляло 5768. Количественные характеристики поданных заявок по разным областям знания за этот временной период приведены в табл. 2.

Таблица 2

Сравнение чисел заявок издательских проектов по представленным областям знания со средним значением по общему массиву

Области знания	Число заявок	% от суммы (5768)	Критерий U. Сравнение со средним
Математика, информатика, механика	1261	21.86	<u>13.43</u>
Физика и астрономия	612	10.61	<u>3.22</u>
Химия и науки о материалах	305	5.29	<u>13.86</u>
Биология и медицинская наука	954	16.54	<u>6.18</u>
Науки о Земле	978	16.96	<u>6.77</u>
Науки о человеке и обществе	1095	18.98	<u>9.61</u>
Информационные технологии и вычислительные системы	186	3.22	<u>19.44</u>
Фундаментальные основы инженерных наук	377	6.54	<u>11.06</u>
Итого	5768	100	
Среднее	721	12.50	

Примечание: как у табл. 1.

Несмотря на различие рассматриваемых аспектов, а также в некоторой мере и временных периодов, дизайны табл. 1 и 2 оказались весьма сходными. Наблюдалось четкое преобладание поданных проектов по области знания: "Математика, информатика, механика" (21.86% от общего числа). Тем не менее, имели место некоторые различия, а именно число заявок по области знания "Науки о человеке и обществе" занимали второе место (18.98% от общего числа).

Наличие сведений по количественным аспектам выделенных грантов и поданных заявок позволило перейти к конкретному рассмотрению процентного числа поддержанных проектов, что, конечно, было возможно только для временного периода

2002-2012 гг., в течение которого было выделено 2732 гранта. Полученные сведения демонстрируются в табл. 3.

Таблица 3

Сравнение долей поддержанных издательских проектов по представленным областям знания со средним значением по общему массиву

Область знания	Число заявок	Число грантов	% поддержанных	Критерий У. Сравнение со средним
Математика, информатика, механика	1261	594	47.11	0.19
Физика и астрономия	612	339	55.39	<u>3.76</u>
Химия и науки о материалах	305	195	63.93	<u>5.70</u>
Биология и медицинская наука	954	435	45.60	1.03
Науки о Земле	978	513	52.45	<u>2.95</u>
Науки о человеке и обществе	1095	324	29.59	<u>11.16</u>
Информационные технологии и вычислительные системы	186	99	53.23	1.56
Фундаментальные основы инженерных наук	377	233	61.80	<u>5.46</u>
Итого	5768	2732	47.37	

Примечание: как у табл. 1.

Дизайн табл. 3 принципиально отличается от таковых табл. 1 и 2. Хотя и отмечались некоторые статистически значимые различия процентных чисел поддержанных проектов по разным областям знания, тем не менее, имела место их относительная близость. Диапазон колебаний этих величин (от 29.59% до 63.93%, т.е. в 2.16 раз) был значительно ниже, чем у чисел грантов и поданных заявок (соответственно в 9.60 раз и 6.79 раз). Кроме того, обращает на себя внимание самый низкий процент поддержанных проектов по области знания "Науки о человеке и обществе", число заявок которых приближалось к максимальному значению (табл 2).

Таким образом, в течение 20-летнего периода РФФИ оказал существенную поддержку издательским проектам, т.е. публикации результатов проводимых фундаментальных исследований. Число поддержанных издательских проектов было значительно ниже (в 12.74 раза), чем исследовательских (4605 по сравнению с 58667 [13]), что вполне логично, но их финансирование осуществлялось также регулярно.

Заключение

РФФИ представляет государственное мероприятие для финансовой поддержки фундаментальной науки, что крайне необходимо в современном обществе [7]. Посред-

ством РФФИ была создана некоторая помощь не только в проведении самих исследований, но также в публикации их результатов. Отмечается некоторое различие количественных характеристик результатов конкурсов инициативных и издательских проектов относительно их структуры по областям знания. Основной их причиной могут служить особенности организации работы по областям знания в указанных конкурсах. В частности, чтобы проводить экспериментальные исследования требуются непосредственные финансовые вложения. Публикации же полученных результатов могут появляться спустя годы и даже десятилетия.

Список литературы

1. Алфимов М.В. История создания Фонда // Вестник РФФИ 20 лет: Специальный выпуск. - 2012. - С. 10-15.
2. Алфимов М.В., Минин В.А., Либкинд А.Н. Страна наука - РФФИ // Вестник РФФИ. - 2000. - № 2(20). - С. 5-29.
3. Вестник РФФИ 20 лет: Специальный выпуск. - 2012.
4. Коннов В.И. Самоуправление на "передовой": становление национального научного фонда США // Вестник РФФИ. - 2007. - №4(54). - С. 10-15.
5. Лебедев С.А. Праксиология науки // Вопросы философии. - 2012. - №4. - С. 52-63.
6. Обама Б. Выступление в Национальной академии наук 27-ого апреля 2009 г. // В защиту науки. Бюл. № 6 / Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2009. - С. 185-198.
7. Путин В.В. Выступление на Общем собрании Российской академии наук 22 мая 2012 // В защиту науки. Бюл. № 11 / Ред. Э.П. Кругляков. - М.: Наука, 2012. - С. 7-14.
8. Чиженкова Р.А. Наука в современном мире // Актуальные проблемы социальной философии / ред. Э.В. Гирусов. - М., 1998. - С. 111-112.
9. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ научных проектов, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований (итог 15 лет) // Фундаментальные исследования. - 2010. - №1. - С. 100-106.
10. Чиженкова Р.А. Динамика нейрофизиологических исследований действия неионизирующей радиации во второй половине XX-ого века. - М.: Издат. дом Акад. Естествознания, 2012. - 88 с.
11. Чиженкова Р.А. Общий библиометрический анализ научных проектов, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований в последнее десятилетие // В: Альманах научных открытий. Материалы научных трудов. / Ред. Н.Н.Ильинских. - Томск, 2013. - Т. 2. - № 1. - С. 158-159.
12. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ научных проектов, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет: виды конкурсов // Успехи современного естествознания. - 2014. - № 5. - С. 145-149
13. Чиженкова Р.А. Российский фонд фундаментальных исследований. Библиометрический анализ поддержки научных проектов. - Germany: Palmarium Academic Publishing, 2015. - 88 с.
14. Чиженкова Р.А., Сафрошкина А.А., Слащева Н.А., Чернухин В.Ю. Библиометрический анализ нейрофизиологических аспектов действия неионизирующей радиации // Успехи современной биологии. - 2004. - Т. 124. - № 5. - С. 472-479.
15. Chizhenkova R.A. Bibliometrical review of neurophysiological investigation of action of non-ionized radiation in second half of the XXth century // Biophysics. - 2005. - Supplement. - № 1(50). - P. 163-172.

ВОЗДЕЙСТВИЕ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ СОПРОТИВЛЕНИЯ НА ТЕЧЕНИЕ ЖИДКОСТИ В ЗАЗОРЕ МЕЖДУ ВРАЩАЮЩИМИСЯ ЦИЛИНДРАМИ

О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль, И.А. Концевой

Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого», *shablovsky-on@yandex.ru*

Введение. Для вязкой несжимаемой жидкости в полярных координатах (r, φ) рассмотрим следующий класс стационарных цилиндрических течений:

$$\begin{aligned}v_r &\equiv 0, \quad v_\varphi = v(r), \quad p = p(r), \\F_r &\equiv 0, \quad F_\varphi = F_\varphi(v^2, r), \quad \mu, \rho = \text{const}, \\ \tau_{rr} &\equiv 0, \quad \tau_{\varphi\varphi} \equiv 0, \quad \tau_{r\varphi} = \mu \left(\frac{dv}{dr} - \frac{v}{r} \right).\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{v}(v_r, v_\varphi)$ – вектор скорости, ρ – плотность; $\mathbf{F}(F_r, F_\varphi)$ – вектор массовой силы; τ_{rr} , $\tau_{\varphi\varphi}$, $\tau_{r\varphi} = \tau_{\varphi r}$ – компоненты девиатора тензора напряжений; μ – коэффициент динамической вязкости.

Задача о течении вязкой жидкости между двумя коаксиальными вращающимися цилиндрами относится к классическим проблемам гидродинамики. Прикладные аспекты данного вопроса связаны с гидродинамической теорией смазки, с формированием вихревых структур в природных и технических гидродинамических системах. Известно, что цилиндрическое течение Куэтта описывается точным решением стационарных уравнений Навье-Стокса и определяет ламинарное движение ньютоновской жидкости, возникающее при относительном вращении двух цилиндров. Фундаментальные исследования задачи о течении между цилиндрами связаны со следующими проблемами: гидродинамическая устойчивость/неустойчивость движения жидкости и начало турбулизации течения; изучение природы установления профиля скорости в зазоре между цилиндрами. Современное состояние этих исследований и библиография представлены в книгах [1, 2]. В данной работе рассматривается неклассический вариант задачи о течении жидкости между соосными вращающимися цилиндрами. А именно: учитывается рэлеевская сила сопротивления $\mathbf{F} \equiv \mathbf{F}^R = -\zeta \mathbf{v}$, где $\zeta > 0$ – коэффициент «внешнего» трения. Такая физическая модель означает [3], что влияние стенок и ламинарного пограничного слоя сводится к эффективному затормаживанию движения жидкости. Уравнения гидродинамики с рэлеевским трением применялись в [3, 4] для теоретического изучения и лабораторного моделирования периодических течений в тонких слоях жидкости, а также для анализа крупномасштабных физических явлений в океане и атмосферах вращающихся планет. Обычно в теоретических расчётах используется линейный вариант силы трения: $\zeta = \text{const}$. В рамках приближения $\zeta \sim |\mathbf{v}|$ в [3] построены гидродинамические системы, описывающие каскадный процесс преобразования энергии в турбулентном потоке. В данной работе изучено новое точное решение уравнений гидродинамики для случая, когда коэффициент сопротивления монотонно растёт при увеличении $|\mathbf{v}|$ и является чётной функцией скорости: $\zeta = \zeta(v^2, r)$, $\partial\zeta/\partial(v^2) > 0$. Несколько новых аналитических решений стационарных уравнений гидродинамики вязкой жидкости с учётом нелинейной внешней силы сопротивления течению построены и изучены в [5].

Настоящая работа имеет своей целью: 1) дать новое точное решение, определяющее цилиндрическое течение вязкой жидкости, испытывающей нелинейное воздей-

ствие внешнего сопротивления; 2) изучить динамические свойства завихренности потока.

Точное решение. В классе решений (1) уравнения Навье-Стокса имеют вид

$$\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dr} = \frac{v^2}{r}, \quad (2)$$

$$\frac{d^2 v}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dv}{dr} = \frac{v}{r^2} - \frac{F_\phi}{v}, \quad (3)$$

$$v = \mu / \rho; \quad F_\phi = -\zeta v, \quad \zeta = \zeta(v^2, r).$$

Очевидно, что уравнение неразрывности выполняется тождественно. Давление $p(r)$ подсчитывается автономно от уравнения (3). Применяя логарифмическую координату $\alpha \equiv \bar{R} / 2 = \ln(r/r_0)$, запишем уравнения (2)–(3) в следующей форме:

$$dp / d\alpha = \rho v^2, \quad (4)$$

$$d^2 v / d\alpha^2 = v[1 + (r^2 \zeta / v)]. \quad (5)$$

Далее будем работать с безразмерными величинами, обозначая их чертой сверху: $\bar{v} = v / v_1$, $\bar{r} = r / r_0$, где r_0 , v_1 – положительные постоянные, имеющие размерность длины и скорости соответственно.

Для коэффициента сопротивления возьмём частную зависимость следующего вида:

$$\bar{\zeta} \equiv r_0^2 \zeta / v = (1 + 2\bar{v}^2) / \bar{r}^2, \quad (6)$$

и тогда из (5) получаем

$$d^2 \bar{v} / d\alpha^2 = 2\bar{v}(1 + \bar{v}^2).$$

Применяя к этому уравнению математические результаты работы [6], находим точное решение, определяющее скорость и давление жидкости:

$$\bar{v} = \frac{\sin \bar{R}}{1 + \cos \bar{R}}, \quad \bar{p} \equiv \frac{(p - p_0)}{\rho v_1^2} = \bar{v} - \frac{\bar{R}}{2}, \quad \bar{r} \neq \exp(\pi/2). \quad (7)$$

Для функции (6) явная зависимость от радиальной координаты характеризует структурную неоднородность, присущую внешней силе сопротивления. Динамические свойства коэффициента сопротивления определяются неравенством $\partial \bar{\zeta} / \partial (\bar{v}^2) > 0$. Условие $p > 0$ обеспечивается подходящим выбором константы $p_0 > 0$. Данное решение справедливо на конечном отрезке r и определяет течение между двумя непроницаемыми коаксиальными цилиндрами. На обеих граничных окружностях выполнено условие прилипания.

Возможны следующие три варианта, рис. 1. Вариант 1: $r \in [r_0, r_1]$, $0 < r_0 < r_1$. Вариант 2: $r \in [r_2, r_0]$, $0 < r_2 < r_0$. Вариант 3: $r \in [r_2, r_1]$, $0 < r_2 < r_0 < r_1$. Для варианта 1 имеем: внутренний цилиндр $r = r_0$ неподвижен, $v_\phi(r = r_0) = 0$, а внешний цилиндр $r = r_1$ вращается с постоянной угловой скоростью $\omega_1 = v_\phi(r = r_1) / r_1$. Для варианта 2 имеем: внешний цилиндр $r = r_0$ неподвижен, $v_\phi(r = r_0) = 0$, а внутренний цилиндр $r = r_2$ вращается с постоянной угловой скоростью $\omega_2 = v_\phi(r = r_2) / r_2$. Вариант 3 является объединением вариантов 1 и 2: внутренний ($r = r_2$) и внешний ($r = r_1$) цилиндры вращаются вокруг их общей оси; на линии $r = r_0$ жидкость неподвижна. Ясно, что при $r = r_0$ функция $p = p(r)$ имеет перегиб: $r = r_0$, $\bar{R} = 0$, $v = 0$, $dp/dr = 0$, $d^2 p / dr^2 = 0$, $d^3 p / dr^3 \neq 0$.

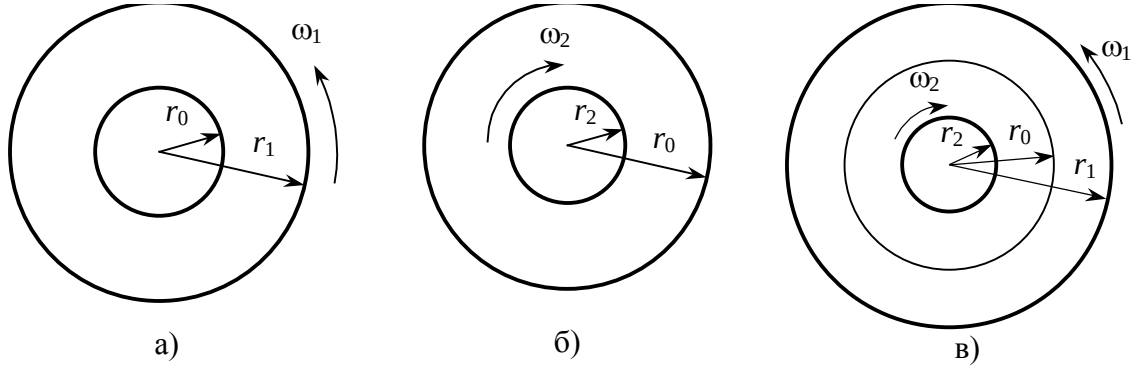


Рис. 1. Схема расположения подвижного и неподвижного цилиндров для трех вариантов течения: части а, б, в соответствуют вариантам 1, 2, 3.

Вихрь скорости $\omega(\omega_r, \omega_\phi, \omega_z)$ имеет только одну компоненту:

$$\omega_r \equiv 0, \quad \omega_\phi \equiv 0, \quad \omega_z = [v_\phi + r(dv_\phi/dr)]/(2r),$$

где z – координата, отсчитываемая вдоль оси цилиндра. В результате вычислений получаем

$$\bar{\omega} \equiv \omega_z r_0 / v_1 = [1 + \bar{p} + (\bar{R}/2) + (\bar{p} + (\bar{R}/2))^2]/(2\bar{r}).$$

Зависимость (7) показывает, что для всех представленных здесь вариантов отсутствуют точки с нулевой завихренностью: $\bar{\omega}(\bar{R}, \bar{p}) \neq 0$. Безразмерные градиент давления и вязкое касательное напряжение вычисляются по формулам:

$$\bar{\pi} \equiv \frac{d\bar{p}}{d\bar{r}} = \frac{(\bar{v})^2}{\bar{r}}, \quad \bar{\tau}_{r\phi} \equiv \frac{\tau_{r\phi}}{\rho v_1^2} = \frac{\bar{v}}{\bar{r}} \left(2 \frac{d\bar{v}}{d\bar{R}} - \bar{v} \right), \quad \bar{v} = \frac{\mu}{\rho v_1 r_0}, \quad \frac{d\bar{v}}{d\bar{R}} = \frac{1}{1 + \cos \bar{R}}.$$

Величина $1/\bar{v}$ есть число Рейнольдса; при проведении вычислений оно принято для определённости равным единице. В данном классе решений нет ограничений на выбор числа Рейнольдса.

Результаты расчётов. Известно, что безразмерное число Тейлора Ta и функция Рэлея $R_s = d(v_r r)^2/dr$ позволяют анализировать условия стабилизации профиля скорости в зазоре между цилиндрами. Обсуждение этого вопроса и библиография проблемы приведены в [1]. Для качественного и количественного описания свойств неклассического течения (7) здесь применяются два способа подсчёта числа Тейлора. Число Ta_1 строим на основе функции завихренности $\bar{\omega} = \bar{\omega}(\bar{r})$:

$$Ta_1 = \frac{d}{d\bar{r}} [(\bar{\omega} \bar{r}^2)^2] / \left[\bar{r}^5 \left(\frac{d\bar{\omega}}{d\bar{r}} \right)^2 \right].$$

Число Ta_2 строим на основе угловой скорости $\Omega = \bar{v}/\bar{r}$:

$$Ta_2 = \frac{d}{d\bar{r}} [(\Omega \bar{r}^2)^2] / \left[\bar{r}^5 \left(\frac{d\Omega}{d\bar{r}} \right)^2 \right].$$

Функция Рэлея имеет вид

$$R_s = \frac{d}{d\bar{r}} [(\bar{v} \bar{r})^2].$$

Ещё одним важным источником информации является зависимость момента $\bar{M}_1$ вязких сил и момента $\bar{M}_2$ сил сопротивления от радиальной координаты. Для подсчёта этих величин получены следующие формулы:

$$\bar{M}_1 = 2\pi \bar{\tau}_{r\phi} \bar{r}^2, \quad \bar{M}_2 = -\pi \bar{v} \bar{\zeta} \bar{v} \bar{r}^3.$$

Приведём здесь некоторые результаты расчётов. На рис. 2 для варианта 3 (см. рис. 1в) показаны зависимости завихренности $\bar{\omega}$, угловой скорости Ω и суммарного

момента $\bar{M} = \bar{M}_1 + \bar{M}_2$ от радиальной координаты $\bar{r}$; тёмным кружком отмечена линия торможения $\bar{r} = 1$. Хорошо видно, что перемена знака функции $\bar{M}(\bar{r})$ происходит на конечном удалении от окружности $r = r_0$.

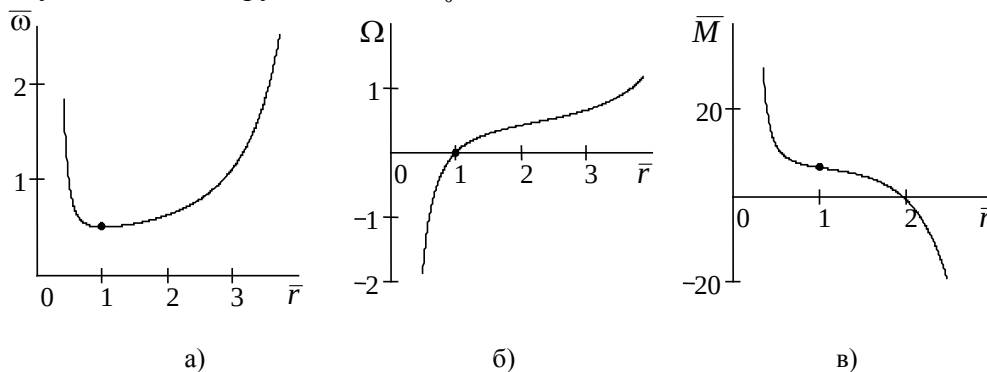


Рис. 2. Течение в зазоре между двумя вращающимися цилиндрами:
а) завихренность; б) угловая скорость;
в) суммарный момент вязких сил и сил сопротивления.

Графическая информация, представленная на рис. 3 и 4, позволяет сопоставить друг с другом свойства течений для вариантов 1 и 2 соответственно. Из рассмотрения рис. 3а, 4а следует, что различаются знаки функции Рэлея $\bar{R}_s(\bar{r})$ и знаки моментов $\bar{M}_2(\bar{r})$ сил сопротивления. Знаки моментов $\bar{M}_1(\bar{r})$ вязких сил одинаковые: по мере удаления от неподвижного цилиндра $\bar{r} = 1$ момент $\bar{M}_1(\bar{r})$ возрастает. На рис. 3б, 4б показаны зависимости числа Тейлора Ta_1 от градиента давления $\bar{\pi}$, от завихренности $\bar{\omega}$ и от вязкого касательного напряжения $\bar{\tau}_{r\varphi}$. Для обоих вариантов функциональные связи $Ta_1(\bar{\pi})$ и $Ta_1(\bar{\omega})$ одинаковые в качественном отношении. Принципиальное различие между течениями с подвижным внешним (рис. 3б) и подвижным внутренним (рис. 4б) цилиндрами состоит в том, что для варианта 1 зависимость $Ta_1(\bar{\tau}_{r\varphi})$ неоднозначная: одному значению вязкого касательного напряжения соответствуют два значения критерия Ta_1 . Аналогичная неоднозначность наблюдается для зависимости $Ta_2(\bar{\tau}_{r\varphi})$, см. рис. 3в. Для варианта 1 каждая из функций $Ta_2(\bar{\pi})$ и $Ta_2(\bar{\omega})$ – немонотонная, имеет отчётливо выраженный максимум, см. рис. 3в. Вместе с тем для варианта 2 функции $Ta_2(\bar{\omega})$, $Ta_2(\bar{\tau}_{r\varphi})$ и $Ta_2(\bar{\pi})$ имеют по два экстремума – один минимум и один максимум, рис. 4в. Здесь максимум функции $Ta_2(\bar{\pi})$ не показан – соответствующая точка находится вне интервала, представленного на рис. 4в.

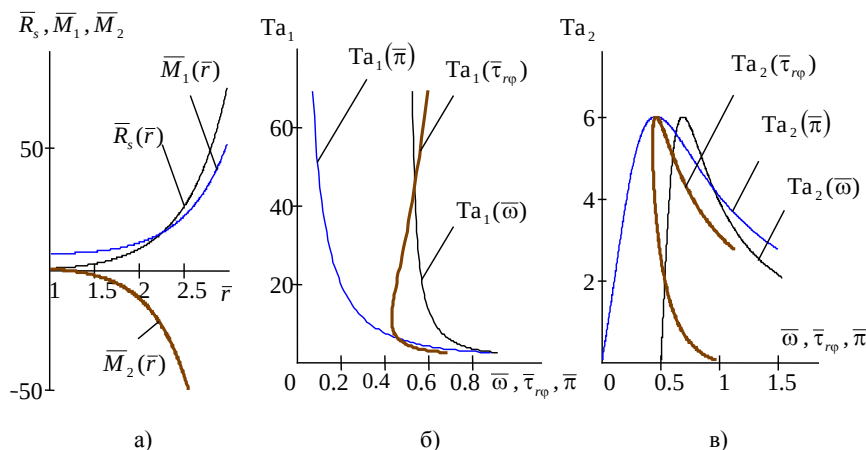


Рис. 3. Свойства течения для варианта 1: неподвижен внутренний цилиндр.

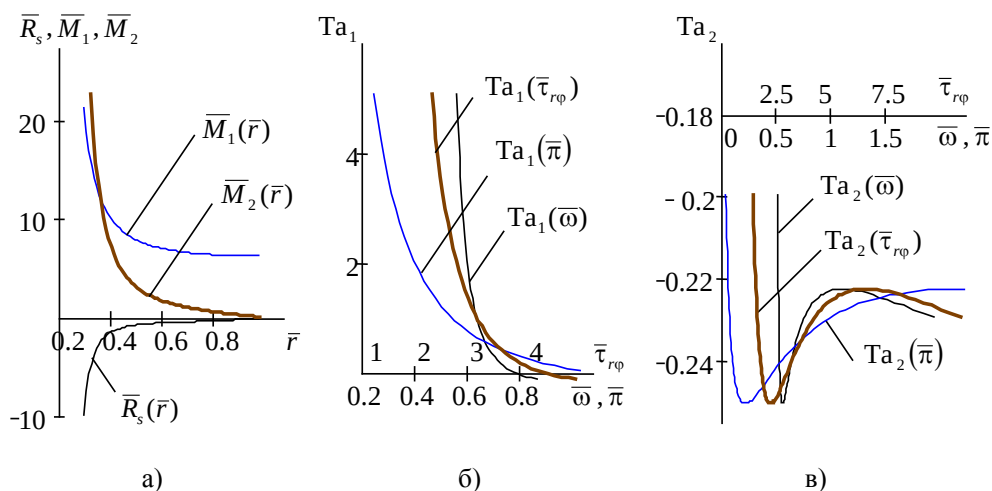


Рис. 4. Свойства течения для варианта 2: неподвижен внешний цилиндр.

Закключение. Дано новое точное аналитическое решение (7), определяющее стационарное течение вязкой жидкости между двумя коаксиальными цилиндрами. Центральным пунктом применяемой гидродинамической модели является внешняя сила трения Рэлея. Рассмотрен изотермический режим движения жидкости. Проведены числовые расчеты и представлены варианты течения, относящиеся к подвижно-неподвижному внешнему и внутреннему цилиндрам. Установлены функциональные связи числа Тейлора с градиентом давления, с вязким касательным напряжением и с завихренностью течения.

Список литературы

1. Белоцерковский О.М. Турбулентность: новые подходы / О.М. Белоцерковский, А.М. Опарин, В.М. Чечеткин. – М.: Наука, 2003. – 286 с.
2. Дразин Ф. Введение в теорию гидродинамической устойчивости / Ф. Дразин. – М.: Физматлит, 2005. – 288 с.
3. Гледзер Е.Б. Системы гидродинамического типа и их применение / Е.Б. Гледзер, Ф.В. Должанский, А.М. Обухов. – М.: Наука, 1981. – 386 с.
4. Должанский Ф.В. О механических прообразах фундаментальных гидродинамических инвариантов и медленных многообразий / Ф.В. Должанский // Успехи физических наук. – 2005. – Т.175. – №12. – С.1257–1288.
5. Шабловский О.Н. Тригонометрический профиль скорости сдвигового течения вязкой жидкости / О.Н. Шабловский // Вестник Южно-Уральского гос. ун-та. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 5. – №32 (249). – С. 77–82.
6. Шабловский О.Н. Нелинейные волновые уравнения и конкуренция источников энергии в двухкомпонентных системах / О.Н. Шабловский // Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем: сб. науч. трудов. – М.: Янус-К. – 2010. – Вып. 13. – С. 78–89.

РАЗРАБОТКА ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ ТЕХНОЛОГИИ УПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ СЛОЖНОЙ ИСКУССТВЕННОЙ ИММУННОЙ СИСТЕМЫ ТЕРАПИИ ЛЕКАРСТВЕННЫМИ СРЕДСТВАМИ

Ширяева О.И., Денисова Т.Г.

Институт информационных и вычислительных технологий КН МОН РК,
oshiryayeva@gmail.com, elkaz41@mail.ru

Введение. В настоящее время существует широкий круг работ в области медицины, касающихся развития методов вычислительных и информационных технологий для получения результатов по обработке данных для диагностики и лечения болезней пациентов. В связи с тем, что задачи, связанные с вопросами медицины имеют высокую сложность и неопределенность, используются такие методы интеллектуальных систем, как нечеткая логика, искусственные нейронные сети и генетические алгоритмы.

Данные методы применены для получения результатов синтеза искусственной иммунной системы, использующейся в настоящее время для решения задач, не только связанных с протеканием иммунных процессов организма, а также для приложения к информационным и техническим задачам [1].

При анализе и синтезе иммунных систем возникает проблема параметрической неопределенности, для решения которой использована методология нечетких систем управления [2]. Однако, исходные данные для нее являются субъективными и не всегда отражают поведение реальной системы. Для решения данной задачи используется нечеткая многослойная нейронная сеть, в которой слои выполняют функции элементов системы нечеткого вывода [3].

Цель доклада заключается в разработке структуры интеллектуальной сложной системы для искусственной иммунной системы терапии такими лекарственными средствами, как сульфаниламиды, на основе нечетких нейронных сетей.

Нечеткая нейронная сеть для сложной искусственной иммунной системы.

За последние годы использование сульфаниламидов в клинической практике значительно снизилось, поскольку по активности они значительно уступают современным антибиотикам и обладают высокой токсичностью. Существенным является и то, что в связи с многолетним использованием сульфаниламидов большинство микроорганизмов выработало к ним резистентность. Однако для лечения некоторых болезней, антибиотики противопоказаны. В соответствии с этим, рассматривается такое заболевание, как хронический пиелонефрит, при котором используются сульфаниламидные препараты.

В ходе построения модели сложной иммунной системы терапии пиелонефрита [4], были сформированы переменные L , как количественное представление ресурсов организма (переменная связана с симптомами хронического пиелонефрита в зависимости от количества лейкоцитов, активных лейкоцитов, СОЭ); P – изменение количества микроорганизмов при пиелонефрите в зависимости от времени (связана с бактериурией и присутствием микроорганизмов); C – изменение количества обнаруженных микроорганизмов и угнетение, за счет сульфаниламидов, у микробов фермента, синтезирующего фолиевую кислоту, которая является для микроорганизмов фактором роста и размножения.

В этом случае математическая модель терапии пиелонефрита описывается дискретными уравнениями ИИС, связывающей динамики изменения $L(k)$, $P(k)$, $C(k)$ [4]:

$$\begin{cases} L(k+1) = (-\gamma - fP(k) - gC(k))L(k)T + L(k) \\ P(k+1) = (-\beta + \lambda(1/L(k)) - \rho C(k))P(k)T + P(k) \\ C(k+1) = (-\alpha + \eta P(k))C(k)T + C(k) + u(k) \end{cases} \quad (1)$$

где γ – темп естественного прироста ресурсов организма;

f – количество ресурсов для микроорганизма;

g – количество ресурсов организма для реакции на сульфаниламиды, оценивает побочное влияние препарата;

β – темп изменения количества микроорганизмов при отсутствии ресурсов организма; $-\beta + \lambda$ – каскадный рост количества микроорганизмов за счет ресурсов;

ρ – коэффициент обнаружения микроорганизма;

α – коэффициент, связанный с длительностью выведения из организма сульфаниламидов;

η – терапевтическая доза сульфаниламидов, с учетом длительности выведения их из организма;

$u(k)$ – управляющее воздействие;

k – дискретное время.

Одна из составляющих модели (1) – описание динамики процесса влияния сульфаниламидов на организм. Существующие сульфаниламидные средства различаются по фармакологическим параметрам [2]. В зависимости от таких свойств, как всасываемость из желудочно-кишечного тракта (ЖКТ) и длительность выведения из организма сульфаниламиды можно разделить на 4 группы, при этом показателем скорости выведения служит величина $T50\%$, или $T1/2$ – период полувыведения, то есть время снижения максимальной концентрации в крови в 2 раза: сульфаниламиды с хорошей всасываемостью – кратковременного действия; средней длительности действия; длительного действия; сверхдлительного действия; сульфаниламиды с плохой всасываемостью – сульфаниламиды, плохо всасывающиеся из желудочно-кишечного тракта и медленно выделяющиеся из организма.

В соответствии с выделенными группами, сформированы нечёткие параметры, связанные с длительностью выведения из организма сульфаниламидов, и терапевтическими дозами сульфаниламидов, с учетом длительности выведения их из организма. Функции принадлежности обозначены следующим образом:

– **свойства сульфаниламидов:**

$\mu(x_1)$ – функция принадлежности длительности выведения из организма сульфаниламидов с нечёткими термами:

x_{11} – кратковременного действия;

x_{12} – средней длительности действия;

x_{13} – длительного действия;

x_{14} – сверхдлительного действия;

x_{15} – сульфаниламиды, плохо всасывающиеся из желудочно-кишечного тракта и медленно выделяющиеся из организма.

$\mu(x_2)$ – функция принадлежности ацетилирования сульфаниламидов:

x_{21} – быстрые ацетиляторы (ацетилирование сульфадимезина составляет более 50%);

x_{22} – медленные ацетиляторы;

– лабораторные показатели пиелонефрита:

$\mu(x_3)$ – функция принадлежности фаз хронического пиелонефрита в зависимости от количества лейкоцитов с нечёткими термами:

x_{31} – фаза активного воспалительного процесса;

x_{32} – фаза латентного воспалительного процесса;

x_{33} – фаза ремиссии, или клинического выздоровления;

$\mu(x_4)$ – функция принадлежности фаз хронического пиелонефрита в зависимости от количества микроорганизмов: x_{41}, x_{42}, x_{43} ;

$\mu(x_5)$ – функция принадлежности фаз хронического пиелонефрита в зависимости от количества активных лейкоцитов: x_{51}, x_{52}, x_{53} ;

$\mu(x_6)$ – функция принадлежности фаз хронического пиелонефрита в зависимости от СОЭ с нечёткими термами x_{61}, x_{62}, x_{63} .

Для искусственной иммунной системы разработана нечеткая многослойная нейронная сеть, в которой слои выполняют функции элементов системы нечеткого вывода (рис. 1). Нейроны данной сети характеризуется набором параметров, настройка которых производится в процессе обучения, как у обычных нейронных сетей.

На рисунке 1 показана разработанная четырёхслойная нечеткая нейронная сеть, реализующая нелинейную зависимость:

$$u = \frac{\sum_{r=1}^6 \omega_r \alpha_r}{\sum_{r=1}^6 \alpha_r}, \quad (1)$$

где ω – весовые коэффициенты;

α – произведение соответствующих функций нечетких множеств $\mu(x)$.

Слой 1 осуществляет процедуру фазификации. Функции принадлежности $\mu(x)$ соответствуют посылкам нечетких правил, а настраиваемыми параметрами этого слоя являются параметры функций принадлежности. Слой 2 рассматриваемой сети осуществляет вычисление результирующих функций принадлежности предпосылок нечетких правил. В данном случае этот слой не имеет настраиваемых параметров. Слой 3, состоящий из двух нейронов, осуществляет суммирование и взвешенное суммирование выходных сигналов слоя 2. Параметрами данного слоя являются весовые коэффициенты ω .

Слой 4 реализует операцию деления:

$$u = \frac{f_1}{f_2}, \quad (2)$$

и не содержит настраиваемых параметров.

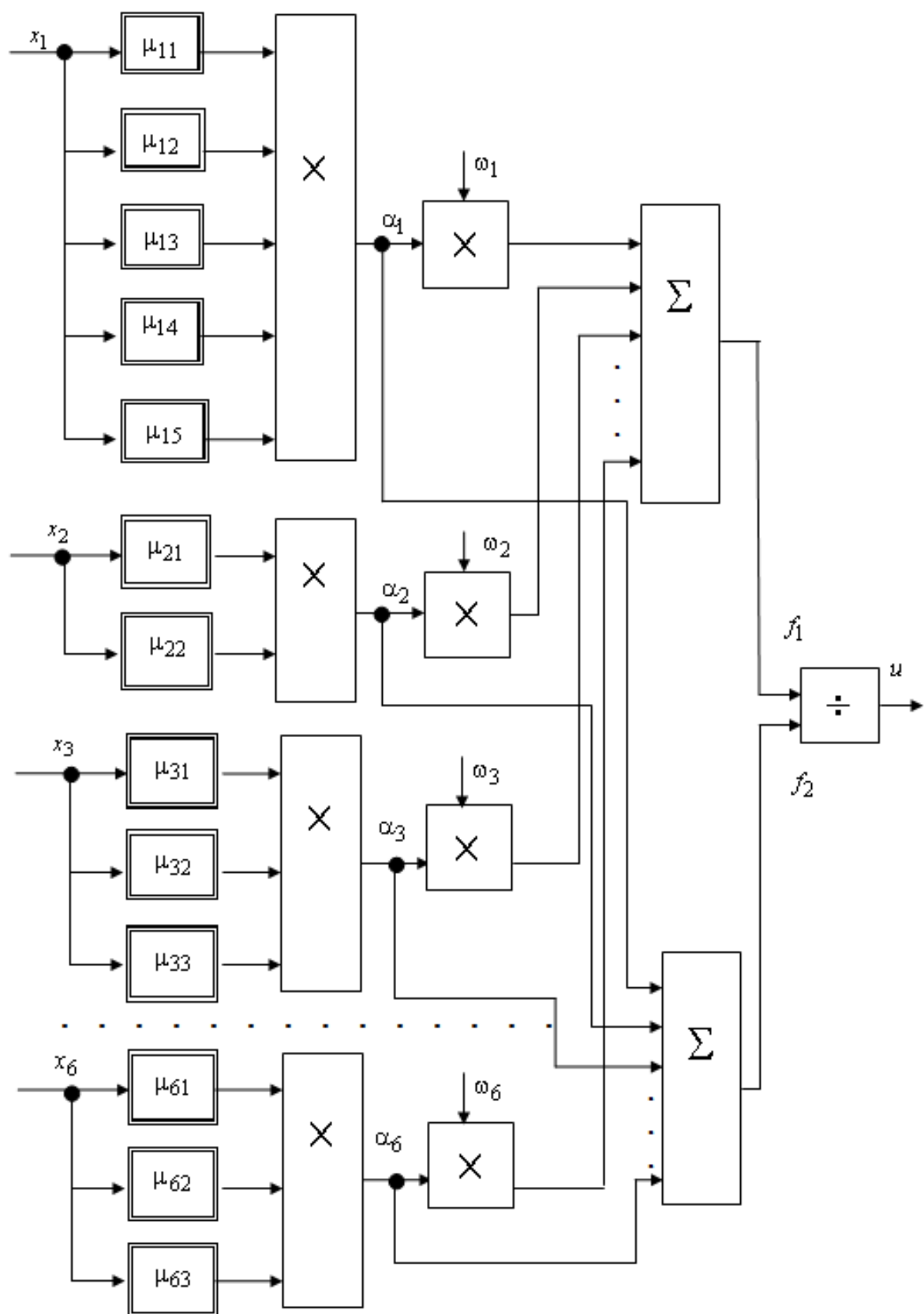


Рис. 1. Нечеткая нейронная сеть искусственной иммунной системы

Величина (2) представляет собой управляющее воздействие $u(k)$, подаваемое на вход объекта управления (1), который представлен на функциональной схеме иммунной системы управления с блоком интеллектуального управления (рис. 2).

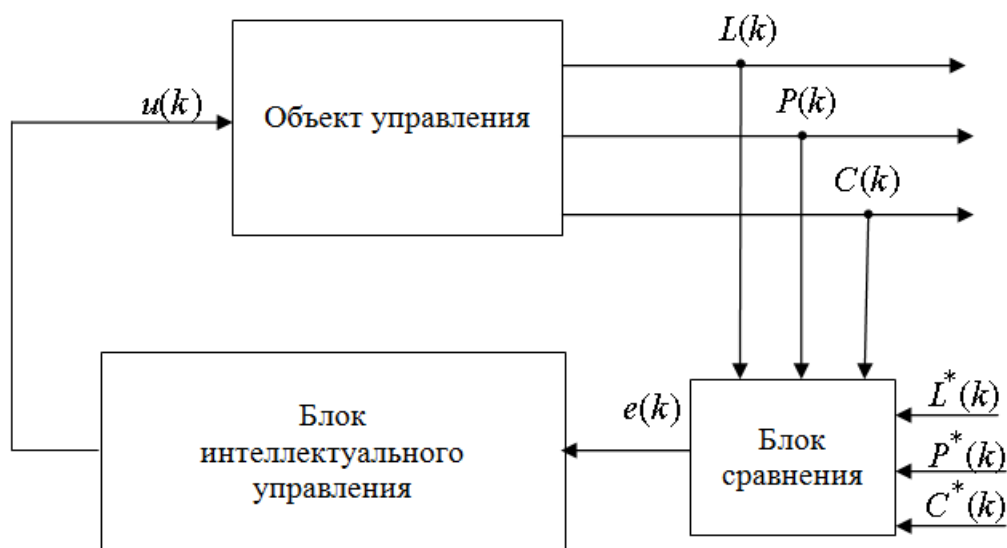


Рис.2. Функциональная схема иммунной системы управления

Блок интеллектуального управления представляет собой нечёткую нейронную сеть. В процессе обучения нечеткой нейронной сети определяются оптимальные значения изменяемых (настраиваемых) параметров.

Заключение. Разработана схема нечеткой нейронной сети для иммунной системы оптимального управления терапевтическими дозами сульфаниламидов для терапии пиелонефрита на основе методов нечеткой логики. Для блока интеллектуального управления разработана нечеткая многослойная нейронная сеть, в которой слои выполняют функции элементов системы нечеткого вывода.

Исследования проводятся по гранту №ГР 0115РК00549 МОН РК по теме: Компьютерный молекулярный дизайн лекарственных препаратов на основе иммунно-сетевого моделирования (2015-2017 гг.).

Список литературы

1. Dasgupta, D. Recent Advances in Artificial Immune Systems: Models and Applications / D. Dasgupta, S. Yu, F. Nino // Applied Soft Computing Journal. – 2011. – Vol. 11. – P. 1574-1587.
2. Shiryayeva, O.I. Investigation of artificially immune system with using of fuzzy logic / O.I. Shiryayeva, T.G. Denisova // Новосибирск: Вычислительные технологии (Серия "Математика, механика, информатика"). – 2015. – С. 209-217.
3. Усков, А.А. Системы с нечеткими моделями объектов управления: Монография / А.А. Усков. – Смоленск: Смоленский филиал АНО ВПО ЦС РФ "Российский университет кооперации", 2013. – 153 с.
4. Ширяева, О.И. Разработка алгоритма получения оптимального количества сульфаниламидов на основе теории искусственных иммунных систем / О.И. Ширяева, Т.Г. Денисова // Труды междунар. научн. конф. "Теория функций, информатика, дифференциальные уравнения и их приложения". – КазНУ им.Аль-Фараби, 2015. – С. 194-196.

РАЗРАБОТКА ГЕОЛОГО-ГЕОХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ “МЕГАСИСТЕМА “ВЕЩЕСТВО ВОД ОЗЕРА БАЙКАЛ – ВЕЩЕСТВО ПОТОКОВ ПРИРОДНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ””

Астраханцева О.Ю.

Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1а, Россия, E-mail: astra@igc.irk.ru

Создание имитационных моделей процессов формирования химического состава природных вод континентальных водоемов является важнейшей теоретической проблемой гидрогеохимии. Одна из основных проблем в создании имитационных физико-химических моделей формирования химических составов природных объектов при их взаимодействии с веществом окружающей среды является разработка подхода к их созданию.

Предмет нашего исследования – физико-химическое взаимодействие вещества вод оз. Байкал и вещества потоков природной составляющей окружающей среды, включающее совокупность геохимических процессов взаимодействия вод озера и внешних входящих и выходящих потоков, приводящих к установлению стационарного состояния мегасистемы в целом в течение исторически значимого интервала времени. Существуют средство для исследования – алгоритм физико-химического моделирования эволюции системы локально-равновесных резервуаров, связанных потоками подвижных групп фаз [24, 26] с положенной в его основу теорией стабильных стационарных мегасистем [23] и универсальный инструмент для решения широкого круга задач физико-химического моделирования – программный комплекс “Селектор”. Учитывая, что комплексное исследование мегасистемы “вещество вод оз. Байкал – вещество потоков окружающей среды” методом компьютерного физико-химического моделирования еще никем ранее не проводились, перед исследователями встает задача создания принципов и методов подхода к формированию физико-химических моделей этой мегасистемы.

Общие методологические принципы моделирования водных систем предусматривают определенную последовательность в построении моделей [25]. Прежде всего необходимо построить качественную геологическую (геохимическую) модель процесса или явления, которая должна содержать граничные условия – пространственно-временные масштабы для построения модели, Т-Р – условия процесса, источники вещества и их составы, способы и характеристики переноса вещества. Далее на этой основе строят его физико-химическую, математическую и компьютерную модели.

Цель данной статьи – показать принципы и методы подхода к созданию геолого – геохимической модели “вещество вод оз. Байкал – вещество потоков природной составляющей окружающей среды”.

Необходимо учитывать, что Байкал – глубокое рифтовое олиготрофное озеро, эволюцией которого управляют физико-химические законы, обусловленные рифтогенной структурой земной коры. Геоэкосистема озера подобна океанской, а не озерной [22]. На то, что Байкал подобен океанической геоэкосистеме, указывает и наличие океанических фронтов [27 - 29]. Отличие озера от других континентальных озер – сложное строение дна и максимальная средняя глубина (больше 500 м). Следовательно, подход к созданию геохимической модели системы “вещество вод оз. Байкал – вещество потоков природной составляющей окружающей среды” должен быть особым, индивидуальным, как к сложной системе. Создание геохимической модели озера дает реально осу-

шественную возможность перехода на новую технологию переработки накопленного фонда эмпирических данных по озеру Байкал и его потокам.

Создание геолого-геохимической модели “вещество вод оз. Байкал – вещество потоков природной составляющей окружающей среды” обуславливает необходимость определения баланса масс – количества вещества в водах озера и потоках, поступающих и вытекающих из озера и установления особенностей миграции и аккумуляции компонентов, поступающих в озеро с потоками. Эта цель достигнута путем решения следующих **задач**:

1) в акватории вещества вод оз. Байкал выделены пространственно локализованные зоны со стабильными физико-химическими параметрами в масштабе исторического времени; структура физико-химического состояния вещества вод оз. Байкал, равновесного по физико-химическим параметрам с веществом окружающей среды, определена как многорезервуарная; из сложного эволюционирующего и иерархического объекта – мегасистемы «вещество вод озера Байкал – вещество потоков природной составляющей окружающей среды» выделены системы термодинамического типа; установлена организованность в отношении структуры физико-химического состояния вещества вод озера Байкал и в отношении целостности функциональных характеристик в исследуемом химическом взаимодействии [2, 16, 17];

2) в выделенных зонах через внутренние физико-химические параметры рассчитаны формы нахождения компонентов и характер геохимической среды (рН, Eh, минерализация); проведен расчет равновесных составов компонентов подсистем (поверхностных, прибрежных, глубинных, придонных вод) выделенных резервуаров озера методом минимизации потенциала Гиббса – $G(T, P)$ [11, 13];

3) учтена вся совокупность факторов при расчете среднесуточных содержаний и количеств компонентов: Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Al, Si, Mn^{2+} , $Fe_{общ}$, SO_4^{2-} , HCO_3^- , Cl⁻, NO_3^- , PO_4^{3-} , H^+ , O_2 , As, B, Cr, Cu, Cd, Hg, Pb, Sr, Zn, Co, U, V, Br, Rb, Mo, $C_{орг}$, $N_{орг}$, $P_{орг}$, $S_{орг}$, CO_2 , Ti в поверхностных, прибрежных, глубинных, придонных водах, донных отложениях Южного, Селенгинского, Среднего. Ушканьеостровского, Северного резервуаров озера Байкал и потоках, впадающих и вытекающих из резервуаров озера: реки, взвесь рек, дождь+снег, аэрозоль, подземные воды, минеральные воды, приток озерных вод из других резервуаров озера, поток из донных отложений, поток в донные отложения, сток озерных вод в другие резервуары озера и в реку Ангара (в %, мг/л, г/год) в период 1957 – 1998 гг. [1, 2, 14, 19, 20];

– исследованы морфометрические характеристики и изучены водные балансы выделенных резервуаров оз. Байкал и потоков, оценена интенсивность водообмена в резервуарах [5, 6];

– количественно оценены масштабы движения подземных вод в водосборных бассейнах пяти резервуаров оз. Байкал, что позволило оценить масштабы подземного химического привноса в озеро [4, 19, 20];

– изучены среднесуточные количества компонентов в потоках компонентов из донных отложений и в донные отложения в резервуарах оз. Байкал (в г/год) [14, 15];

– изучены химические балансы компонентов в пяти выделенных резервуарах озера с учетом внутренней нагрузки – потоков компонентов из донных отложений [7, 8, 9, 10, 12, 18];

– изучена пространственная миграция компонентов в водах пяти резервуаров озера, определены формы миграции компонентов (в твердой и растворимой фазе), выделены подвижные и инертные компоненты [7, 8, 9, 10, 12, 15, 16, 18, 21];

– установлены классы элементов экологической опасности для каждого резервуара оз. Байкал [7, 8, 9, 10, 12];

– составлен прогноз поведения компонентов в резервуарах в случае их попадания с антропогенной нагрузкой [7, 8, 9, 10, 12, 16, 21].

Разработанная геохимическая модель “Мегасистема “оз. Байкал – потоки”” позволила сделать следующие **выводы**:

1. Химическое взаимодействие компонентов вещества вод озера Байкал с компонентами вещества потоков природной составляющей окружающей среды – природная, стационарная мегасистема, состоящая из пяти резервуаров – пространственно локализованных объемов вещества вод озера, физико-химические параметры которых находятся в состоянии равновесия (равенства) с таковыми же параметрами окружающей среды, т.е. постоянны в масштабе исторического времени (периоде нескольких десятков лет), и открытых по отношению к веществу потоков окружающей среды.

2. Разновеликость гравитационного взаимодействия вещества вод оз. Байкал и вещества Земли по акватории озера из-за резкого пересечения дна является тем фактором, который определяет структуру вещества вод озера, равновесного по физико-химическим параметрам с веществом окружающей среды как многорезервуарную.

3. Иерархичность гравитационного взаимодействия обуславливает: иерархичность общего – термодинамического взаимодействия вещества вод оз. Байкал и вещества окружающей среды и иерархичность их частных – теплового и химического взаимодействий; индивидуальность приходной и расходной статей в энергетических балансах и, соответственно, самих энергетических балансов резервуаров. Индивидуальность энергетического потенциала каждого резервуара объясняет индивидуальность отклика вещества резервуаров на поступление компонентов вещества потоков окружающей среды и, соответственно, параметры геохимической среды в резервуарах как результат этих процессов.

4. Установлено, в виде каких химических соединений компоненты присутствуют в веществе водных подсистем: все компоненты образуют ионные пары, причем в нескольких формах, только макрокомпоненты на 99% представлены в виде свободных незакомплексованных ионов. Доминирующая форма серы – SO_4^{2-} , углерода – HCO_3^- . Хлор присутствует в виде иона Cl^- . У всех биогенных компонентов и микроэлементов, кроме Br, основные формы нахождения в водах Байкала – ионные комплексы. Причем у таких компонентов, как Al, Cu, Cr, Fe, As, P, Hg, U, V доминирующие формы нахождения в разных подсистемах различаются.

5. Исследование структуры водного баланса оз. Байкал через его расчет в отдельных резервуарах озера показало, что в приходной части водного баланса материковый сток является главной составляющей только для Северного и Селенгинского резервуаров, для остальных резервуаров первое место по вкладу в водный баланс занимает приток озерных вод из соседних резервуаров озера. Выявлено среднее значение постоянной времени обмена вод для каждого резервуара: в Северном резервуаре – около 386 лет; в Ушканьеостровском – около 129 лет; в Среднем – около 287 лет; в Селенгинском – около 25 лет; в Южном – около 96 лет.

6. Установленные функции систем “вещество резервуаров озера Байкал – вещество потоков окружающей среды”: комплексообразование, миграция, избирательный

транзит и избирательная утилизация или включение в биогеохимические круговороты компонентов, поступивших в резервуары озера из внешней среды с веществом потоков. Внешняя функциональная иерархия вещества вод резервуаров оз. Байкал проявляется в организации движения (миграции) компонентов и проценте их аккумуляции в донных отложениях резервуаров.

7. Сходство функций вещества резервуаров озера наблюдается в отношении их пропускной и аккумулирующей способностей относительно поступающих с внутренними и внешними потоками основных элементов, микроэлементов, биогенных элементов и органического вещества, заключающейся в открытости – способности частично или полностью пропускать (транзит) и обмениваться между резервуарами следующими компонентами: HCO_3^- , SO_4^{2-} , Cl^- , K^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , В, Мо, Нг, Sr, $\text{C}_{\text{орг}}$, $\text{N}_{\text{орг}}$, $\text{S}_{\text{орг}}$ и закрытости в отношении остальных компонентов (части катионов основных компонентов, биогенных элементов, части органического вещества, микроэлементов), которые связываются (вступают в комплексообразование) и остаются в резервуарах (захораниваются или вступают в химический круговорот). По этим компонентам резервуары полуавтономны, закрыты и не обмениваются с другими резервуарами. Различие функций резервуаров заключается в том, как расходуются аккумулированные компоненты: в Селенгинском резервуаре они захораниваются, в остальных небольшая их часть захоранивается, а большая часть вступает в химический круговорот.

8. В поставке биогенных элементов все резервуары, кроме Селенгинского, находятся на внутреннем обеспечении (потоки из донных отложений), и только Селенгинский резервуар питается внешним привносом. Внешняя и внутренняя нагрузки на протяжении озера, в зависимости от морфологии, резко меняются и индивидуальны в каждом резервуаре. Выявлены большие внутренние нагрузки – потоки из донных отложений в четырех резервуарах озера и незначительная в Селенгинском резервуаре. Установлена ведущая роль внутриводоемных процессов в поступлении и утилизации биогенных элементов, $\text{P}_{\text{орг}}$, основных компонентов – катионов и группы микроэлементов в резервуарах оз. Байкал.

9. Утилизация вещества в донные осадки оз. Байкал избирательна: с внутриводоемными потоками в донные отложения поступают биогенные элементы, $\text{P}_{\text{орг}}$, часть остального органического вещества, часть основных компонентов – катионов и группа микроэлементов. Установлено, что во всех резервуарах оз. Байкал, кроме Селенгинского, процент утилизации (захоронения) поступающего вещества очень низок вследствие того, что вещество, поступившее с потоком в донные отложения, за отсутствием малой части возвращается с потоком из донных отложений. В четырех резервуарах озера утилизация вещества ничтожна (около 10 %), при этом существуют мощные химические круговороты компонентов. В Селенгинском резервуаре захоранивается 85 % вещества, поступившего с потоком в донные отложения.

10. Вещество мегасистемы “вещество вод оз. Байкал – вещество потоков окружающей среды” иерархично – вещество каждого резервуара может рассматриваться как система, обладающая целостностью в отношении своих функций и определяемая в своих границах по физико-химическим параметрам.

Список литературы

1. Астраханцева О.Ю. Принципы создания модели “Мегасистема “Оз. Байкал””, база данных // Проблемы земной цивилизации. Сборник статей “Поиск решения про-

блем выживания и безопасности Земной цивилизации”. Вып.6, ч.1. – Иркутск, ASPrint, 2002. – С. 72-121.

2. Астраханцева О.Ю. Создание физико-химической модели “Мегасистема “Оз. Байкал””. Выделение полуавтономных подсистем в озере Байкал // Бюллетень ВСНЦ СО РАМН. – 2003. – №7. – С. 124-129.

3. Астраханцева О.Ю. База данных химического состава вод и потоков оз. Байкал // Экосистемы и природные ресурсы горных стран. Материалы Первого Междунар. симпоз. “Байкал. Современное состояние поверхностной и подземной гидросферы горных стран”. – Новосибирск: Наука. –2004. – С. 233-260.

4. Астраханцева О.Ю. Количественная оценка потока “Подземные воды”, впадающего в озеро Байкал, для пяти резервуаров озера Байкал: Южного, Селенгинского, Среднего, Ушканьеостровского, Северного // Вестник ИрГТУ. – 2007. – № 3 (31). – С.15-21.

5. Астраханцева О.Ю. Расчет морфометрических характеристик сложной системы “Озеро Байкал” // Вестник ИрГТУ. – 2007а. – № 4 (32). – С.42-49.

6. Астраханцева О.Ю., Глазунов О.М. Водный баланс мегасистемы “Озеро Байкал”. Вестник ИрГТУ. – 2008. – № 3 (35). – С. 148 – 154.

7. Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В., Глазунов О.М. Химический баланс Южного резервуара оз. Байкал // Вестник ИрГТУ. – 2011. – № 8 (55). – С. 16 – 28.

8. Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В., Глазунов О.М. Химический баланс Селенгинского резервуара оз. Байкал // Вестник ИрГТУ. – 2012. – № 1 (60). С. 20 – 32.

9. Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В., Глазунов О.М. Химический баланс Среднего резервуара оз. Байкал // Вестник ИрГТУ. – 2012а. – № 3 (62). – С. 28 – 42.

10. Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В., Глазунов О.М. Химический баланс Ушканьеостровского резервуара оз. Байкал // Вестник ИрГТУ. – 2012b. – № 5 (64). – С. 36 – 50.

11. Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В. Равновесные физико-химические модели прибрежных вод резервуаров оз. Байкал // Современные проблемы геологии, геохимии и геоэкологии Дальнего Востока России. Материалы 4 -й Всеросс. конф. молодых ученых (Владивосток. 27 августа – 5 сентября 2012 г.) – Владивосток: Дальнаука, 2012с. – С. 249-258.

12. Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В., Глазунов О.М. Химический баланс Северного резервуара оз. Байкал // Вестник ИрГТУ. – 2013. – № 3 (74). – С. 35 – 47.

13. Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В. Расчет форм существования компонентов и характера геохимической среды (Еh, рН, минерализация) в подсистемах – глубинных водах резервуаров оз. Байкал через внутренние физико-химические параметры, равновесные с параметрами окружающей среды // Гелиогеофизические исследования. –2014. – №9 (9). – С.30-34.

14. Астраханцева О.Ю. Среднемноголетние содержания компонентов в донных отложениях Южного, Селенгинского, Среднего, Ушканьеостровского, Северного резервуаров озера Байкал // Вестник ИрГТУ. – 2014. – № 9 (92). – С. 53-63.

15. Астраханцева О.Ю., Филиппова Л.А. Исследование вклада потоков (из донных отложений и в донные отложения) в химические балансы Южного, Селенгинского, Среднего, Ушканьеостровского и Северного резервуаров оз. Байкал // Вестник ИрГТУ. – 2014. – №10 (93). – С. 68-79.

16. Астраханцева О.Ю., Глазунов О.М. Исследование и сравнение функциональных характеристик вещества Южного, Селенгинского, Среднего, Ушканьеостровского, Северного резервуаров оз. Байкал // Вестник ИрГТУ. – 2015. – № 3 (98). – С. 61-70.
17. Астраханцева О.Ю. Исследование внутренней (структурной) иерархии вещества вод озера Байкал // Вестник ИрГТУ. – 2015. – № 4 (99). – С. 53-64.
18. Астраханцева О.Ю., Белозерцева И.А., Палкин О.Ю. Исследование внешней (функциональной) иерархии вещества в открытой по отношению к веществу потоков окружающей среды мегасистеме “вещество вод оз. Байкал” // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2015. – № 8-1. – С. 87 – 98.
19. Астраханцева О.Ю., Белозерцева И.А., Палкин О.Ю. Исследование средне-многолетних содержаний и количества химических компонентов в потоках “Минеральные воды”, впадающих в Южный, селенгинский, Средний, Ушканьеостровский, Северный резервуары оз. Байкал // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2015а. – № 8-2. – С. 303 – 321.
20. Астраханцева О.Ю., Белозерцева И.А., Палкин О.Ю. Исследование фоновых содержаний и количества химических компонентов в потоках “Подземные воды”, впадающих в Южный, селенгинский, Средний, Ушканьеостровский, Северный резервуары оз. Байкал // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 2.
21. Астраханцева О.Ю., Белозерцева И.А., Палкин О.Ю. Вертикальные потоки вещества в донные отложения и из донных отложений в резервуарах оз. Байкал // Вода: химия и экология. – 2016. – № 5. – С. 3 – 13.
22. Верховзина В.А. Дисс... доктора тех. наук. Иркутск. гос. тех. универ-т. Формирование качества пресных вод крупнейших и рифтовых озер мира и их рациональное использование (на примере озер Байкал и Ньяса). – 2002. – 344с.
23. Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. Новосибирск: Наука. – 1981. – 247с.
24. Кулик Д.А., Чудненко К.В., Карпов И.К. Алгоритм физико-химического моделирования эволюции системы локально-равновесных резервуаров, связанных потоками подвижных групп фаз // Геохимия. – 1992. – № 6. – С. 858-879.
25. Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии / Под ред. С.Р. Крайнова. М.: Недра. – 1988. – 254с.
26. Чудненко К.В. Дисс... доктора г.-м. наук. Иркутск. гос. тех. универ-т. Теория и программное обеспечение метода минимизации термодинамических потенциалов для решения геохимических задач. – 2007. – 385с.
27. Шерстянкин П.П. Присклоновые фронты показателя ослабления света на Байкале в зимний период // Докл. АН СССР. – 1991. - Т. 321, № 5. - С. 1087-1090.
28. Шерстянкин П.П. Оптические структуры и фронты океанического типа на Байкале. Дис.... д-ра физ.-матем. наук (в форме научного доклада). ИО РАН, М., 1993. - 37 с.
29. Шерстянкин П.П. Байкал, питьевая вода, устойчивое развитие: сегодня и в XXI веке // Химия в интересах устойчивого развития. – 1997. - № 5, 1997. - С.443-451.

РАСШИРЕНИЕ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ ЭЛЕКТРОН-ИОННОЙ ПЛАЗМЫ В ОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

И. Л. Исаев¹, А. Е. Ершов^{1,2}, С. А. Филимонов³, А. П. Гаврилюк^{1,2}

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН,

²СФУ

³ООО «ТОРИНС»

Интерес к ультрахолодной плазме (температура частиц ≤ 100 К) обусловлен как фундаментальными, так и прикладными аспектами. К фундаментальным аспектам относится, например, возможность исследования кинетики фазовых переходов в кулоновских системах, включая и их кристаллизацию (образование вигнеровского кристалла). К настоящему времени такие фазовые переходы наблюдались в таких кулоновских системах, как пылевая плазма [1]. Первые попытки по созданию ультрахолодной сильнонеидеальной (параметр неидеальности $\Gamma \geq 1$) электрон-ионной плазмы были предприняты начиная с 1999 г. [2,3]. Но вследствие ее разлета и протекающих в ней элементарных процессов, невозможно было наблюдать ее кристаллизацию. Для этого было необходимо использование методов лазерного охлаждения ионов. Использование метода лазерного охлаждения позволяет создавать электрон-ионную плазму (в отсутствии ее разлета) с сильнонеидеальной ионной подсистемой, формирующуюся при этом в упорядоченную структуру [4]. Основным препятствием остается необходимость ее долговременного (≥ 1 мс) удержания, чтобы успевало происходить охлаждение ионов и формирование упорядоченной структуры. Естественным было бы ожидать, что однородное магнитное поле может значительно замедлить разлет плазмы. Имеющиеся немногочисленные экспериментальные работы по разлету ультрахолодной плазмы носят противоречивый характер. Например, в работе [5] наблюдалось замедление разлета такой плазмы при приложении небольшого однородного магнитного поля. На рис. 1 показан процесс расширения. На ранних этапах скорость определяется кулоновским отталкиванием ионов. По мере расширения этот эффект уменьшается, чем и объясняется начальное уменьшение скорости. После 20 мкс плазма расширяется со скоростью обратно пропорциональной величине магнитного поля.

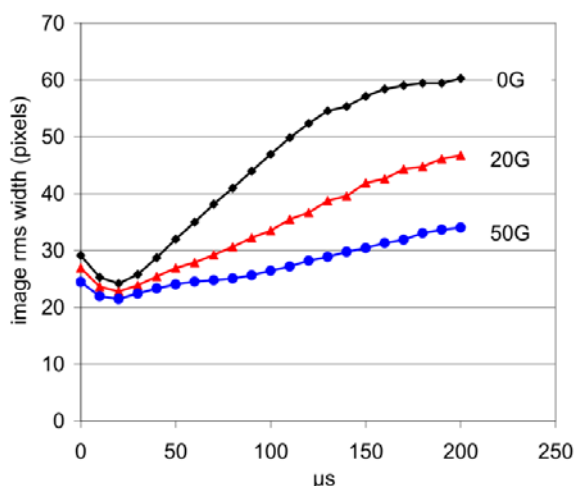


Рис. 1. Скорость расширения плазмы как функции времени в эксперименте [5] при трех различных значениях магнитного поля: без магнитного поля (черная кривая), с магнитным полем в 20 гауссов (красная кривая) и 50 гауссов (синяя).

Следует также отметить, что имеющиеся теоретические основы [6] для описания разлета (диффузии) плазмы и электрон-ионного обмена энергией в магнитном поле приложимы к слабонеидеальным системам заряженных частиц.

Таким образом, решение поставленной задачи представляет интерес не только с точки зрения исследования фазовых переходов в кулоновских системах, но и как исследование поведения неидеальных кулоновских в магнитном поле.

Постановка задачи

Для иллюстрации того, насколько параметры ультрахолодной плазмы отличны от других видов плазмы представлен рис. 2, где показаны параметры плазмы, реализующиеся в различных системах на логарифмической шкале температуры и концентрации. При этом электронная подсистема изначально является слабонеидеальной ($\Gamma_e \ll 1$), а ионная- сильнонеидеальной ($\Gamma_i \gg 1$).

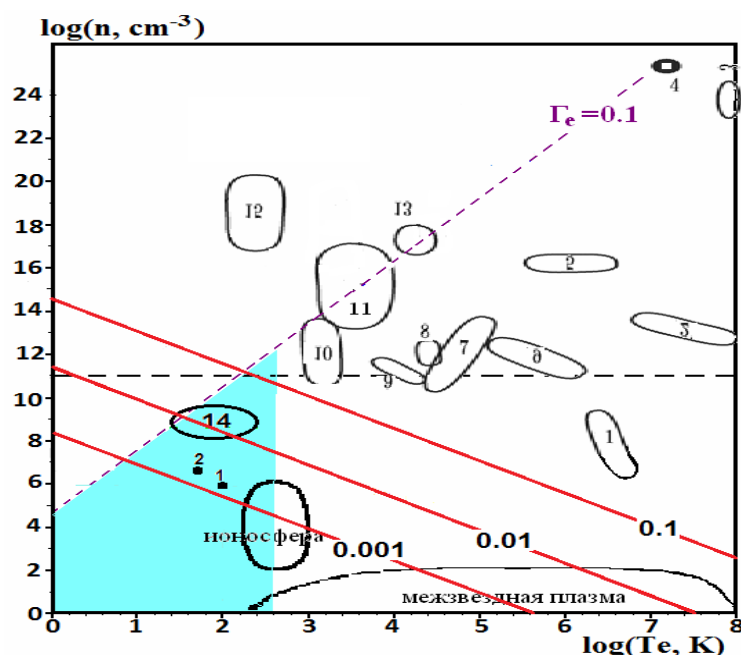


Рис. 2. Плазма, реализующаяся в различных системах: 1 – солнечная корона; 2 – токамак; 3 – лазерный термоядерный синтез; 4 – ядро Солнца; 5 – Z-пинч; 6 – стелларатор; 7 – газовые лазеры; 8 – плазмотрон; 9 – хромосфера Солнца; 10 – плазма продуктов сгорания углеводородных топлив; 11 – электрические дуги; 12 – катодное пятно; 13 – искра; 14 – УП, полученная в экспериментах по фотоионизации охлажденных атомов. Точками (*) изображены параметры расчетной плазмы.

Для решения задачи предполагается использование метода молекулярной или броуновской динамики. Основной трудностью для их реализации является большая разница (в $\sim 10^4 \div 10^6$ раз) скоростей электронов и ионов, а также присутствие действующих кулоновских сил. Расчет движения электронов требует малого временного шага, а ионов большого временного интервала. Частично решение этого вопроса возможно при использовании разновеликих по частицам временных шагов. Надо отметить, что ранее моделирование ультрахолодной плазмы с сильнонеидеальной ионной компонентой в магнитном поле никем не проводилось. Поэтому реализация модели в мало исследованной области параметров плазмы может быть связана с возникновением целого ряда численных проблем.

На рис. 3 показана принципиальная схема цилиндрической ячейки, применяемой в моделировании. Рассмотрим тонкий слой цилиндрической ячейки с ионо-

электронной плазмой внутри под действием однородного магнитного поля. Ограничение рассмотрения только тонкого слоя позволяет ускорить расчет и получать более наглядные псевдодвумерные результаты. На данном этапе исследований представляет интерес процесс разлета ионо-электронной плазмы в сравнительно слабом однородном магнитном поле.

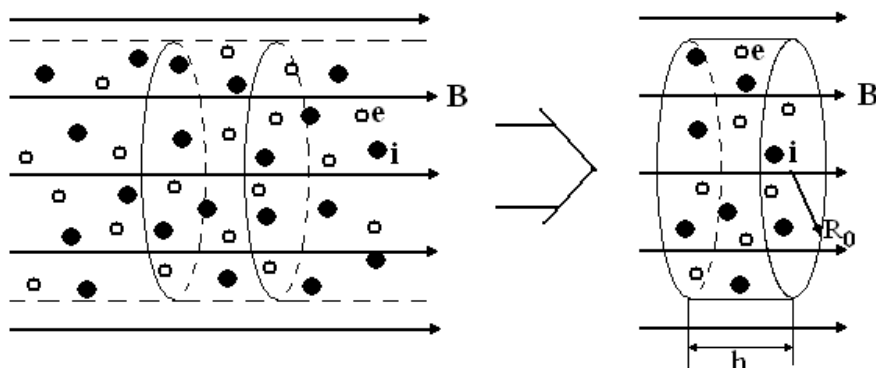


Рис. 3. Схема ячейки. Стрелками B показано направление магнитного поля, h – длина ячейки, R_0 – её радиус, i – ионы, e – электроны.

Учет магнитного взаимодействия порождает различные трудности. Начиная от чисто расчетных: решение уравнений движения на основе Рунге-Кутты 4 порядка уже не дают приемлемой точности. Были испробованы различные численные методы уравнения движения, как многшаговые, так и одношаговые. В конце концов, для решения этой проблемы были использована модифицированные Фельбергом методы уравнения Рунге-Кутты.

Результаты

На рис. 4 показан результат моделирования при разном магнитном поле. Температура электронов составляла $T_e = 50$ К, начальная температура ионов $T_i = 0.01$ К. Видно, что при малом магнитном поле 0.01 Тл оно значительно влияет на траектории частиц: ионы двигаются по круговой траектории и если ион оказывается далеко от остальных частиц, то возвращается в ячейку. Уже в этом случае достаточно отчетливо можно увидеть пары частиц электрон-ион. При дальнейшем увеличении магнитного поля до 0.1 Тл, когда ларморовский радиус становится меньше среднего межчастичного расстояния, ион совместно с электроном может образовать что-то вроде нейтрального атома и покинуть плазму гораздо быстрее, чем изолированные ионы или электроны, находящиеся под действием этого же магнитного поля.

Для сравнения показаны (рис. 4в) траектории частиц в не нейтральной плазме (одни ионы). Видно, что в этом случае при достаточно большом поле в 0.1 Тл разлета в нашем временном масштабе совершенно не наблюдается.

На рис. 5 показано изменение количества частиц внутри ячейки в процессе расширения плазмы. Видно, что скорость расширения плазмы при увеличении магнитного поля уменьшается, что, казалось бы, хорошо соответствует тенденции, наблюдаемой в эксперименте (рис. 1). Но в экспериментальном случае ларморовский радиус электронов значительно превышает среднее межчастичное расстояние ($n > 10^{15} \text{ м}^{-3}$) и разлет носит диффузионный характер, без образования парных электрон-ионных комплексов. В нашем же случае большую роль играет образование и разлет подобных комплексов. В этом случае падение скорости разлета с увеличением поля обусловлено уменьшением дрейфовой скорости $V_{dr} \sim 1/B$, хотя число этих комплексов при этом растет.

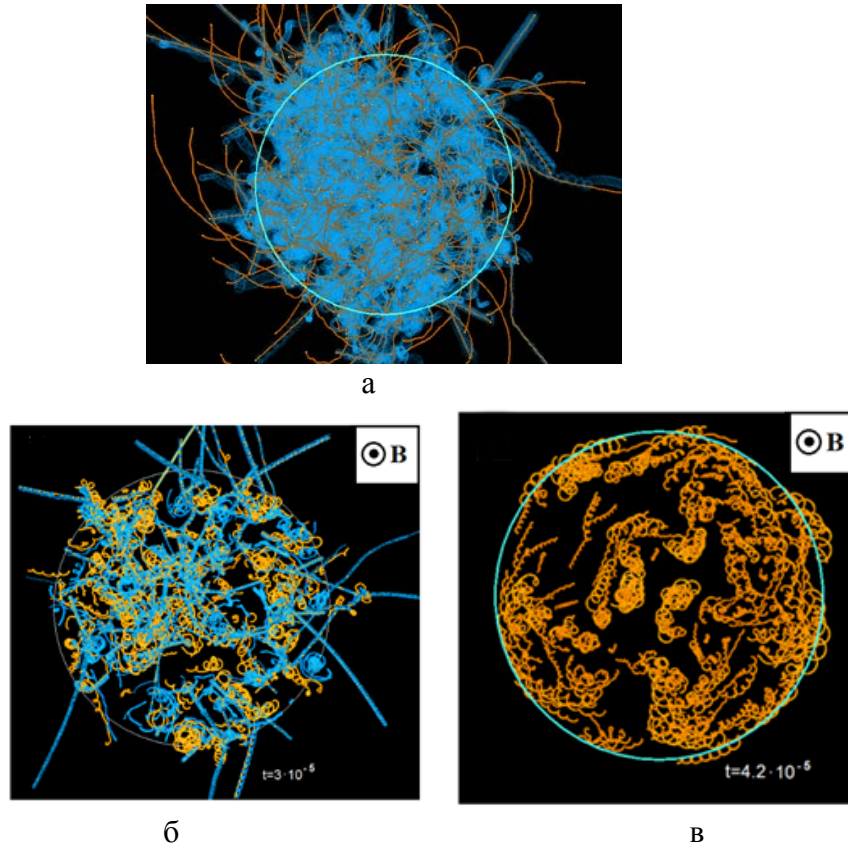


Рис. 4. Результат численного моделирования. Виден срез цилиндрической ячейки, магнитное поле направленно на зрителя, оранжевым отмечены траектории ионов, синим – траектории электронов. $N = 400$, $n = 5 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-3}$, $R = 8 \cdot 10^{-4} \text{ м}$. $B = 0.01 \text{ Тл}$ (а), $B = 0.1 \text{ Тл}$ (б). На рис. в изображена ненейтральная плазма, состоящая из одних ионов в магнитном поле $B = 0.1 \text{ Тл}$.

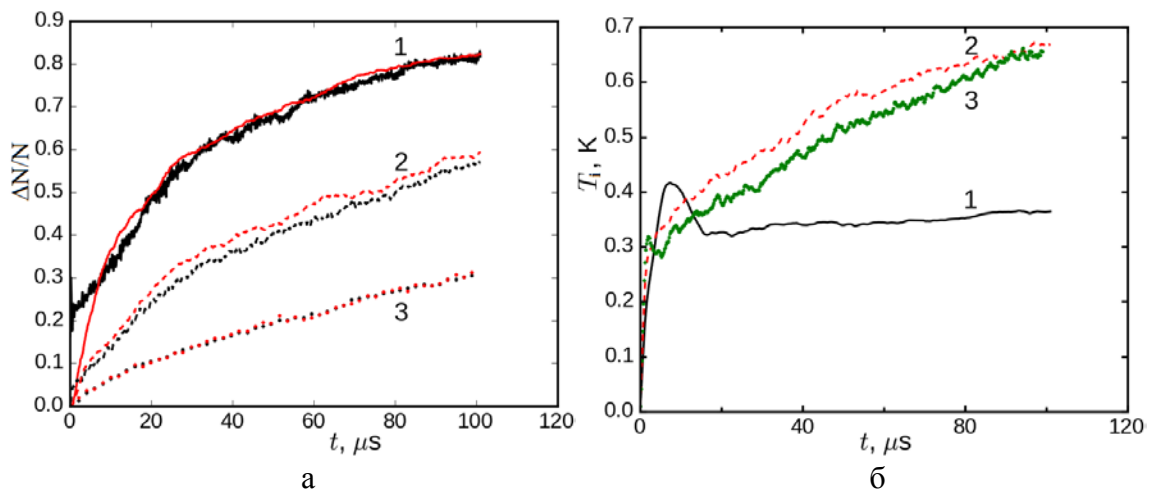


Рис. 5. Доля вылетевших из ячейки частиц и температура ионов, оставшихся в ячейке при расширении плазмы. 1 – $B = 0.001 \text{ Тл}$, 2 – $B = 0.01 \text{ Тл}$, 3 – $B = 0.1 \text{ Тл}$. На б отображена температура ионов. $N = 1000$, $n = 5 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-3}$, $R = 8 \cdot 10^{-4} \text{ м}$, $h = 10^{-4} \text{ м}$, $T_i = 0.01 \text{ К}$, $T_e = 50 \text{ К}$

Как видно из рисунка 5б, в начальный момент наблюдается резкий рост температуры ионов, что можно объяснить (как можно увидеть ниже на рис.6,7) их захватом электронами в парные комплексы.

Были рассмотрены траектории электрона с ионом поперек магнитного поля (рис. 6 и рис. 7). Видно, что движение электрона в этом случае хорошо описывается моделью дрейфа ведущего центра [7, 8]. Электрон, дрейфующий вокруг иона, значительно изменяет траекторию иона. Движение каждой из частиц комплекса можно представить, как движение в скрещенных магнитном и электрическом поле соседней частицы.

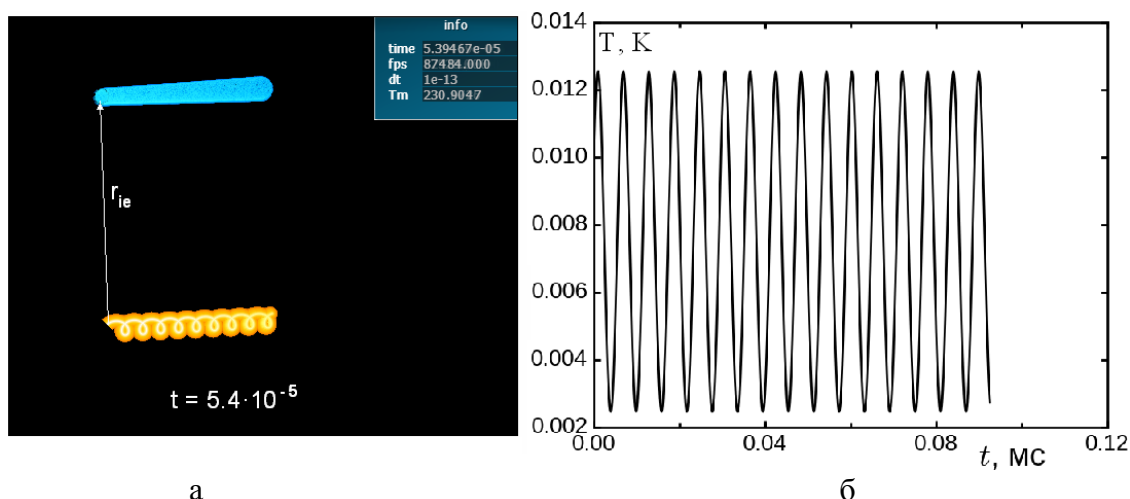


Рис. 6. Траектории движения одной пары частиц – иона и электрона в магнитном поле $B = 0.1$ Тл. На рис. б приведена энергия электрон-ионного взаимодействия. Начальные параметры: $T_i = 0.01$ К, $T_e = 100$ К, расстояние между ионом и ионом $r_{ie} = 10^{-4}$ м, дрейфовая скорость $V_{dr} = 1.4$ м/с

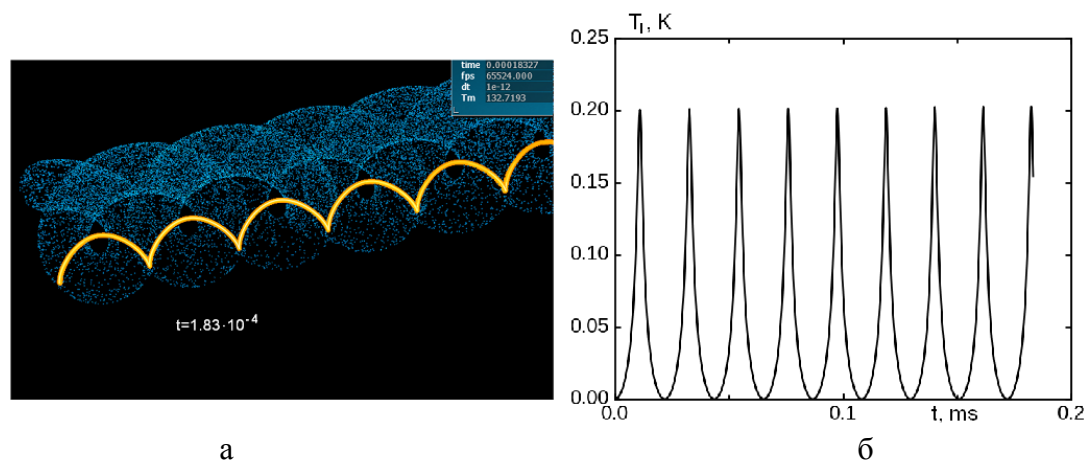


Рис. 7. Траектории движения одной пары частиц – иона и электрона в магнитном поле $B = 0.01$ Тл. На рис. б приведена энергия электрон-ионного взаимодействия. Начальные параметры: $T_i = 0.01$ К, $T_e = 100$ К, $r_{ie} = 10^{-4}$ м, $V_{dr} = 2.5$ м/с

Таким образом, расширение плазмы в сильном магнитном поле значительно быстрее, чем ожидалось в диффузионном приближении. Это обусловлено образованием нейтральных парных комплексов при условии, что ларморовский радиус электронов меньше среднего межчастичного расстояния.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №16-32-00382 мол_а.

Список литературы

1. Фортков В.Е., Храпак А.Г. и др. Пылевая плазма // УФН. — 2004. — Т.174, No.5. — С.495
2. Killian T. C., Kulin S., Bergeson S. D. et al. Creation of an Ultracold Neutral Plasma // Phys. Rev. Lett. 1999. — Dec. Vol. 83, no. 23. P. 4776–4779.
3. Kulin S., Killian T. C., Bergeson S. D., Rolston S. L. Plasma Oscillations and Expansion of an Ultracold Neutral Plasma // Phys. Rev. Lett. 2000. — Jul. Vol. 85, no. 2. P. 318–321.
4. Gavriluk A. P., Isaev I. L., Karpov S. V. et al. Brownian Dynamics of Laser Cooling and Crystallization of Electron-ion Plasma // Physical Review E. 2009. Vol. 80. P. 054401–1–054401–6.
5. Zhang X. L., Fletcher R. S., Rolston S. L. et al. Ultracold Plasma Expansion in a Magnetic Field // Phys. Rev. Lett. 2008. — June. Vol. 100, no. 23. P. 235002.
6. В.П.Силин. Введение в кинетическую теорию газов // М. — 1998. — 337 стр
7. S. G. Kuzmin and T. M. O’Neil. Guiding center drift atoms // Phys. Plasmas, Vol. 11, No. 5, 2004, p.2382-2393
8. S. G. Kuzmin and T. M. O’Neil. Motion of guiding center drift atoms in the electric and magnetic f

СПИСОК ДОКЛАДОВ

ВЫДЕЛЕНИЕ В СЛОЖНОМ ПРИРОДНОМ ОБЪЕКТЕ ЗОН, ВЕЩЕСТВО КОТОРЫХ РАВНОВЕСНО ПО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМ ПАРАМЕТРАМ С ВЕЩЕСТВОМ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ (НА ПРИМЕРЕ ОЗ. БАЙКАЛ) Астраханцева О.Ю.	3
МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАРЯДА В N-P-ПЕРЕХОДЕ Н.М. Богатов	10
ОБ ОДНОМ ЧАСТНОМ РЕШЕНИИ ЛИНЕАРИЗОВАННЫХ УРАВНЕНИЙ НАВЬЕ-СТОКСА В ПРОСТРАНСТВЕННОМ СЛУЧАЕ Н.М.Бодунов	15
НАХОЖДЕНИЕ НАИБОЛЕЕ ЗНАЧИМЫХ ПЕРЕМЕННЫХ В ЗАДАЧАХ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ФУНКЦИИ ПО НАБЛЮДЕНИЯМ Е.А.Вейсов, В.Н.Кириченко, Е.Д.Михов, Е.Д. Михова	21
МЕТОДЫ ПОВЫШЕНИЯ НАДЕЖНОСТИ В ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ Е.А. Вейсов, В.Н. Кириченко, Е.Д. Михов	27
ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТОЧНОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ГНСС-ПРИЕМНИКОВ А.Б. Гладышев, В.Н. Ратушняк, Е. А. Вейсов	34
МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАНИЙ ГАЗОВОЙ ПОЛОСТИ В АНИЗОТРОПНОЙ НЕНЬЮТОНОВСКОЙ ЖИДКОСТИ Р.Н.Голых, В.Н.Хмелёв, Р.С.Доровских, Е.В.Ильченко, В.А.Шакура	39
МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ ЧЕРЕЗ РАЗЛИЧНЫЕ СРЕДЫ В ПЛОСКОМ СЛУЧАЕ Г.В.Дружинин, Н.М.Бодунов	44
ВЛИЯНИЕ НЕБЛИЖАЙШИХ СОСЕДЕЙ НА ДИАГРАММЫ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ ИЗИНГОВСКОГО МАГНЕТИКА Ж.В.Дударева	50
ВЛИЯНИЕ НЕОДНОРОДНОСТИ НАНОЧАСТИЦ И ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ НА ДИСПЕРСИОННЫЕ СВОЙСТВА ОПТИЧЕСКИХ ПЛАЗМОННЫХ ВОЛНОВОДОВ В.И. Закомирный, И.Л. Рассказов, С.В. Карпов, С.П. Полютов	55
РАЗВИТИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ГРАФАХ В ВИДЕ МНОГОКОНТУРНЫХ СХЕМ ИЛИ ДЕРЕВЬЕВ	60

Каганович Б.М, Зароднюк М.С., Якшин С.В.

ПОСТРОЕНИЕ БИФУРКАЦИОННОГО ПОРТРЕТА ДЛЯ РЕАКЦИИ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ ОКСИДА УГЛЕРОДА НА ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА О.Э.Лешаков, Е.А.Мамаш	65
ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКАЯ ФУНКЦИЯ СКОРОСТИ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ СТОХАСТИЧЕСКОМ ОНДУЛЯТОРЕ В.М.Логинов	70
АНАЛИЗ ВНЕШНИХ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ФАКТОРОВ, СОПУТСТВУЮЩИХ СИЛЬНЫМ ЗЕМЛЕТРЯСЕНИЯМ А.Н. Мацулев, К.В. Симонов	75
МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТА ИОННЫХ РАСТВОРОВ В НАНОФИЛЬТРАЦИОННЫХ МЕМБРАНАХ И.И. Рыжков, А.В. Минаков, Д.В. Лебедев	81
ТЕРМОДИФфуЗИОННОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ В БИНАРНЫХ СМЕСЯХ С ФАЗОВЫМ РАССЛОЕНИЕМ ЖИДКОСТЬ – ЖИДКОСТЬ И.И. Рыжков, С.В. Козлова, М.И. Медведева	85
МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФРАКЦИИ МОНОХРОМАТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЛАЗЕРА НА МОНОСЛОЕ ЭРИТРОЦИТОВ Г.П.Саркисян, А.Г.Саркисян, А.М. Даниелян	89
О ПРИМЕНЕНИИ ЦЕННОСТНОГО ПОДХОДА ДЛЯ АНАЛИЗА МЕХАНИЗМОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИФфуЗИИ Г.П.Саркисян, А.Г.Саркисян, А.М. Даниелян	94
МЕТОДЫ И ПОКАЗАТЕЛИ РЕДУКЦИИ ДАННЫХ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ПО ПРЕЦЕДЕНТАМ С.А. Субботин	100
ОЦЕНКА ВОЗДЕЙСТВИЯ ФАКТОРОВ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ НА ЗДОРОВЬЕ НАСЕЛЕНИЯ Г. КРАСНОЯРСКА О.В. Тасейко, Е.Н. Бельская	108
НОВЫЕ СЛЕДСТВИЯ ГИПОТЕЗЫ ДИНАМИЧЕСКОГО СКЕЙЛИНГА ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА В.Н. Удодов	112
ВЫЯВЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ РЕЖИМОВ И УСЛОВИЙ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КОАГУЛЯЦИИ ЖИДКОДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ В ИМПУЛЬСНОМ РЕЖИМЕ В.Н.Хмелёв, Р.Н.Голых, Р.С.Доровских, Е.В.Ильченко,	119

В.А.Шакура, В.А.Нестеров

ОБ УСЛОВИЯХ СКВОЗНОГО ПРОХОЖДЕНИЯ АСТЕРОИДНЫХ
ТЕЛ ЧЕРЕЗ АТМОСФЕРУ ЗЕМЛИ БЕЗ СТОЛКНОВЕНИЯ
С ЕЕ ПОВЕРХНОСТЬЮ 123

Д. Е. Хренников, А. К. Титов, А. Е. Ершов, С. В. Карпов

ОБ ОПТИМАЛЬНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ ПИРОЛИЗА В
КИНЕТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ 129

С.Б. Цыбенова, В.И. Быков, С.Д. Варфоломеев, С.М. Ломакин

АНАЛИЗ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО РАЗНЫМ
ОБЛАСТЯМ ЗНАНИЯ, ПОДДЕРЖНЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ 134

Р.А. Чиженкова

ВОЗДЕЙСТВИЕ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ СОПРОТИВЛЕНИЯ НА ТЕЧЕНИЕ
ЖИДКОСТИ В ЗАЗОРЕ МЕЖДУ ВРАЩАЮЩИМИСЯ ЦИЛИНДРАМИ 139

О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль, И.А. Концевой

РАЗРАБОТКА ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ ТЕХНОЛОГИИ УПРАВЛЕНИЯ
ДЛЯ СЛОЖНОЙ ИСКУССТВЕННОЙ ИММУННОЙ СИСТЕМЫ
ТЕРАПИИ ЛЕКАРСТВЕННЫМИ СРЕДСТВАМИ 144

Ширяева О.И., Денисова Т.Г.

РАЗРАБОТКА ГЕОЛОГО-ГЕОХИМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ “
МЕГАСИСТЕМА “ВЕЩЕСТВО ВОД ОЗЕРА БАЙКАЛ – ВЕЩЕСТВО
ПОТОКОВ ПРИРОДНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ”” 149

Астраханцева О.Ю.

РАСШИРЕНИЕ УЛЬТРАХОЛОДНОЙ ЭЛЕКТРОН-ИОННОЙ
ПЛАЗМЫ В ОДНОРОДНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ 155

И. Л. Исаев, А. Е. Ершов, С. А. Филимонов, А. П. Гаврилюк

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
Астраханцева Ольга Юрьевна	664033, Иркутск, Фаворского, 1а, Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН E-mail: astra@igc.irk.ru	3, 149
Бельская Екатерина Николаевна	660037, г. Красноярск, пр. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный аэрокосмический университет E-mail: taseiko@gmail.ru	108
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	10
Бодунов Николай Михайлович	420111, г. Казань, ул.К.Маркса, д.10, КГТУ-КАИ, кафедра ПЛА, (843) 236-52-42, 231-03-25, 231-03-16 E-mail: bodunov_nm@mail.ru	15, 44
Быков Валерий Иванович	119334, Москва, ул. Косыгина, д.4, Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН E-mail: vibykov@deom.chph.ras.ru	129
Варфоломеев Сергей Дмитриевич	119334, Москва, ул. Косыгина, д.4, Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН E-mail: sdvarf@sky.chph.ras.ru	129
Вейсов Евгений Алексеевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский Федеральный Университет E-mail: eveisov@sfu-kras.ru	21, 27, 34
Гаврилюк Анатолий Петрович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: glyukonat@icm.krasn.ru	155
Гладышев Андрей Борисович	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский Федеральный Университет E-mail: a-glonass@yandex.ru	34
Голых Роман Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	39, 119
Даниелян Артур Мгеревич	Республика Армения, г.Ереван, 0014, ул. П. Севака, 5/2, Институт химической физики им. А.Налбандяна, т. (+374 10) 28 14 81 E-mail: arthur.danielyan@hotmail.com	89, 94
Денисова Татьяна Геннадьевна	050010, Республика Казахстан, Алматы, ул. Пушкина, 125, Институт информационных и вычислительных технологий КН МОН РК E-mail: elkaz@mail.ru	144
Доровских Роман Сергеевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: dorovskih_roman@mail.ru	39, 119

Дружинин Георгий Владимирович	420111, г. Казань, ул.К.Маркса, д.10, КГТУ-КАИ, кафедра ПЛА, (843) 236-52-42, 231-03-25, 231-03-16 E-mail: druzhinin.1944@mail.ru	44
Дударева Жанна Владимировна	655017, Абакан, пр. Ленина, 90, ХГУ им. Н.Ф. Катанова, E-mail: dudareva82@gmail.com	50
Ершов Александр Евгениевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: alexander.ershov@icm.krasn.ru	123, 155
Закомирный Вадим Игоревич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: vi.zakomirnyi@gmail.com	55
Зароднюк Максим Сергеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: max@isem.sei.irk.ru	60
Ильченко Евгений Владимирович	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: iev@bti.secna.ru	39, 119
Исаев Иван Леонидович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: 1@crownet.ru	155
Каганович Борис Моисеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: thermo@isem.sei.irk.ru	60
Карпов Сергей Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН E-mail: karpov@iph.krasn.ru	55, 123
Кириченко Валерий Николаевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский Федеральный Университет E-mail: eveisov@sfu-kras.ru	21, 27
Козлова Софья Владимировна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: sonique@icm.krasn.ru	85
Концевой Иван Александрович	Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т Октября, 48, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого E-mail: ivankon@yandex.ru	139
Кроль Дмитрий Григорьевич	Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т Октября, 48, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого E-mail: dk_zaoch@gstu.by	139
Лебедев Денис Владимирович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: denis.v.lebedev@gmail.com	81

Лешаков Олег Эдуардович	667000, г. Кызыл, ул. Интернациональная, 117а, Тувинский институт комплексного освоения природных ресурсов СО РАН E-mail: o_leshakov@mail.ru	65
Логинов Валерий Михайлович	660049, Красноярск, ул. Ады Лебедевой, 89, Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева E-mail: valog_1949@mail.ru	70
Ломакин Сергей Модестович	119334, Москва, ул. Косыгина, д.4, Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН E-mail: lomakin@sky.chph.ras.ru	129
Мамаш Елена Александровна	630090, г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 6, Институт вычислительных технологий СО РАН E-mail: elenamamash@gmail.com	65
Мацулев Александр Николаевич	660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 24, Институт химии и химической технологии СО РАН E-mail: matsulev@icct.ru	75
Медведева Мария Ивановна	660074, г. Красноярск, ул. Киренского 26, корп. УЛК, Институт космических и информационных технологий СФУ E-mail: mimedvedeva@rambler.ru	85
Минаков Андрей Викторович	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский Федеральный Университет E-mail: tov-andrey@yandex.ru	81
Михов Евгений Дмитриевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский Федеральный Университет E-mail: edmihov@mail.ru	21, 27
Михова Евгения Дмитриевна	660037, г. Красноярск, пр. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный аэрокосмический университет E-mail: soldatova90@mail.ru	21
Нестеров Виктор Александрович	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: nva@bti.secna.ru	119
Полутов Сергей Петрович	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: spolyutov@sfu-kras.ru	55
Рассказов Илья Леонидович	660041, г. Красноярск, Сибирский федеральный университет E-mail: il.rasskazov@gmail.com	55
Ратушняк Василий Николаевич	660041, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, Сибирский Федеральный Университет E-mail: Oborona-81@ya.ru	34

Рыжков Илья Игоревич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, E-mail: rii@icm.krasn.ru	81, 85
Саркисян Андраник Грачьяевич	Республика Армения, г.Ереван, 0014, ул. П. Севака, 5/2, Институт химической физики им. А.Налбандяна, т. (+374 10) 28 14 81 E-mail: microandik@gmail.com	89, 94
Саркисян Грачья Паргевович	660028, Красноярск, просп. Свободный, 79, Сибирский федеральный университет E-mail: hrachya_sargsyan@mail.ru	89, 94
Симонов Константин Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: simonovkv@icm.krasn.ru	75
Субботин Сергей Александрович	Запорожский национальный технический университет, Украина, 69063, Запорожье, ул. Жуковского, 64, т.: +38-(097) 355-61-55 E-mail: subbotin.csit@gmail.com	100
Тасейко Ольга Викторовна	660037, г. Красноярск, пр. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный аэрокосмический университет E-mail: taseiko@gmail.ru	108
Титов Андрей Константинович	660037, г. Красноярск, пр. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный аэрокосмический университет E-mail: andtit2001@gmail.com	123
Удодов Владимир Николаевич	655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163 E-mail: udodovv@hotmail.com	112
Филимонов Сергей Анатольевич	660036, Академгородок, ООО «Торенс» E-mail: glyukonat@icm.krasn.ru	155
Хмелёв Владимир Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: vnh@bti.secna.ru	39, 119
Хренников Даниил Евгеньевич	660037, г. Красноярск, пр. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный аэрокосмический университет E-mail: karpov@iph.krasn.ru	123
Цыбенова Светлана Батожаргаловна	119334, Москва, ул. Косыгина, д.4, Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН E-mail: tsybenova@mail.ru	129
Чиженкова Рогнеда Александровна	Институт биофизики клетки РАН, г. Пущино Московской области, 142290, Тел.: (4967)739-196 E-mail: chizhenkova@mail.ru	134

Шабловский Олег Никифорович	Республика Беларусь, 246746, г. Гомель, пр-т Октября, 48, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого E-mail: shablovsky-on@yandex.ru	139
Шакура Владислав Анатольевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	39, 119
Ширяева Ольга Ивановна	050010, Республика Казахстан, Алматы, ул. Пушкина, 125, Институт информационных и вычислительных технологий КН МОН РК E-mail: oshiryayeva@gmail.com	144
Якшин Сергей Владимирович	64033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: s.yakshin@sei.irk.ru	60

Научное издание

Моделирование неравновесных систем—2016

Материалы XVIV Всероссийского семинара 7 – 9 октября 2016 г.

Редактор М.Г. Садовский
Компьютерная верстка: М.Ю. Сенашова

Подписано в печать «6» сентября 2015 г. Формат 60 × 90/8. (А4)
Бумага офсетная. Печать плоская.
Усл. печ. л. 13,56. Уч.-изд. л. 13,81.
Тираж 500 экз. Заказ 14

Институт вычислительного моделирования СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок, 50, стр. 44
Тел/факс (391) 2907476
<http://icm.krasn.ru>

Отпечатано в типографии ИВМ СО РАН
660036, Красноярск, Академгородок