

МНС

2019

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМ – 2019**

**Красноярск
2019**

Министерство науки и высшего образования 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-2019

МАТЕРИАЛЫ
ДВАДЦАТЬ ПЕРВОГО ВСЕРОССИЙСКОГО СЕМИНАРА
4 – 6 октября 2019 года

Красноярск 2019

УДК 001.126 (571.51) (043)

М 74

Моделирование неравновесных систем: Материалы XXII Всероссийского семинара, / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова; – Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук, 2019. –151 с.

В сборнике представлены материалы XXII Всероссийского семинара «Моделирование неравновесных систем» (МНС–2019), проходившего в городе Красноярске 4–6 октября 2019 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, 2019

© Коллектив авторов, 2019

ISBN 978-5-6043558-1-7



9 785604 355817

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЖИМОВ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ КОГНИТИВНЫХ СИСТЕМ

С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова

МИРЭА – Российский технологический университет,
Физико-технологический институт, каф. метрологии и стандартизации,
fazilova@mirea.ru

Введение

Когнитивные системы (КС), являясь самоорганизующимися системами, обладают особым свойством неравновесной устойчивости, предполагающим способность функционирования системы как в устойчивом, так и в неустойчивом режимах. Вопросам исследования свойств неравновесной устойчивости был посвящен ряд работ [1-12].

Режим устойчивого функционирования характеризуется способностью возврата системы в исходный или близкий к исходному режим в условиях внутренних и внешних возмущающих воздействий.

Режим неустойчивого функционирования характеризуется крайними состояниями, при которых система перестает адекватно реагировать на изменение информационного потока, при этом связи между элементами ослабевают, и система распадается на независимые элементы.

Состояние системы зависит от таких факторов как количество элементов в составе системы, меры эффективности каждого отдельного структурного элемента (СЭ) и их попарных взаимодействий.

Цель работы - разработка нелинейной математической модели, отражающей динамику структурных изменений в системе.

Фундаментальным принципом теории устойчивости является принцип обратной связи. На отображении обратных связей (положительных и отрицательных) основаны имитационные динамические модели (ИДМ) Дж. Форрестера.

Модель неравновесной устойчивости

Адекватной моделью неравновесной устойчивости КС может служить, согласно [1-2], следующее нелинейное уравнение, характеризующее как устойчивое, так и неустойчивое функционирование системы (рис. 1)

$$\dot{H} = \frac{dH}{dt} = KH, \text{ где} \quad (1)$$

$$H = H_1 + H_2 = \left[- \sum_i P_i \log P_i \right] + \left[- \sum_i \sum_j P_{ij} \log P_{ij} \right] - \text{энтропия системы} \quad (2)$$

P_i - вероятность меры информативности i -го элемента;

P_{ij} - вероятность попарного взаимодействия.

$$K = \Delta I - \Delta JH, \quad (3)$$

ΔI – приращение интенсивности информационного потока на входе системы,

ΔJ – приращение интенсивности обработки информационного потока в системе;

ΔJH – параметр, характеризующий управление процессом формирования структуры, показатель функциональной организованности системы.

$$\begin{aligned}\dot{H} &= \Delta I H - \Delta J H^2 = -\Delta J \left(H^2 - \frac{\Delta I}{\Delta J} H \right) = \\ &= -\Delta J \left[H^2 - \frac{\Delta I}{\Delta J} H + \left(\frac{1}{2} \frac{\Delta I}{\Delta J} \right)^2 - \frac{\Delta I^2}{4 \Delta J^2} \right] = -\Delta J \left[\left(H - \frac{\Delta I}{2 \Delta J} \right)^2 - \frac{\Delta I^2}{4 \Delta J^2} \right], \quad (4)\end{aligned}$$

Корни данного уравнения: $H_0 = 0$, $H_1 = \frac{\Delta I}{\Delta J}$.

H_0 и H_1 – точки устойчивости.

H_2 – точка неустойчивости, соответствующая значению энтропии, при котором происходит распад системы на несвязные СЭ.

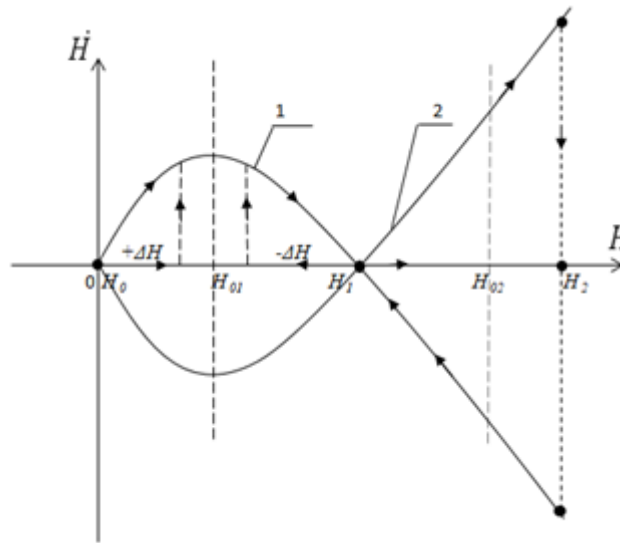


Рис. 1. Фазовый портрет функционирования

Согласно диаграмме устойчивого функционирования (кривая 1) при возрастании энтропии на отрезке H_0H_1 происходит «движение» от точки H_0 к H_1 , т.к. в этом случае действует механизм положительной обратной связи ($\Delta H > 0$, $\dot{H} > 0$), а при убывании энтропии (из точки H_1 в направлении точки H_2) происходит возврат в точку H_1 из-за воздействия отрицательной обратной связи ($\Delta H < 0$, $\dot{H} > 0$). На отрезке H_1H_2 при возрастании энтропии происходит возврат в точку H_1 из-за действия отрицательной обратной связи ($\Delta H > 0$, $\dot{H} < 0$), а при убывании энтропии происходит «движение» в направлении от точки H_2 к H_1 из-за воздействия положительной обратной связи ($\Delta H < 0$, $\dot{H} < 0$).

Согласно диаграмме неустойчивого функционирования (кривая 2) при возрастании энтропии на отрезке H_0H_1 происходит «движение» от точки H_1 к H_0 , т.к. действует механизм отрицательной обратной связи ($\Delta H > 0$, $\dot{H} < 0$), а при убывании энтропии происходит «движение» из точки H_1 в направлении точки H_0 из-за действия положительной обратной связи ($\Delta H < 0$, $\dot{H} < 0$). На отрезке H_1H_2 при возрастании энтропии система стремится к точке H_2 , из-за действия положительной обратной связи ($\Delta H > 0$, $\dot{H} > 0$), а при убывании энтропии происходит «движение» из точки H_1 в направлении точки H_2 из-за действия отрицательной обратной связи ($\Delta H < 0$, $\dot{H} > 0$).

Имитационная динамическая модель

Будем полагать, что информационный поток поступает в систему с некоторым темпом RT , причем темп прямо пропорционален текущему уровню знаний

(интеллекта) системы. В таком случае система сможет быть описана следующим уравнением:

$$LEV.K = LEV.J + DT.RT.JK, \quad (5)$$

где $LEV.K$ - величина уровня (интеллекта) в момент K ;

где $LEV.J$ - величина уровня (интеллекта) в момент J ;

$RT.JK$ - темп потока, поступающего в систему в течение интервала DT (от момента J до момента K).

Значение темпа на следующий интервал времени KL :

$$RT.KL = C.LEV.K. \quad (6)$$

Из этого уравнения следует, что темп постоянно увеличивается, т.к. он пропорционален уровню. Приращение уровня на каждый интервал времени DT также увеличивается, поскольку оно пропорционально темпу, т.е. значения темпа и уровня экспоненциально растут.

Представим данную ситуацию аналитически:

$$LEV.K - LEV.J = C \cdot DT.LEV.J \quad (7)$$

при $DT \rightarrow 0$ получим:

$$d[LEV(t)] = C \cdot LEV(t)dt, \quad (8)$$

$$\text{или } d[LEV(t)] / LEV(t) = C \cdot dt \quad (9)$$

Заменяя t на τ и интегрируя в пределах от нуля до t , получим

$$\int_{LEV(0)}^{LEV(t)} \frac{d[LEV(\tau)]}{LEV(\tau)} = \int_0^t C d\tau, \quad (10)$$

$$\text{т.е. } LEV(t) = LEV(0) \cdot e^{ct} \quad (11)$$

Кривая экспоненциального роста характеризуется временной постоянной $T = 1/C$ и временем удвоения T_d . Временная постоянная – это время, за которое значение уровня увеличивается в e раз. Она показывает, как быстро происходит рост в системе с положительной обратной связью. Время удвоения T_d - это время, за которое начальное значение уровня увеличивается вдвое. Итак, изменение интеллектуального потенциала на отрезке H_0H_{01} происходит по экспоненте (отрезок 1, рис. 2).

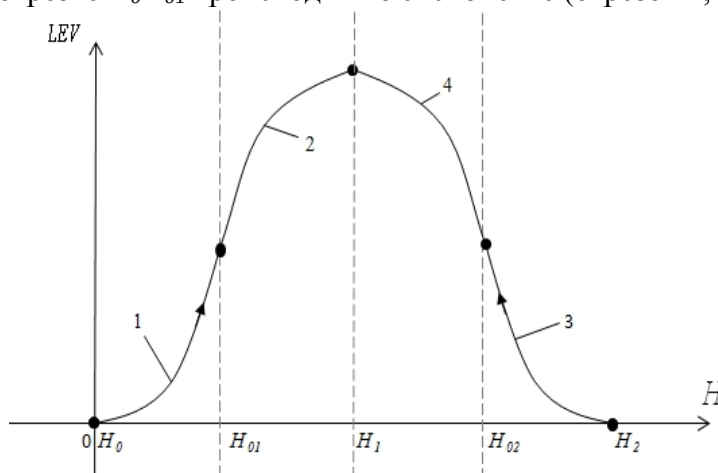


Рис. 2. Изменение интеллектуального потенциала

На отрезке $H_{01}H_1$ действует механизм отрицательной обратной связи.

При действии отрицательной обратной связи темп потока зависит от разности между фактическим и желаемым состоянием системы (потенциальный уровень

интеллекта)

$$DISC.K = GL - LEV.K \quad (12)$$

Модель данного состояния описывается следующими уравнениями

$$LEV.K = LEV.J + DT.RT.JK, \quad (13)$$

$$RT.KL = C \cdot DISC.K, \quad (14)$$

$$LEV.K - LEV.J = DT \cdot C(GL - LEV.K) \quad (15)$$

При $DT \rightarrow 0$ получим:

$$\frac{d[LEV(t)]}{GL - LEV(t)} = C \cdot dt \quad (16)$$

Меняя t на T и интегрируя, аналогично предыдущему, в пределах от нуля до t , получим

$$LEV(t) = GL + [LEV(0) - GL]e^{-Ct} = LEV(0) + [GL - LEV(0)] \cdot (1 - e^{-Ct}) \quad (17)$$

Характеристикой поведения контура отрицательной обратной связи является временная постоянная $T = 1/C$. За время равное T , уровень увеличивается на $(1 - 1/e)$ разности между GL и достигнутым значением уровня

$$LEV(T) = LEV(0) + [GL - LEV(0)](1 - e^{-CT}) \approx LEV(0) + 0,632[GL - LEV(0)] = LEV(0) + A \quad (18)$$

За время $3T$ значение уровня становится $\approx 0,95GL$, т.е. за это время система с отрицательной обратной связью приближается к значению GL .

Действие отрицательной обратной связи приводит к тому, что нарастание уровня интеллектуального потенциала происходит по затухающей (отрезок 2, рис.2) и достигает своего потенциального значения в точке H_1 . В точке H_1 изменение интенсивности (семантического содержания) информационного потока сопровождается изменением энтропии ($\Delta H > 0$, либо $\Delta H < 0$), однако, действие механизма отрицательной обратной связи (при $\Delta H > 0$, $\dot{H} < 0$, при $\Delta H < 0$, $\dot{H} > 0$) возвращает систему в точку равновесия (H_1), то есть, система достигла «своего» уровня интеллектуального потенциала. Возможна иная ситуация, когда исходное состояние системы характеризуется точкой H_2 . Это состояние почти полной неопределенности, когда связи между элементами разорваны, а их функции не определены. В этом случае при появлении информационного потока СЭ «включаются» в работу, начинает действовать механизм положительной обратной связи, что приводит к уменьшению энтропии и «движению» системы от H_2 к H_1 . Изменение уровня интеллектуального потенциала происходит по отрезкам 3 и 4 (рис. 2).

Компьютерное моделирование

Алгоритм предполагает предварительную оценку одним из известных методов вероятностных показателей эффективности СЭ и их взаимосвязей, определение энтропии показателей системы, согласно (1-4), и последующая идентификация состояния системы по значениям полученных показателей и ранее полученным фазовым портретом (рис. 1).

Для апробации алгоритма была использована КС, представляющая собой коллектив сотрудников некоторой научной лаборатории, состоящий из десяти человек. По результатам экспертной оценки был сформирован соответствующий матричный массив:

N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
P _i	0,1	0,1	0,1	0,2	0,8	0,7	0,8	0,8	0,6	0,1

Выводы

Предложенная имитационная динамическая модель когнитивной системы устанавливает режимы функционирования когнитивных систем, позволяющие определить показатели их устойчивого функционирования.

Разработана нелинейная математическая модель, отражающая механизм преобразований КС. Предложен алгоритм, позволяющий производить оценку состояния КС и, в случае необходимости, трансформации, направленные на достижение эффективно-устойчивого функционирования, в режимах самоорганизации и адаптации.

Список литературы

1. Анцыферов С.С. Общие принципы построения и закономерности функционирования интеллектуальных систем // Искусственный интеллект. — 2011. — № 3. — С.6-15.
2. Анцыферов С.С. Вопросы метрологического обеспечения интеллектуальных систем // Мир измерений. — 2012. — № 5. — С.46-51.
3. Анцыферов С.С. Стандартизация показателей качества продукции когнитивных технологий // Научные технологии. — 2014. — Т. 15. — № 7. — С.7-13.
4. Метрологическое обеспечение наукоемких технологий / С. С. Анцыферов, М. С. Афанасьев, А. С. Сигов. — М.: Изд. ИКАР, 2016. — 224 с.
5. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Показатели неравновесной устойчивости когнитивных систем // Проблемы искусственного интеллекта. — 2016. — № 2 (3). — С. 4-11.
6. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Стандартизация показателей неравновесной устойчивости когнитивных систем // Научные технологии. — 2017. — № 5. — С. 15-20.
7. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Определение показателей устойчивого функционирования нейроподобных систем // Материалы XXV Всероссийского семинара «Нейроинформатика, её приложения и анализ данных», 29 сентября – 1 октября 2017 г., Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2017. — С. 8-13.
8. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Имитационная динамическая модель когнитивных систем // Проблемы искусственного интеллекта. — 2017. — № 2 (5). — С. 32-39.
9. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Принципы построения и функционирования интеллектуальных систем обработки информации пространственно-временных полей // Научные технологии. — 2018. — № 2. — С. 36-45.
10. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Оценка показателей устойчивого функционирования интеллектуальных систем с активными элементами // Информатика и технологии. Инновационные технологии в промышленности и информатике (РНТК ФТИ-2018) Сборник трудов конференции. — 2018. — С. 286-291.
11. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Моделирование неравновесной устойчивости когнитивных систем // Моделирование неравновесных систем: Материалы XXI Всероссийского семинара, 5–7 октября 2018 г., Красноярск: Институт вычислительного моделирования Сибирского отделения Российской академии наук. — 2018. — С. 9–14.
12. Анцыферов С.С., Фазилова К.Н., Русанов К.Е. Оценка неравновесной устойчивости когнитивных систем // Научные технологии. — 2018. — № 11. — С. 14-19.

РАСЧЕТ НОРМАТИВОВ КАЧЕСТВА АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ДЛЯ ВЕЩЕСТВ НЕКАНЦЕРОГЕННОГО ДЕЙСТВИЯ

Е.Н. Бельская¹, О.В. Тасейко^{1,2}

¹Сибирский государственный университет науки и технологий
имени М.Ф. Решетнева, *ketrin_nii@mail.ru*

²Институт вычислительного моделирования СО РАН, *taseiko@gmail.com*

Характерной особенностью современной цивилизации является не только наличие огромного числа потенциально опасных факторов, способных создавать угрозу здоровью и жизни людей, но и осознание обществом необходимости взвешенного и осторожного подхода к выбору стратегий устранения или снижения угроз здоровью [1].

Загрязнение окружающей среды – один из значимых факторов, обуславливающих ухудшение здоровья и высокую смертность населения. Анализ существующих гигиенических нормативов содержания вредных веществ в атмосферном воздухе, принятых в России и за рубежом, показал различия как в методологии их установления, так и в значениях данных показателей.

Критериями качества атмосферного воздуха в городах России на сегодняшний день служат предельно-допустимые концентрации (ПДК), являющиеся гигиеническими нормативами. В Российской Федерации утверждено более 3000 нормативов ПДК: 656 ПДК среднесуточных и максимально-разовых [2] и 2495 ПДК рабочей зоны [3], это наиболее обширная из существующих систем нормирования качества воздушной среды.

В настоящее время происходит активный процесс интеграции России в международное сообщество, одним из приоритетных направлений которого в рамках сближения санитарного законодательства является гармонизация санитарно-гигиенических нормативов качества окружающей среды с международными стандартами [4].

Во многих странах Европы не существует подобных систем нормирования. Альтернативу концепции ПДК составляет система оценки рисков. Для оценки рисков вводится ряд параметров - маркеров риска, позволяющих оценивать опасность появления симптомов токсичности при кратковременном, продолжительном либо хроническом воздействии (экспозиции) определенных уровней загрязнения (концентрации загрязняющих веществ) для разных групп населения.

В настоящее время концепция оценки риска практически во всех странах мира и международных организациях рассматривается в качестве главного механизма разработки и принятия управленческих решений как на международном, государственном или региональном уровнях, так и на уровне отдельного производства или другого потенциального источника загрязнения окружающей среды [5].

Несмотря на очевидные преимущества методологии оценки риска, при реализации программ мониторинга качества атмосферного воздуха в населенных пунктах обойтись без использования предельно-допустимых концентраций сложно. Поэтому возникает необходимость учета рисков здоровью при определении уровней гигиенических ПДК.

В работе выполнен расчет нормативов качества атмосферного воздуха на основе концепции методологии оценки ингаляционного риска здоровью населения - предложены установленные значения $ПДК_{расчетная}$ приоритетных веществ неканцерогенного действия с учетом уровня приемлемого риска для населения и с использованием фактических среднегодовых концентраций веществ, на примере

Красноярска.

Согласно [5], при оценке риска развития неканцерогенных эффектов, как правило, исходят из предположения о наличии порога вредного действия, ниже которого вредные эффекты не развиваются. Однако для отдельных загрязнений окружающей среды наличие данного порога не доказано (например, взвешенные вещества).

Следует также отметить, что зарубежные стандарты устанавливают безопасные концентрации веществ в атмосферном воздухе для условий длительных, вплоть до пожизненных, периодов воздействия, в то время как ПДК разработаны для среднесуточного периода осреднения [4]. Оценка опасности осуществляется без учета коэффициентов поглощения веществ в органах дыхания, т.е. на основе воздействующих концентраций. Это обусловлено тем, что величины безопасных уровней воздействия химических веществ (RfC) всегда устанавливаются как экспозиционные (воздействующие), а не поглощенные. Следовательно, риски будут не реализованные, а потенциальные.

Оценка неканцерогенных рисков здоровью населения выполнена на основе экспоненциальной зависимости уровня риска от загрязнения атмосферного воздуха. Расчет риска здоровью при ингаляционном воздействии проводится по следующей формуле [6-9]:

$$\text{Risk} = 1 - \exp \left[-0,174 \cdot (C_{\text{с.г.}} / \text{ПДК}_{\text{с.с.}})^b / K_3 \right] \quad (1)$$

где $C_{\text{с.г.}}$ - среднегодовая концентрация, $\text{мг} \cdot \text{м}^{-3}$; K_3 - коэффициент запаса, $K_3=4,5$ [5]; $\text{ПДК}_{\text{с.с.}}$ - предельно-допустимая среднесуточная концентрация, $\text{мг} \cdot \text{м}^{-3}$; $b=1$ для веществ 2-4 классов опасности. Параметры b и K_3 рекомендованы для расчетов при времени экспозиции 25 лет.

Таким образом, риск является прогностической оценкой вероятности неблагоприятного исхода развивающейся (не закончившейся) ситуации. Приемлемый уровень риска допустим и обоснован, исходя как из экономических, так и социальных факторов [6, 7, 9], табл. 1.

Таблица 1

Уровни приемлемого риска

Вид риска	Приемлемое значение
Максимальный риск немедленного действия	
Вероятность ощущения населением неприятных запахов или развития иных рефлекторных реакций (кашель, слезотечение), дискомфортных состояний, головной боли и пр., что создает основной поток жалоб населения	0,02...0,05 (т.е. от 20 до 50 человек каждой тысячи людей, подвергнутых воздействию максимальных уровней загрязнения, могут проявлять рефлекторные реакции, тогда как в этом случае для большей части населения эти явления маловероятны)
Хронический (неканцерогенный) риск	
Вероятность развития симптомов хронической интоксикации на протяжении определенного времени, что количественно связывают с ростом общей заболеваемости без проявления каких-либо "специфических" форм заболеваний	0,02 (20 дополнительных случаев на 1000 человек), что соответствует интервалу допустимой статистической ошибки

Для выбора приемлемого значения неканцерогенного риска необходимо

учесть, что в абсолютном большинстве случаев химическое вещество, содержащееся в воздухе, воздействует на организм не изолированно, а в комплексе с другими химическими веществами, обладающими установленными эффектами синергизма и антагонизма. Кроме того, однотипность химического состава воздуха, потребляемого человеком в течение суток, различна. Поэтому в качестве приемлемой величины риска следует использовать величину 0,05 [6,10].

В табл. 2 представлен перечень приоритетных химических веществ неканцерогенного действия в атмосферном воздухе и наиболее вероятные группы болезней населения. Согласно [1], приведенный перечень может являться предметом детального рассмотрения при изучении влияния окружающей среды на здоровье различных групп населения.

Таблица 2

Приоритетные химические соединения
при изучении влияния окружающей среды на здоровье

Приоритетные химические вещества	Группы болезней
Взвешенные вещества	Заболевания сердечно-сосудистой системы и болезни органов дыхания
Углерод оксид	Заболевания сердечно-сосудистой и центральной нервной систем, системы кроветворения
Азота диоксид	Болезни органов дыхания, изменение состава крови, возможно кислородное голодание тканей
Фенол	Заболевания сердечно-сосудистой и центральной нервной систем, болезни органов дыхания и мочеполовой системы
Ксилол	Поражения кроветворных органов, заболевания ЦНС, дистрофические изменения в печени и почках, болезни органов дыхания
Диоксид серы	Болезни сердца и органов дыхания, не исключено действие на слизистые оболочки, воспаление носоглотки, трахеи, бронхиты, кашель, хрипота и боль в горле.

В табл. 3 приведены основные показатели опасности развития неканцерогенных эффектов - сведения, установленные различными гигиеническими нормативными документами: среднесуточные и максимально-разовые предельно-допустимые концентрации, референтные концентрации при хроническом и остром ингаляционном воздействии для вышерассмотренных веществ.

Для определения $ПДК_{расчетная}$, с использованием формулы 1, получено следующее соотношение:

$$ПДК_{расчетная} = \frac{C_{с.г.}}{\sqrt[b]{\frac{-K_3}{0,174} \ln(1 - Risk)}} \quad (2)$$

Учитывая уровень приемлемого индивидуального риска развития неканцерогенных эффектов $5 \cdot 10^{-2}$ год⁻¹ для населения, определены пересмотренные значения ПДК_{расчетная} для выше рассмотренных веществ, при расчетах использовались средние значения среднегодовых концентраций за 2015-2017гг по городу Красноярску по данным государственной сети наблюдений за качеством атмосферного воздуха, результаты расчетов приведены в табл. 3.

Таблица 3

Сведения о параметрах опасности развития неканцерогенных эффектов и пороговые значения концентраций

Вещество/ показатель	Взвешенные вещества	Углерода оксид	Азота диоксид	Фенол	Ксилол	Сера диоксид
Класс опасности	3	4	3	2	3	3
ПДК _{сс} (среднесут.) (мг/м ³)	0,15	3	0,04	0,006	0,2	0,05
ПДК _{мр} (маскимально- разовая), (мг/м ³)	0,5	5	0,085	0,01	0,2	0,5
Референтные концентрации для хронич. ингаляцион. воздействия RfC, (мг/м ³)	0,05	3	0,04	0,006	0,1	0,05
Референтные концентрации для острого ингаляционного воздействия, ARFC, (мг/м ³)	0,15	23	0,47	6	4,3	0,66
ПДК _{расчетная} для населения (мг/м ³)	0,074	0,92	0,025	0,0003	0,009	0,0006

Сравнение предложенных нормативов ПДК_{расчетная}, полученных с учетом реального загрязнения атмосферного воздуха города с действующими ПДК_{сс}, показывает, что полученные значения существенно ниже действующих нормативов.

В ходе дальнейших исследований будут определены расчетные среднегодовые нормативы ПДК с учетом реального влияния загрязнения на здоровье населения для веществ неканцерогенного действия, поступающих в организм человека не только ингаляционным, но и пероральным путем. Кроме того, предложенный подход может применяться для пересмотра производственных нормативов ПДВ и уточнения сумм ущербов, связанных с воздействием загрязнения атмосферного воздуха на здоровье населения.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда

фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта №18-47-240006: «Методы и информационные технологии оценки рисков развития социально-природно-техногенных систем промышленного региона».

Список литературы

1. "Руководство по комплексной профилактике экологически обусловленных заболеваний на основе оценки риска". М. 2017 г. 68 стр. E-print: <https://static-3.rosminzdrav.ru/system/attachments/attaches/000/036/600/original/Руководство.pdf?1512992582> (дата обращения: 20.06.2019).
2. Гигиенические нормативы ГН 2.1.6.3492-17. "Предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе городских и сельских поселений" (с изменениями на 31 мая 2018 года). Утверждены постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации от 22 декабря 2017 года N 165.
3. Гигиенические нормативы 2.2.5.3235-18. "Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны". Утверждены постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации от 13 февраля 2018 года N 25.
4. Атискова Н.Г. Опыт обоснования гармонизированной среднегодовой ПДК марганца в атмосферном воздухе // Актуальные проблемы безопасности и оценки риска здоровью населения при воздействии факторов среды обитания: материалы Всероссийской научно-практической конференции с международным участием / под общ. ред. д-р мед. наук, профессора А.Ю. Поповой, академика РАН Н.В. Зайцевой. – Пермь: Книжный формат, 2014. - С 683-687.
5. "Руководство по оценке риска для здоровья населения при воздействии химических веществ, загрязняющих окружающую среду. Руководство. Р 2.1.10.1920-04" (утв. Главным государственным санитарным врачом РФ 05.03.2004)
6. Фрумин Г.Т. Оценка риска для здоровья населения Санкт-Петербурга при ингаляционном воздействии взвешенных веществ и бенз(а)пирена. Безопасность жизнедеятельности №2, 2011. - С.38-41.
7. Маймулов В.Г., Нагорный С.В., Шабров В.А. Основы системного анализа в эколого-гигиенических исследованиях. - СПб.: ГМА им.И.И.Мечникова, 2000.- С.117.
8. МР 2.1.4.0032-11. 2.1.4. Питьевая вода и водоснабжение населенных мест. Интегральная оценка питьевой воды централизованных систем водоснабжения по показателям химической безвредности (утв. Главным государственным санитарным врачом РФ 31.07.2011)
9. Фрумин Г.Т. Диагностика, оценка и процессы управления экологическими рисками в городской среде. // В кн.: Экология и гидрометеорология больших городов и промышленных зон [Россия-Мексика]. Том II. Мониторинг окружающей среды / под ред. Л.Н.Карлина и В.А.Шелутко. - СПб.: Изд. РГГМУ, 2010. - С.164.
10. МР 2.1.4.00032-11. Интегральная оценка питьевой воды централизованных систем водоснабжения по показателям химической безвредности: Методические рекомендации.- М.: Федеральный центр гигиены и эпидемиологии Роспотребнадзора, 2012.-31с.

ОБРАЗОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЕ

Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, М.С. Коваленко

Кубанский государственный университет, *bogatov@phys.kubsu.ru*

Введение

Радиационные дефекты влияют на физические процессы и изменяют параметры полупроводниковых приборов [1 – 4]. Образование радиационных дефектов в условиях воздействия ионизирующих излучений на полупроводниковые приборы является одной из причин их деградации [4]. Процессы формирования радиационных дефектов активно изучаются [5 – 7]. Эти процессы являются неравновесными, кроме того, следует учитывать неравновесные условия эксплуатации и структуру приборов.

В [8] показано, что вероятность разделения пар Френкеля зависит от положения уровня Ферми в запрещенной зоне и температуры. Зависимость количества первичных радиационных дефектов (ПРД) и вторичных радиационных дефектов (ВРД) в кремнии от примесного состава и температуры процесса облучения электронами и протонами промоделирована в [9]. Расчет изменения количества ПРД, созданных низкоэнергетическими протонами в кремнии, в зависимости от концентрации доноров и температуры облучения позволил сделать вывод о более высокой радиационной стойкости кремниевых структур с поверхностным n^+-p переходом по сравнению со структурами с p^+-n переходом [10]. В работе [7] показано, что в максимуме распределения значение числа радиационных дефектов, созданных в диффузионном слое n^+-p перехода низкоэнергетическими протонами, при температуре образцов $T_p = 83$ К значительно меньше, чем при $T_p = 300$ К. Перечисленные закономерности обусловлены зависимостью вероятности разделения междоузельного кремния Si_i и вакансии V от температуры и положения уровня Ферми в запрещенной зоне. В [11] показано, что область пространственного заряда (ОПЗ) реального несимметричного n^+-p перехода содержит область, обогащенную электронами с изменяющейся концентрацией. Концентрация носителей заряда изменяется в неравновесном состоянии, например, при протекании электрического тока через n^+-p переход. Обобщение моделей радиационного дефектообразования в неоднородных полупроводниковых структурах на случай неравновесных условий облучения является актуальной научной задачей.

Цель работы – расчет образования первичных радиационных дефектов в полупроводниковой структуре в неравновесных условиях стационарного транспорта носителей заряда.

Расчет образования первичных радиационных дефектов

Концентрация неравновесных электронов n и дырок p в полупроводниках в приближении локального равновесия выражается формулами (1):

$$n = N_c e^{\frac{F_n - E_c + q\varphi}{kT}}, \quad p = N_v e^{\frac{-F_p + E_v - q\varphi}{kT}}. \quad (1)$$

В (1) N_c – эффективная плотность электронных состояний в окрестности дна зоны проводимости, F_n – квазиуровень Ферми электронов, E_c – положение дна зоны проводимости, q – элементарный заряд, φ – потенциал внутреннего электрического поля, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, N_v – эффективная плотность электронных состояний в окрестности вершины валентной зоны, E_v – положение вершины валентной зоны.

Система уравнений транспорта носителей заряда в неоднородных полупроводниках имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{j}_n = -\mu_n n \left(-\vec{\nabla} \varphi + \frac{1}{q} \vec{\nabla} E_c \right) - D_n \vec{\nabla} n + D_n n \vec{\nabla} \ln N_c, \\ \vec{j}_p = \mu_p p \left(-\vec{\nabla} \varphi + \frac{1}{q} \vec{\nabla} E_v \right) - D_p \vec{\nabla} p + D_p p \vec{\nabla} \ln N_v, \\ \frac{\partial n}{\partial t} + (\vec{\nabla}, \vec{j}_n) = G - R, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + (\vec{\nabla}, \vec{j}_p) = G - R, \\ \Delta \varphi = -\frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} (p - n + N_D^+ - N_A^-) \end{array} \right. \quad (2)$$

В (2) $\vec{j}_n$ – поток электронов, μ_n – подвижность электронов, D_n – коэффициент диффузии электронов, $\vec{j}_p$ – поток дырок, μ_p – подвижность дырок, D_p – коэффициент диффузии дырок, G – скорость объемной генерации, а R – скорость объемной рекомбинации электронно-дырочных пар, N_D^+ – концентрация ионизованных доноров, N_A^- – концентрация ионизованных акцепторов.

В стационарных условиях система уравнений (2) преобразуется к системе уравнений (3) для неизвестных переменных F_n , F_p , φ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\Delta F_n}{q} + \left(\left(\frac{\vec{\nabla}(F_n - E_c + q\varphi(x))}{kT} + \vec{\nabla} \ln N_c + \vec{\nabla} \ln \mu_n \right), \frac{\vec{\nabla} F_n}{q} \right) = -\frac{G - R}{\mu_n n(x)}, \\ \frac{\Delta F_p}{q} + \left(\left(\frac{\vec{\nabla}(-F_p + E_v - q\varphi(x))}{kT} + \vec{\nabla} \ln N_v + \vec{\nabla} \ln \mu_p \right), \frac{\vec{\nabla} F_p}{q} \right) = \frac{G - R}{\mu_p p(x)}, \\ \Delta \varphi = -\frac{q}{\varepsilon \varepsilon_0} \left(N_v e^{\frac{-F_p + E_v - q\varphi}{kT}} - N_c e^{\frac{F_n - E_c + q\varphi}{kT}} + N_D^+ - N_A^- \right). \end{array} \right. \quad (3)$$

В равновесии $F_n = F_p = F$, где F – уровень Ферми, принимающий постоянное значение в объеме полупроводника.

Вероятность разделения междоузельного кремния Si_i и вакансии V зависит от зарядового состояния пары [8, 10]. Энергетический уровень пары Френкеля в запрещенной зоне кремния расположен близко ко дну зоны проводимости $E_f = E_c - 0,07$ эВ, поэтому реализуются переходы электронов между энергетическими уровнями пары и зоны проводимости. В случае транспорта носителей заряда формулу для вероятности заряженного состояния связанной пары Френкеля изменим, подставив F_n вместо F :

$$\omega_1 = \left[1 + g_1 \exp \left\{ \frac{F_n - E_f}{kT} \right\} \right]^{-1}. \quad (4)$$

В формуле (4) F_n является решением системы уравнений (3), $g_1 = 0,5$. Вероятность разделения нейтральной пары описывается формулой (5):

$$\omega_2 = \left[1 + \exp \left\{ -\frac{T_d - T_{dm}}{kT} \right\} \right]^{-1}. \quad (5)$$

В формуле (5) $T_d = 12,9$ эВ – пороговая энергия формирования связанной пары

Френкеля, $T_{dm} = 21$ эВ – пороговая энергия формирования разделённой пары Френкеля.

Вероятность разделения связанной пары Френкеля с учётом зарядового состояния дефекта определяется величиной ω_f . Для разделённых Si_I и V , расположенных в пределах сферы реакции радиусом $r_{vi} = 2,8a$ (a – период решетки), вероятность избежать аннигиляции определяется величиной ω_d [8, 10]:

$$\omega_f = \omega_1\omega_c + (1 - \omega_1\omega_c)\omega_2, \quad \omega_d = 6\omega_1\omega_c + (1 - 6\omega_1\omega_c)\omega_3. \quad (6)$$

В формулах (6) ω_c – дополнительный параметр, характеризующий вероятность смещения атома кремния в пространственное положение, допускающее заряженное состояние, $\omega_c = 0,00887$, а ω_3 – вероятность избежать аннигиляции для нейтральной разделённой пары Френкеля:

$$\omega_3 = \left[1 + \exp \left\{ - \frac{E^{iv} - E_m^i}{kT} \right\} \right]^{-1}. \quad (7)$$

В формуле (7) E^{iv} – энергия барьера обратного перехода, E_m^i – энергия активации миграции междоузельного кремния ($E^{iv} = 0$, $E_m^i = 0,13$ эВ).

Вероятности ω_f и ω_d (6) зависят от квазиуровня Ферми электронов F_n через ω_1 (формула (4)). Линейные скорости генерации, то есть среднее число междоузельных атомов кремния G_{Si} , вакансий G_V , дивакансий G_W , созданных одной ионизирующей частицей на единице длины проективного пробега, рассчитывались при $T = 300$ К по формулам работ [12, 13], содержащим ω_f , ω_d .

На рисунке 1 показана рассчитанная зависимость линейной скорости генерации междоузельного кремния G_{Si} от энергии протона E_p и положения квазиуровня Ферми электронов ниже дна зоны проводимости $F_{cn} = E_c - F_n$. Для низкоэнергетических протонов максимальное значение G_{Si} (пик Брэгга) уменьшается при увеличении значения F_n до E_c в верхней четверти запрещённой зоны и не изменяется для значений F_n , лежащих в нижней части запрещённой зоны.

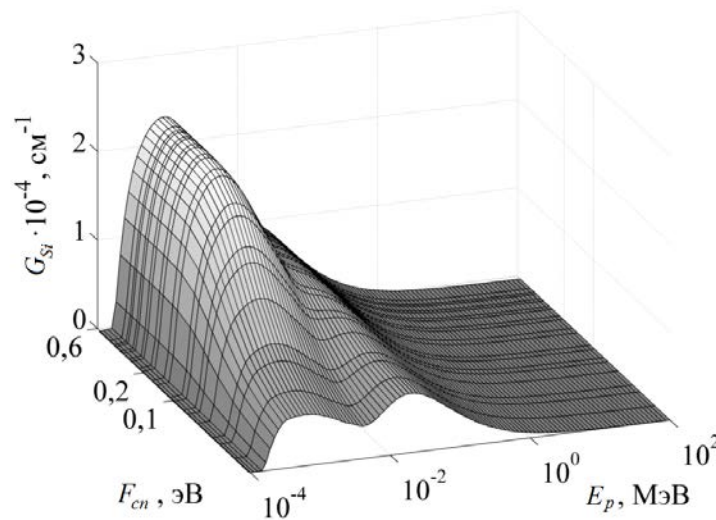


Рис.1. Зависимость линейной скорости генерации междоузельного кремния от энергии протона и положения квазиуровня Ферми в запрещенной зоне.

На рисунке 2 изображены сечения поверхности, представленной на рисунке 1, для $F_{cn} = const$. Пороговые значения энергий протона $E_{p1} = 1,57 \cdot 10^{-4}$ МэВ, $E_{p2} = 3,16 \cdot 10^{-4}$ МэВ и $E_{p4} = 1,50 \cdot 10^{-1}$ МэВ соответствуют максимальной энергии атома отдачи T_{dm} , $2T_{dm}$ и $T_{do} = 20$ КэВ – пороговая энергия образования областей разупорядочения. Пороговое значение $E_{p3} = 6,24 \cdot 10^{-3}$ МэВ соответствует максимальной энергии атома отдачи, при которой образуется ядро каскада смещений [12] с ненулевым объёмом.

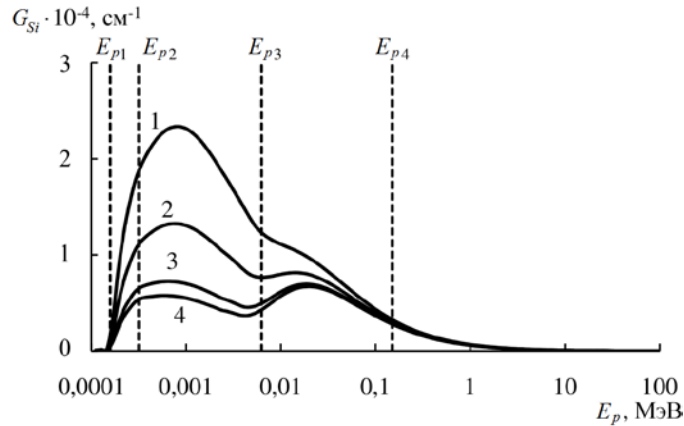


Рис.2. Зависимость G_{Si} от энергии протона для заданных значений F_{cn} :
1 – $F_{cn} = 0,562$ эВ, 2 – $F_{cn} = 0,0567$ эВ, 3 – $F_{cn} = 0,0265$ эВ, 4 – $F_{cn} = 0,0167$ эВ.

На зависимостях G_{Si} от E_p при $F_{cn} = const$ (рис. 2) присутствует два пика, соответствующих выходу SiI в каскаде смещений ($E_{p3} < E_p < E_{p4}$) и при разделении пары Френкеля ($E_{p2} < E_p < E_{p3}$). При $F_{cn} \approx 0,0265$ эВ оба пика имеют одинаковые максимальные значения $G_{Si} \approx 7,23 \cdot 10^4$ см⁻¹. При $F_{cn} < 0,0265$ эВ глобальный максимум расположен в области $E_{p3} < E_p < E_{p4}$. При $F_{cn} > 0,0265$ эВ глобальный максимум расположен в области $E_{p2} < E_p < E_{p3}$.

Закономерности и форма зависимостей G_v и G_{Si} аналогичны. На рисунке 3 представлена зависимость линейной скорости генерации дивакансий G_w от энергии протона E_p и положения квазиуровня Ферми электронов F_{cn} .

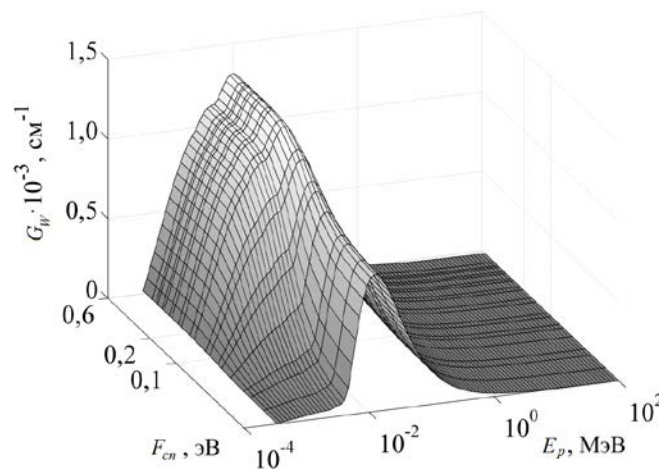


Рис.3. Зависимость линейной скорости генерации дивакансий от энергии протона и положения квазиуровня Ферми в запрещенной зоне.

На рисунке 4 показаны сечения поверхности, представленной на рисунке 3, для $F_{cn} = const$. Для всех рассчитанных значений F_{cn} в каждом сечении поверхности $G_W(F_{cn}, E_p)$ существует один максимум, расположенный в области энергии протонов $E_{p3} < E_p < E_{p4}$.

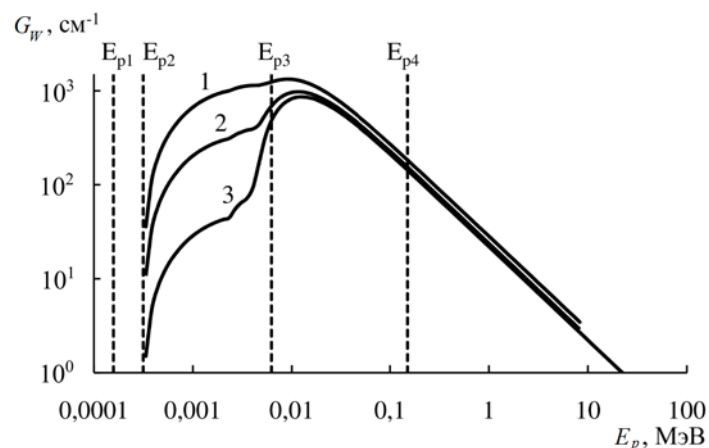


Рис.4. Зависимость G_W от энергии протона для заданных значений F_{cn} :

1 – $F_{cn} = 0,562$ эВ, 2 – $F_{cn} = 0,0567$ эВ, 3 – $F_{cn} = 0,0167$ эВ.

Заключение

В неравновесных условиях, вызванных высоким уровнем освещенности или протеканием электрического тока через n^+ - p переход в режиме прямого электрического смещения, увеличивается концентрация электронов и дырок. Если концентрация избыточных электронов превышает концентрацию равновесных ($\Delta n > n_0$), то положение квазиуровня Ферми электронов F_n приближается ко дну зоны проводимости E_c .

Из полученных результатов следует, что в той части объема кремниевой структуры, где выполняется условие $E_c - F_n < 0,25$ эВ, линейная скорость генерации ПРД, созданных низкоэнергетическими протонами, оказывается меньше, чем в оставшемся объеме.

В сильно несимметричном n^+ - p переходе условие $E_c - F_n < 0,25$ эВ выполняется в n^+ области и части ОПЗ не только в неравновесном случае, но и в равновесии [11]. Отмеченные особенности радиационного дефектообразования в этом случае подтверждены экспериментально в работе [7].

В энергетических потерях высокоэнергетических протонов возрастает вклад электронного торможения. Вследствие внутреннего фотоэффекта образуются электронно-дырочные пары, объёмная скорость генерации которых G входит в систему уравнений (3). Таким образом, процессы образования ПРД, генерации и транспорта носителей заряда в полупроводниковых структурах являются взаимосвязанными. Модели образования радиационных дефектов, основанные только на взаимодействии ионизирующего излучения с атомами решетки, являются неполными.

Список литературы

1. Челядинский А.Р. Дефектно-примесная инженерия в имплантированном кремнии / А.Р. Челядинский, Ф.Ф. Комаров // Успехи физических наук. — 2003. — Т.173. —

- №8. — С. 813–846.
2. Брудный В.Н. Радиационные эффекты в полупроводниках / В.Н. Брудный // Вестник Томского государственного университета. — 2005. — №285: Серия “Физика”. — С. 95–102.
 3. Соболев Н.А. Инженерия дефектов в имплантационной технологии кремниевых светоизлучающих структур с дислокационной люминесценцией / Н.А. Соболев // Физика и техника полупроводников. — 2010. — Т.44. — В.1. — С. 3–25.
 4. Iles P.A. Evolution of space solar cells / P.A. Iles // Solar Energy Materials & Solar Cells. — 2001. — V.68. — I.1. — P. 1–13.
 5. Kozlovski V.V. Effect of the Energy of Recoil Atoms on Conductivity Compensation in Moderately Doped n-Si and n-SiC under Irradiation with MeV Electrons and Protons / V.V. Kozlovski, A.A. Lebedev, V.V. Emtsev, G.A. Oganessian // Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B. — 2016. — V.384. — P. 100–105.
 6. Kozlovski V.V. Effect of Recoil Atoms on Radiation-Defect Formation in Semiconductors under 1-10-MeV Proton Irradiation / V.V. Kozlovski, A.E. Vasil'ev, A.A. Lebedev // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. — 2016. — V.10. — I.4. — P. 693–697.
 7. Агафонов Ю.А. Влияние радиационных дефектов, созданных низкоэнергетическими протонами в сильнолегированном слое, на характеристики кремниевых p^+-p-p^+ структур / Ю.А. Агафонов, Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, В.И. Зиненко, А.И. Коваленко, М.С. Коваленко, Ф.А. Колоколов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2018. — №10. — С. 86–91.
 8. Богатов Н.М. Моделирование разделения пар Френкеля в кремнии, образовавшихся под действием ионизирующих частиц / Н.М. Богатов, М.С. Коваленко // Моделирование неравновесных систем: Материалы XV Всероссийского семинара, 5 – 7 октября 2012 г. Красноярск. — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2012. — С. 11 – 16.
 9. Богатов Н.М. Расчет температурной зависимости концентрации вторичных радиационных дефектов в кремнии / Н.М. Богатов, М.С. Коваленко // Моделирование неравновесных систем: Материалы XVI Всероссийского семинара, 4 – 6 октября 2013 г. Красноярск. — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2013. — С. 14 – 18.
 10. Богатов Н.М. Моделирование образования первичных радиационных дефектов в кремнии при облучении низкоэнергетическими протонами / Н.М. Богатов, М.С. Коваленко // Моделирование неравновесных систем: Материалы XX Всероссийского семинара, 6 – 8 октября 2017 г. Красноярск. — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2017. — С. 17 – 21.
 11. Богатов Н.М. Моделирование распределения заряда в несимметричном p - r -переходе протонами / Н.М. Богатов // Моделирование неравновесных систем: Материалы XIX Всероссийского семинара, 7 – 9 октября 2016 г. Красноярск. — Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН. — 2016. — С. 10 – 14.
 12. Богатов Н.М. Моделирование областей разупорядочения в процессе радиационного дефектообразования / Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, А.В. Кленевский, М.С. Коваленко // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. — 2019. — Т.16. — №1. — С. 59 – 65.
 13. Богатов Н.М. Радиационные дефекты в кремнии, выращенном методом Чохральского / Н.М. Богатов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 1999. — №3. — С. 72–78.

РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ ПРИМЕНительно К ОРТОТРОПНОЙ ПЛАСТИНЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ

Н.М. Бодунов

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

Приведено решение задачи деформирования ортотропной пластины, которое основывается на аппроксимации искомого решения системой полиномиальных базисных функций. Геометрическая размерность краевой задачи понижается на единицу, так как строится аппроксимация решения только на границе.

Введение. Анизотропные тонкостенные элементы конструкций (пластины, оболочки) широко применяются в авиастроении, судостроении и в других отраслях промышленности. Создание новых композиционных материалов (КМ), а также разработка методов расчёта для определения свойств и описания поведения конструкций из КМ, является одним из приоритетных направлений в авиа- и ракетостроении [1,2]. Решение соответствующих задач анизотропной теории упругости связано с существенными математическими трудностями, поскольку исходная система уравнений представляет собой сложную систему дифференциальных уравнений в частных производных, часто в сочетании с непростой геометрией исходной области. Предлагаемый в работе подход к решению краевых задач теории упругости для ортотропных пластин непосредственно связан с математической проблемой расчета ответственных конструкций летательных аппаратов, которые всегда должны обладать прочностной надежностью при соответствующей массовой эффективности. Оценка напряжённо-деформированного состояния конструкций из КМ реализуется традиционными методами механики сплошной среды [3–6].

Постановка задачи. Однородные уравнения равновесия тонких упругих пластин в случае двумерных задач статической теории упругости имеют вид:

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} = 0. \quad (1)$$

Здесь $\sigma_x, \sigma_y, \tau_{xy}$ – компоненты тензора напряжений.

Деформированное состояние пластины определяется тремя компонентами тензора деформаций, которые при малых деформациях выражаются через проекции вектора перемещений $\vec{u}(u_x, u_y)$ по формулам

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_y = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad \gamma_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} = 0. \quad (2)$$

Компоненты тензора деформаций не являются независимыми и должны удовлетворять условию совместности

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon_y}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 \gamma_{xy}}{\partial x \partial y}. \quad (3)$$

Уравнения обобщенного закона Гука для ортотропной пластины имеют вид [5]:

$$\varepsilon_x = a_{11}\sigma_x + a_{12}\sigma_y, \quad \varepsilon_y = a_{12}\sigma_x + a_{22}\sigma_y, \quad \gamma_{xy} = a_{66}\tau_{xy}. \quad (4)$$

Здесь a_{ij} – упругие постоянные материала (коэффициенты деформации), которые через технические постоянные $E_1, E_2, \nu_{12}, \nu_{21}, G_{12}$ выражаются по следующим формулам:

$$a_{11} = \frac{1}{E_1}; \quad a_{22} = \frac{1}{E_2}; \quad a_{66} = \frac{1}{G_{12}}; \quad a_{12} = -\frac{\nu_{12}}{E_1} = -\frac{\nu_{21}}{E_2}; \quad E_1 \nu_{21} = E_2 \nu_{12}, \quad (5)$$

где $E_1 = E_x$, $E_2 = E_y$ – модули Юнга для растяжения и сжатия в направлении осей Ox и Oy ; $G_{12} = G_{xy}$ – модуль сдвига в плоскости Oxy ; $\nu_{12} = \nu_{xy}$, $\nu_{21} = \nu_{yx}$ – коэффициенты Пуассона.

Очевидно, что из соотношений (4), (5) следует, что

$$\sigma_x = b_{11}\varepsilon_x + b_{12}\varepsilon_y, \quad \sigma_y = b_{12}\varepsilon_x + b_{22}\varepsilon_y, \quad \tau_{xy} = b_{66}\gamma_{xy}. \quad (6)$$

$$\text{Здесь } b_{11} = \frac{E_1}{1 - \nu_{12}\nu_{21}}, \quad b_{22} = \frac{E_2}{1 - \nu_{12}\nu_{21}}, \quad b_{12} = \frac{E_1\nu_{21}}{1 - \nu_{12}\nu_{21}} = \frac{E_2\nu_{12}}{1 - \nu_{12}\nu_{21}}.$$

Подстановка выражений (6) в уравнения (1) с учетом соотношений (2) приводит к уравнениям равновесия ортотропной пластины в перемещениях:

$$b_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + G_{12} \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + (b_{12} + G_{12}) \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} = 0, \quad b_{22} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + G_{12} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + (b_{12} + G_{12}) \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} = 0. \quad (7)$$

Решение задачи. В работе [7] приведен алгоритм решения системы уравнений, подобной (7) применительно к решению плоской статической контактной задачи для ортотропной полосы. Алгоритм достаточно трудоемкий, но позволяющий найти полиномиальные решения заданной системы уравнений. Приведем более простое решение. Согласно работе [8] решение системы (7) можно выразить следующим образом:

$$u_x = -(b_{12} + G_{12}) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y}; \quad u_y = b_{11} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + G_{12} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}, \quad (8)$$

где функция $\varphi = \varphi(x, y)$ должна удовлетворять дифференциальному уравнению

$$\frac{E_1}{E_2} \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + \left(\frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12} \right) \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \varphi}{\partial y^4} = 0. \quad (9)$$

В случае изотропной пластины уравнение (9) является классическим бигармоническим уравнением. На основании формул (2), (6) и (8) напряжения $\sigma_x, \sigma_y, \tau_{xy}$ выражаются через функцию $\varphi(x, y)$ по следующим выражениям:

$$\sigma_x = G_{12} \left(-b_{11} \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^2 \partial y} + b_{12} \frac{\partial^3 \varphi}{\partial y^3} \right), \quad \tau_{xy} = G_{12} \left(-b_{12} \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x \partial y^2} + b_{11} \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3} \right),$$

$$\sigma_y = [b_{11}b_{22} - b_{12}(b_{12} + G_{12})] \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^2 \partial y} + b_{22}G_{12} \frac{\partial^3 \varphi}{\partial y^3}. \quad (10)$$

Отметим, что уравнение (9) является частным случаем уравнения [6]

$$\beta_0 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + \beta_1 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^3 \partial y} + \beta_2 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^2 \partial y^2} + \beta_3 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x \partial y^3} + \beta_4 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial y^4} = 0, \quad (11)$$

решение которого через полиномиальные базисные функции приведено в работе [7].

Учитывая, что $\beta_0 = \frac{E_1}{E_2}$, $\beta_1 = 0$, $\beta_2 = \frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12}$, $\beta_3 = 0$, $\beta_4 = 1$ выпишем решение

уравнения (9) через полиномиальные базисные функции

$$\varphi(x, y) = \sum_{\alpha=0}^N A_{\alpha} P_{\alpha}(x, y) = A_0 + A_1(x+y) + A_2(x^2 + xy + y^2) + A_3(x^3 + x^2y + xy^2 + y^3) +$$

$$\begin{aligned}
& + A_4 \left[x^4 - \left(\beta_0 + \frac{\beta_2}{6} \right) y^4 + x^3 y + x^2 y^2 + y^3 x \right] + \\
& + A_5 \left[x^5 - \left(5\beta_0 + \frac{\beta_2}{2} \right) xy^4 + x^4 y + x^3 y^2 + x^2 y^3 - \left(\frac{\beta_0}{5} + \frac{\beta_2}{10} \right) y^5 \right] + \dots + A_N P_N(x, y).
\end{aligned} \tag{12}$$

Здесь α – произвольное действительное число; $P_\alpha(x, y)$ – полиномы, являющиеся при различных значениях α решением уравнения (9); A_α – подлежащие определению произвольные коэффициенты, количество которых зависит от метода решения краевой задачи и оценки точности приближенного решения. Так как рассматривались только полиномиальные решения, то решения через трансцендентные функции не учитывались.

На контуре границы пластины (рисунок) условия задаются составляющими либо внешних усилий, действующих в точке контура с нормалью $\vec{n}$ (первая основная задача)

$$X_n = \sigma_x \cos(n, x) + \tau_{xy} \cos(n, y), \quad Y_n = \tau_{xy} \cos(n, x) + \sigma_y \cos(n, y), \tag{13}$$

либо смещений (вторая основная задача)

$$u_x(t) = g_1(t), \quad u_y = g_2(t), \tag{14}$$

t – точка, принадлежащая границе пластины.

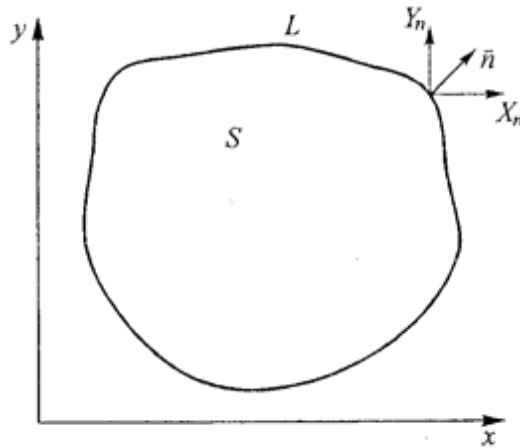


Рис. Расчетная схема

Коэффициенты разложения A_α , обеспечивающие наилучшую аппроксимацию граничных условий (13) или (14), найдем из условия минимальности функционала. На примере задания граничных условий (14) он запишется следующим образом:

$$F = \sum_{l=0}^1 \int_L \left[\left((u_x|_L - g_1(L))^{(l)} \right)^2 + \left((u_y|_L - g_2(L))^{(l)} \right)^2 \right] W_l dL, \tag{15}$$

где $W_0(L) > 0$ и $W_1(L) \geq 0$ – кусочно-непрерывные на границе L весовые функции, которые служат для настройки функционала в соответствии с желаемыми свойствами последовательности приближенных решений (например, $W_1(L)$ может быть кусочно-постоянной функцией, принимающей наибольшее значение на тех участках границы, где желательна более точная аппроксимация, и равной нулю там, где не требуется малости соответствующей невязки).

Задача минимизации функционала (15), как показано в работе [9], эквивалентна краевой задаче (7), (10). Предложенный метод дает возможность получить решения задач

деформирования ортотропных пластин в аналитическом виде. При этом существенно сокращает размерность алгебраической системы уравнений относительно неизвестных коэффициентов, так как строится аппроксимация решения только на границе.

Описанная в работе [7] процедура дает достаточно простой алгоритм для последовательного построения полиномиальных решений любой степени α по соответствующим рекуррентным формулам. Квадратурные формулы обеспечить большую скорость практических расчетов, что очень важно для решаемых в современных условиях задач многоцелевой оптимизации.

В случае решении краевых задач для пластин, ограниченных координатными линиями криволинейной системы координат решение поставленной выше задачи усложняется (это связано с нахождением производных различного порядка от функции $\varphi(x, y)$ по криволинейным координатам, что приводит к появлению различных степеней коэффициентов Ламе в знаменателях выражений (8) (10)). Для устранения указанных выше трудностей, можно воспользоваться результатами работы [10]. Введем безразмерные величины $\delta_i > 0$ ($i = 1, 2$) по формулам

$$\delta_1^2 + \delta_2^2 = \omega = \frac{E_1}{G_{12}} - 2\nu_{12}; \delta_1^2 \delta_2^2 = \lambda = \frac{E_1}{E_2}; \omega_2 - 4\lambda \geq 0; \omega > 0,$$

откуда ввиду симметрии этих формул имеем

$$\delta_1 = \sqrt{\frac{\omega + \sqrt{\omega^2 - 4\lambda}}{2}}, \delta_2 = \sqrt{\frac{\omega - \sqrt{\omega^2 - 4\lambda}}{2}}. \quad (16)$$

Опуская промежуточные преобразования, согласно работе [10], вместо формул (8) и (10) имеем более простые выражения для напряжений и перемещений:

$$\tau_{xy}^{(j)} = -\frac{a}{\delta_j} \frac{\partial I_j}{\partial y}; \sigma_x^{(j)} = -a\delta_j \frac{\partial I_j}{\partial x}; \sigma_y^{(j)} = -\frac{1}{\delta_j^2} \sigma_x^{(j)}; \quad (17)$$

$$u_x^{(j)} = -\frac{a(\delta_j^2 + \nu_{12})}{\delta_j E_1}; u_y^{(j)} = \frac{a\delta_j(\delta_{3-j}^2 + \nu_{12})}{E_1} \int \frac{\partial I_j}{\partial x} dy \quad (j = 1, 2), \quad (18)$$

где a – параметр, определяемый выбором исходной криволинейной системы координат; $I_j = I_j(x, y_j)$ – функции переменных x, y_j ($y_j = y/\delta_j$ – новые переменные). При этом

соблюдаются следующие равенства: $\frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x \partial y} = \frac{\delta_j a}{r_{12} \gamma_j} I_j$, $\gamma_j = \delta_1^2 \delta_2^2 + \delta_j^2 \nu_{12}$ ($j = 1, 2$), $r_{12} = \frac{G_{12} b_{12}}{\nu_{12}}$.

Здесь $\varphi_j = \varphi_j(x, y_j)$ – гармонические функции переменных x, y_j , т.е. функции φ_j удовлетворяют уравнению Лапласа

$$\Delta \varphi_j = \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_j}{\partial y_j^2} = 0. \quad (19)$$

В работах [7, 11] приведен алгоритм построения полиномиальных базисных функций для уравнений математической физики. Выпишем решение для уравнения (19)

$$U(x, y) = \sum_{\alpha=0}^N A_{\alpha} U_{\alpha}(x, y) = A_0 + A_1(c_{01}x + c_{11}y) + A_2[c_{02}(x^2 - y^2) + c_{12}xy] + \\ + A_3\left[c_{03}(x^3 - 3xy^2) + c_{13}\left(x^2y - \frac{y^3}{3}\right)\right] + \dots + A_N U_N(x, y). \quad (20)$$

Конкретные выражения полиномов $U_\alpha(x, y)$ зависят от значения коэффициентов $c_{0\alpha}$ и $c_{1\alpha}$, которые могут выбираться соответствующим образом. Выбирая в одном случае $c_{0\alpha} = 1$ и $c_{1\alpha} = 0$, а в другом – $c_{0\alpha} = 0$ и $c_{1\alpha} = 1$ получим два линейно независимых решения уравнения (19), используемые в решениях (17), (18).

Общие решения уравнений (1) и (7) на основании представлений (17) и (18) имеют вид

$$u_x = u_x^{(1)} + u_x^{(2)}, u_y = u_y^{(1)} + u_y^{(2)}, \sigma_x = \sigma_x^{(1)} + \sigma_x^{(2)}, \sigma_y = \sigma_y^{(1)} + \sigma_y^{(2)}, \tau_{xy} = \tau_{xy}^{(1)} + \tau_{xy}^{(2)}. \quad (21)$$

Решения (21) позволяют получать более простые выражения для перемещений и напряжений на границе ортотропной пластины, ограниченной координатными линиями криволинейной системы координат.

Заключение. Полученные результаты могут быть использованы при решении прикладных задач механики деформирования композиционных материалов, в том числе и для задач параметрической идентификации и обратных задач, например, уточнения физико-механических параметров, определяющих коэффициенты математических моделей на основе прочностного эксперимента.

Список литературы

1. Братухин А.Г. Современные технологии авиастроения / А.Г. Братухин, Ю.Л. Иванов, Б.Н. Марьин и др. – М.: – Машиностроение. – 1999. – 832 с.
2. Мэттьюз Р. Композиционные материалы. Механика и технология / Р. Мэттьюз, Р. Ролингс. – М. – Техносфера. – 2004. – 408 с.
3. Колтунов М.А. Упругость и прочность цилиндрических тел / М.А. Колтунов, Ю.Н. Васильев, В.А. Черных. – М.: – Высшая школа. – 1975. – 526 с.
4. Васильев В.В. Механика конструкций из композиционных материалов / В.В. Васильев. – М.: – Машиностроение. – 1988. – 272 с.
5. Лехницкий С.Г. Теория упругости анизотропного тела / С.Г. Лехницкий. – М.: – Наука. – 1977. – 416 с.
6. Максименко В.Н. Теоретические основы методов и расчета прочности элементов конструкций из композитов / В.Н. Максименко, И.П. Олегин. – Новосибирск: Изд-во НГТУ. – 2006. – 240 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 КГТУ-КАИ. – 2012. – 288 с.
8. Гузь А.Н. Трехмерная теория устойчивости деформируемых тел / А.Н. Гузь. Киев: – Наукова думка. – 1985. – 280 с.
9. Хохлов А.В. Решение двумерных задач теории упругости путем минимизации граничной невязки на пространстве бигармонических функций / А.В. Хохлов // ПМТФ. – 1995. – Т.59. – Вып.2. – С.232-242.
10. Соловьев А.И. О совместном применении декартовых и эллиптических координат к решению краевых задач теории упругости для ортотропных пластин / О.Б. Соловьев, А.В. Головченко // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии. 2012. – №53. – С.101-110.
11. Дружинин Г.В. Приближенный метод решения двумерной задачи теории упругости / Г.В. Дружинин, Н.М. Бодунов // ПМТФ. – 1999. – Т.40. – №4. – С.178-184.

ОБЩИЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СИСТЕМ С ЖИДКОЙ ФАЗОЙ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ¹

Р.Н. Голых¹, А.В. Шалунов¹, В.Н. Хмелёв¹

¹Бийский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»,
romangl90@gmail.com

Известно и многократно доказано, что воздействие ультразвуковыми (УЗ) колебаниями (УЗ воздействие) на системы с жидкой фазой реализует кавитационные и другие нелинейные эффекты (силы гидродинамического взаимодействия, акустические течения и т. д.). Эти эффекты способны изменять структуру и свойства систем с жидкой фазой (изменять молекулярную массу и вязкость несущей жидкой фазы, фракционный состав частиц дисперсной фазы), что позволяет получать новые материалы или придавать известным материалам новые, уникальные характеристики (многократно увеличенная пропитывающая способность, поверхность взаимодействия, предел прочности после отверждения, сниженное содержание нежелательной примеси и т. д.).

На сегодняшний день режимы (интенсивность УЗ колебаний) и условия (геометрия технологического объёма) воздействия, позволяющие достичь как можно большей эффективности процессов в системе с жидкой фазой (например, химическая реакция, диспергирование, коагуляция, эмульгирование), в основном, подбираются экспериментальным путём индивидуально на конкретных средах [1, 2]. Однако такой подход обладает рядом принципиальных недостатков, а именно:

- не обеспечивает максимум КПД ультразвукового воздействия с помощью подобранных режимов и условий, поскольку не определяется фактическое отношение затрат энергии на преобразование структуры и свойств системы с жидкой фазой (энергии на разрыв межатомных связей жидкой фазы, разрушение или слипание дисперсных частиц) к введённой акустической энергии;

- не гарантирует, что подобранные режимы и условия обеспечат максимальную энергетическую эффективность процесса на протяжении всего времени его протекания. Это связано с тем, что под действием ультразвука с течением времени меняются свойства и характеристики обрабатываемой среды;

- не позволяет прогнозировать оптимальные режимы и условия воздействия для новых, ранее не известных процессов или озвучиваемых сред. Это обусловлено тем, что такой подход не даёт возможность установить единые закономерности формирования структуры и свойств систем с жидкой фазой в зависимости от режимов и условий воздействия.

В связи с этим для решения проблемы оптимизации ультразвукового воздействия на системы с жидкой фазой необходимо создание комплексной взаимосвязанной модели преобразования энергии ультразвуковых колебаний в целевое изменение структуры и свойств обрабатываемой среды, которая позволит выявить режимы и условия, обеспечивающие повышение КПД воздействия.

Предложенный общий подход к моделированию состоит в последовательном

¹ Исследования формирования кавитационной области и деполимеризации молекул проводились за счёт средств Гранта Президента РФ №МК-2813.2018.8.

Общий подход к оптимизации ультразвукового воздействия был разработан и исследования ультразвукового диспергирования были проведены при финансовой поддержке РНФ (Проект № 18-79-00094).

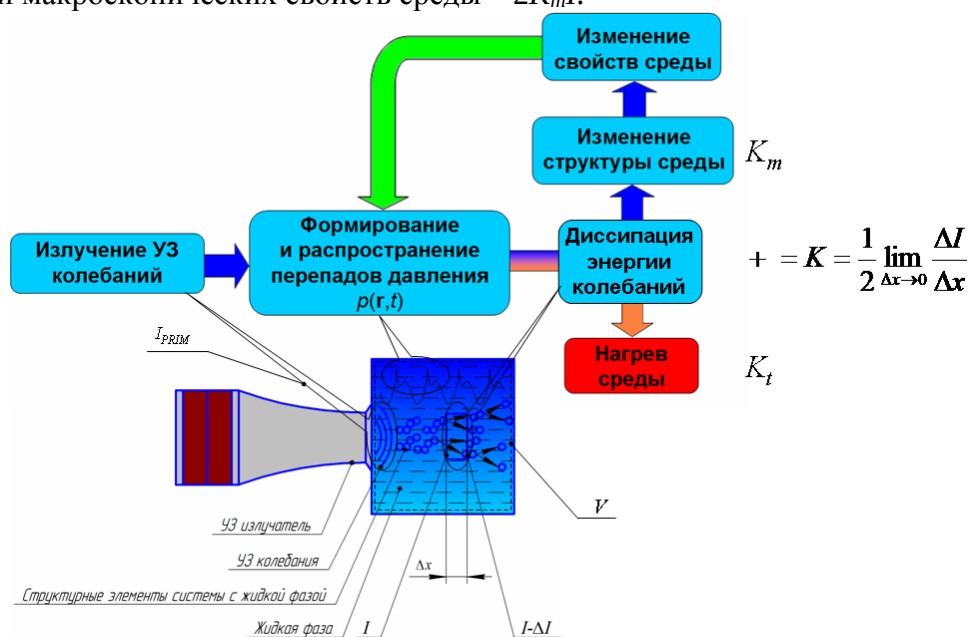
рассмотрении следующих стадий преобразования энергии ультразвуковых колебаний в целевое изменение структуры и свойств среды (рисунок 1) [3].

Энергия колебаний поверхности излучателя формирует перепады давления в жидкости. Возникающие перепады давления диссипируются в среде с полным коэффициентом поглощения K (интенсивность ультразвуковой волны при прохождении некоторого малого расстояния Δx уменьшается на $K\Delta x$).

Удельная мощность, диссипируемая в единице объёма среды $2KI$ в единицу времени, включает в себя 2 составляющие ($2KI = 2K_m I + 2K_t I$):

1) удельную мощность, затрачиваемую на нежелательный, а в ряде случаев и недопустимый нагрев среды (повышение кинетической энергии хаотичного движения молекул) – $2K_t I$.

2) удельную мощность, затрачиваемую на изменение структуры (разрушение водородных или углеродных связей молекул, диспергирование или коагуляция твёрдых частиц) и макроскопических свойств среды – $2K_m I$.



V – объём озвучиваемой системы с жидкой фазой;

I_{PRIM} – интенсивность первичной ультразвуковой волны, генерируемой ультразвуковым излучателем, Вт/м²

I – интенсивность ультразвуковых колебаний в отдельной локальной области технологического объёма, Вт/м²;

ΔI – изменение интенсивности ультразвуковых колебаний в результате диссипации (поглощения) при прохождении ультразвуковой волны расстояние Δx (м), Вт/м²;

K – **полный коэффициент поглощения** колебаний, м⁻¹;

K_m – **структурная составляющая** коэффициента поглощения, м⁻¹;

K_t – **тепловая составляющая** коэффициента поглощения, м⁻¹

Рис. 1. Стадии преобразования энергии ультразвуковых колебаний в системах с жидкой фазой

Макроскопические свойства среды, претерпевшие изменения в течение некоторого малого промежутка времени, в течение следующего временного интервала начинают уже по другому влиять на поле возмущений давления в жидкости по сравнению с предыдущим интервалом. Например, из-за снижения вязкости кавитация

начинает протекать более интенсивно. Указанный фактор необходимо учитывать при оптимизации режимов и условий воздействия.

Согласно предлагаемому представлению задача оптимизации режимов и условий для повышения энергетической эффективности ультразвукового воздействия на системы с жидкой фазой сводится к максимизации суммарной мощности, затрачиваемой на преобразование структуры среды, отнесённой к мощности колебаний, вводимой УЗ излучателем (**КПД УЗ воздействия**). Установлено, что КПД УЗ воздействия, зависящий от интенсивности первичной УЗ волны, исходящей с поверхности излучателя I , и геометрии технологического объёма V , достигает максимума (при $I=I_{OPT}$, $V=V_{OPT}$) при одновременном выполнении двух необходимых и достаточных условий (1, 2):

$$D(V_{OPT}) = \min_{V \in R^3} D(V); \quad (1)$$

$$K_m(I_{OPT}) = \max_{I \geq 0} K_m(I); \quad (2)$$

$$D(V) = \frac{1}{mes V} \int_V \left(1 - \frac{I(\mathbf{r})}{I_{OPT}}\right)^2 dV(\mathbf{r}); \quad (3)$$

где I_{OPT} – оптимальная интенсивность первичной волны, генерируемой УЗ излучателем, Вт/м²; V_{OPT} – оптимальный озвучиваемый объём системы с жидкой фазой; $D(V)$ – относительная дисперсия интенсивности УЗ колебаний в объёме V , обусловленная явлениями затухания и отражения.

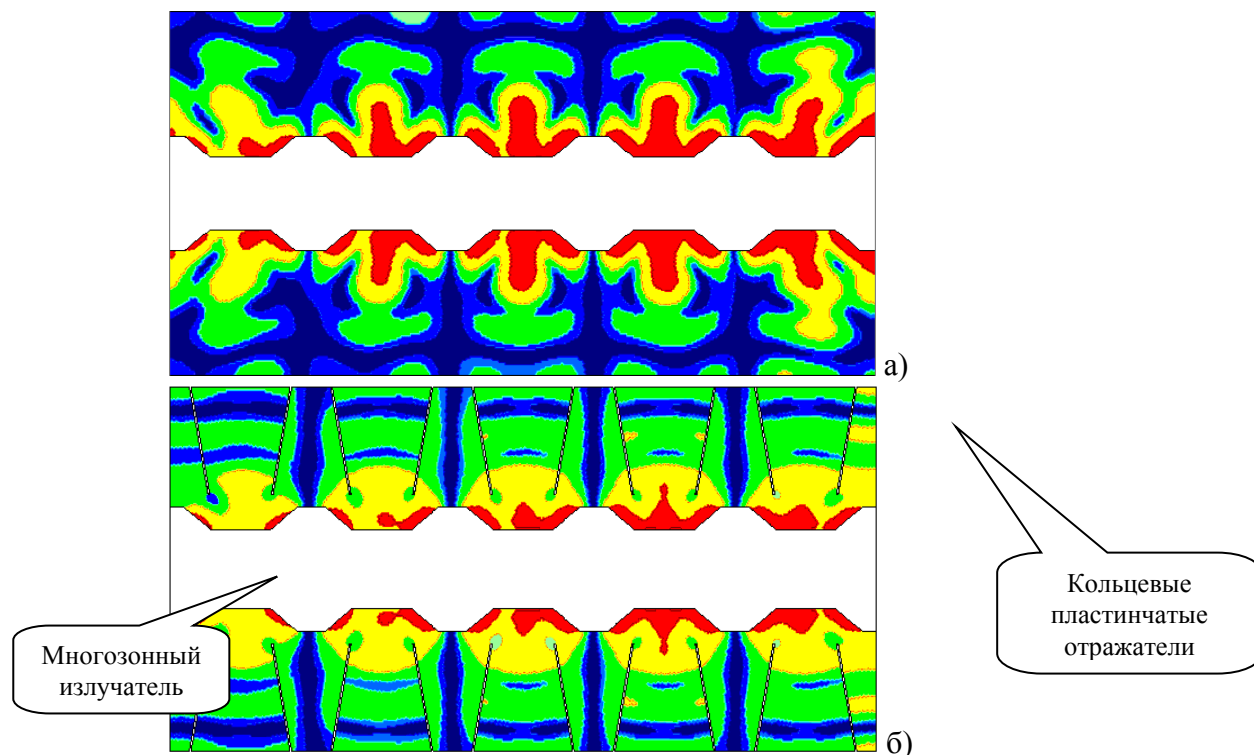
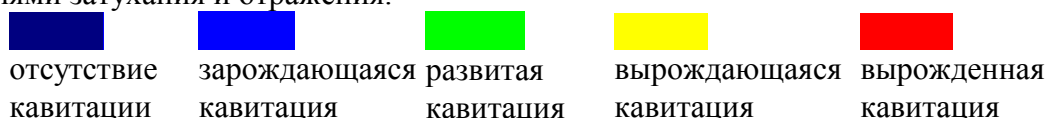


Рис. 2. Распределения кавитационных зон в продольном сечении технологической камеры без отражателей (а) и с кольцевыми пластинчатыми отражателями (б)

На основе предложенного подхода к моделированию и предложенного критерия максимума КПД ультразвукового воздействия созданы:

- модель формирования и распространения кавитационной области под действием ультразвуковых колебаний [3];

- кинетические модели процессов в системах с жидкой фазой, которые в работах [3–5] описаны более подробно.

Модель формирования кавитационной области [3] позволила установить, что минимальная дисперсия интенсивности ультразвуковых колебаний (1) – первое условие максимума КПД, обеспечивается в цилиндрическом технологическом объёме с многозонным излучателем и кольцевыми пластинчатыми отражателями с перфорациями (отверстиями) [5].

Разработанные авторами кинетические модели процессов в системах с жидкой фазой, которые более подробно описаны в работах [3–5], позволили установить оптимальные интенсивности, обеспечивающие выполнение второго условия максимума КПД – максимум структурной составляющей коэффициента поглощения при интенсивности первичных колебаний, генерируемых с поверхности ультразвукового излучателя.

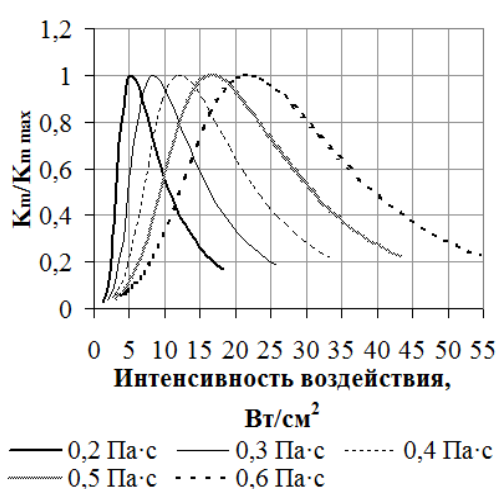
Все кинетические модели основаны на уравнениях эволюции вектора структуры среды [3–5] $\mathbf{C}(t) = [C_1(t), C_2(t), \dots, C_n(t)]^T$, зависящего от времени. Каждая i -я компонента вектора структуры C_i представляет собой счётную концентрацию структурных элементов i -го типа. Например, для процессов деполимеризации высокомолекулярных жидкостей C_i есть счётная концентрация макромолекул с числом мономерных звеньев i , а для процесса диспергирования твёрдых частиц в жидкости C_i есть счётная концентрация частиц с условным диаметром d_i из дискретного набора диаметров.

На основании найденной зависимости вектора структуры среды от времени рассчитывается структурная составляющая коэффициента поглощения согласно следующему выражению:

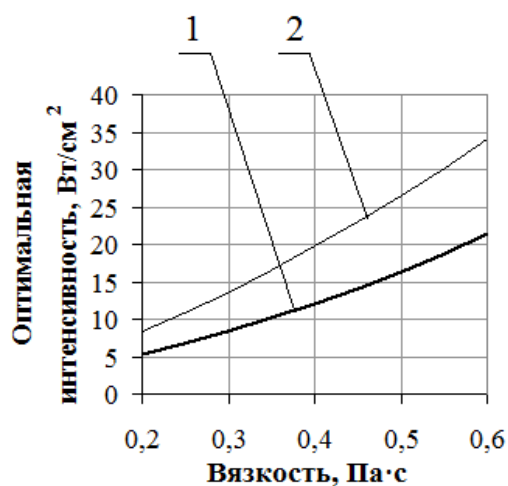
$$K_m(I) = \frac{1}{2I} \frac{du}{d\tau}(\mathbf{C}) = \frac{1}{2I} \left(\nabla_{\mathbf{C}} u(\mathbf{C}), \frac{d\mathbf{C}}{d\tau} \right); \quad (4)$$

где τ – время пребывания выделенного объёма среды в аппарате, с; u – удельная энергия механических и химических связей в единице объёма среды, Дж/м³.

На рисунке 3а представлены зависимости структурной составляющей коэффициента поглощения от интенсивности ультразвукового воздействия при различных вязкостях жидкой фазы на примере процесса деполимеризации [4] гомогенной высокомолекулярной жидкости. На рисунке 3б приведены зависимости оптимальной интенсивности, обеспечивающей максимум структурной составляющей коэффициента поглощения, и интенсивности, обеспечивающей максимальную долю энергии УЗ колебаний, переходящей в схлопывание кавитационных пузырьков.



а)

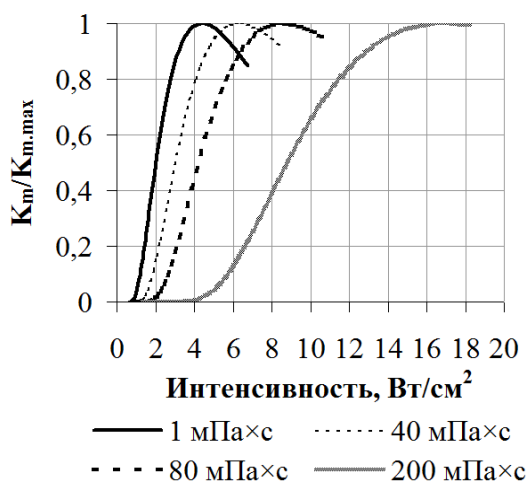


б)

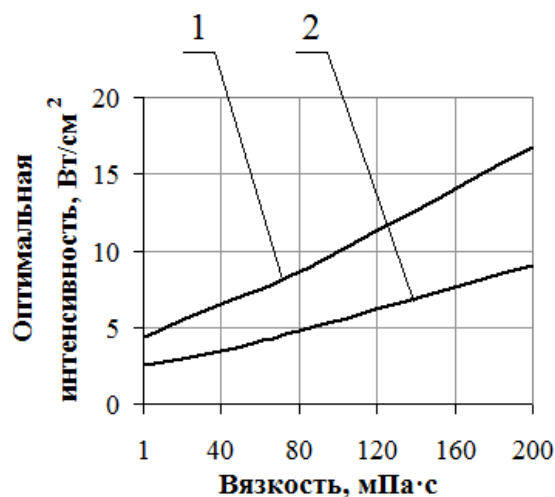
1 – оптимальная интенсивность, обеспечивающая максимальную долю энергии УЗ колебаний, переходящей в изменение структуры среды (деполимеризацию); 2 – оптимальная интенсивность, обеспечивающая максимальную долю энергии УЗ колебаний, переходящую в схлопывание кавитационных пузырьков

Рис. 3. Зависимости относительной структурной составляющей коэффициента поглощения за счёт деполимеризации молекул от интенсивности ультразвукового воздействия при различных начальных вязкостях (а) и оптимальной интенсивности от вязкости (б)

На рисунках 4а, б приведены аналогичные зависимости для процесса ультразвукового диспергирования суспензий [5].



а)



б)

Рис. 4. Зависимости структурной составляющей коэффициента поглощения при диспергировании от интенсивности ультразвукового воздействия при различных начальных вязкостях жидкой фазы (а) и оптимальной интенсивности, обеспечивающей максимальную энергоэффективность диспергирования, от вязкости (б)

Зависимости, приведённые на рисунках 3а, 4а, имеют экстремальный характер, и

положение максимума определяет оптимальную интенсивность воздействия (рисунки 3б, 4б), при которой наибольшая доля энергии ультразвуковых колебаний непосредственно переходит в изменение структуры озвучиваемой среды (структурная составляющая коэффициента поглощения максимальна).

Аппроксимация полученных зависимостей позволила установить, что оптимальная интенсивность I_{OPT} , при которой достигается максимум структурной составляющей коэффициента поглощения колебаний для процессов, реализуемых в кавитационном режиме (деполимеризация и диспергирования), линейно пропорциональна интенсивности, обеспечивающей максимальную долю энергии УЗ колебаний, переходящую в схлопывание кавитационных пузырьков:

$$I_{OPT} = kI_{opt.cav}; \quad (5)$$

где k – поправочный коэффициент, зависящий от наличия/отсутствия межфазной поверхности в озвучиваемой системе с жидкой фазой ($k=0,63$ для деполимеризации и $k=1,75$ для диспергирования).

Таким образом, предложен общий подход к моделированию процессов формирования структуры и свойств систем с жидкой фазой в ультразвуковых полях. Созданные модели на основе предложенного подхода позволили выявить оптимальные режимы (интенсивность колебаний) и условия (геометрия технологического объёма), обеспечивающие максимальный КПД ультразвукового воздействия.

Список литературы

1. Feng, L. Using ultrasonic (US)-initiated template copolymerization for preparation of an enhanced cationic polyacrylamide (CPAM) and its application in sludge dewatering / L. Feng, S. Liu, H. Zheng, J. Liang, Y. Sun, S. Zhang, X. Chen // Ultrason. Sonochem. – 2018. – Vol. 44. – P. 53-63.
2. Zhang, Y. Effect of combined ultrasonic and alkali pretreatment on enzymatic preparation of angiotensin converting enzyme (ACE) inhibitory peptides from native collagenous materials / Y. Zhang, L. Ma, L. Cai, Y. Liu, J. Li // Ultrason. Sonochem. – 2017. – Vol. 36. – P. 88-94.
3. Голых, Р.Н. Моделирование формирования структуры и свойств материальных сред в высокоинтенсивных ультразвуковых полях / Р.Н. Голых // Моделирование неравновесных систем – 2017: Материалы XX Всероссийского семинара. – Красноярск: ИВМ СО РАН. – 2017. – С. 37-42.
4. Golykh, R.N. Model of ultrasonic cavitation depolymerization of oil for evaluation of optimum modes and conditions providing reducing viscosity at low temperatures / R.N. Golykh // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. – 2018. – Vol. 193. – Conf. 1. – 7 p.
5. Голых, Р.Н. Ультразвук. Воздействие на системы с несущей жидкой фазой: монография / Р.Н. Голых, В.Н. Хмелёв, А.В. Шалунов, С.Н. Цыганок. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ. – 2018. – 276 с.

THEORETICAL STUDY OF ULTRASONIC CAVITATION INFLUENCE ON HETEROGENEOUS CHEMICAL REACTION IN SUSPENSION OF SOLID PARTICLES²

R.N.Golykh¹

¹Biysk Technological Institute (branch) of Altai State Technical University named af-ter I.I. Polzunov,
romangl90@gmail.com

The chemical reactions in heterogeneous system with **carrier liquid phase** and **dispersed solid phase** have many applications for obtaining of high strength materials, high energy fuels (including fuels by non-traditional energy sources – plants, wastes [1–4]), chemical active substances. Because the chemical reactions pass on interface “liquid-solid” only, in contradistinction to homogeneous reactions which are realized in all volume of liquid phase, obviously the rate of the reactions is limited. Substantially the limitations are caused by surface area square. Today the problem is solved by dispersed phase grinding by mechanical milling [5, 6] or cavitation dispersing by rotary-pulse [7] or ultrasonic [8–11] apparatuses. However, the grinding has principal physical limitation which is minimum possible size of particles. Reducing particle size leads to disproportionate energy consumption for grinding. Another method of heterogeneous chemical reaction efficiency increasing is using of catalyst [6]. However, catalyst is consumable.

Obviously for the heterogeneous chemical reaction efficiency increasing, the external physical influences which increasing reaction rate per unit of interface “liquid-solid” are necessary. One of prospective physical influence is **ultrasonic (US) cavitation during chemical reaction**. The ultrasonic cavitation increases average molecules kinetic energy [12–16] at the moment of bubbles collapsing which forms pressure shock waves. It causes that the more pairs of molecules “liquid-solid” (according to active collisions theory) on surface react when ultrasonic cavitation influence is exposed. Also, the ultrasonic cavitation influence increases, for example, free radicals (ions or coordination unsaturated compounds) in volume of liquid.

The ultrasonic (US) cavitation influence [1, 2] has following advantages:

1. The acceleration of chemical transformation of the substances without the use of catalyst which is consumable.
2. Low energy consumption.
3. The simplicity of setup of US radiators.

For most effective realization of US influence it is necessary to evaluate optimum modes providing maximum of chemical reaction rate. However the experimental methods are difficult and require consumables. Thus, for evaluation of optimum modes the development of model of surface chemical reaction “liquid-solid” under US cavitation influence for evaluation modes providing maximum reaction efficiency is actual. Actuality is deepened by that there are no models of reaction in heterogeneous systems under US oscillations (the models exist for homogeneous systems [16, 17]). The main goal of analysis of the model must be determining relative chemical reaction rate $k(f, I)$ depending on US frequency and intensity:

$$k(f, I) = \left[\left(\frac{\partial M}{\partial t} \right)_{\text{with US}} \right] / \left[\left(\frac{\partial M}{\partial t} \right)_{\text{without US}} \right]; \quad (1)$$

where M is the mass of solid phase per unit of mixture (carrier liquid phase–solid dispersed phase) volume, kg/m^3 ; $\frac{\partial M}{\partial t}$ is the solid phase mass (per unit of mixture per unit of time)

² The study was performed under the financial supporting of Russian Science Foundation.
Project No. 18-79-00094.

changing during chemical reaction, kg/(s·m³).

The mass changing $\frac{\partial M}{\partial t}$ is determined by two main physical mechanisms [12, 17] considered in the proposed model:

1. Electrical molecules activation in liquid phase – double electrical layer and extremely high electrical field (up to 10⁸ V/m and more) near cavitation bubble intensifies formation of free radicals (or another active elements – ions or coordination unsaturated compounds) of liquid phase.

2. Mechanical activation – ultrasonic cavitation increases average molecules kinetic energy at the moment of bubbles collapsing which forms pressure shock waves. It causes that the more pairs of molecules “liquid-solid” react when ultrasonic cavitation influence is exposed.

According to the mechanisms $\frac{\partial M}{\partial t}$ is determined by following general expression:

$$\frac{\partial(\ln\langle M \rangle_{V,t}(t, f, I))}{\partial t} = -\frac{6m_s}{d_{32}(t)}(P_A[p, \mathbf{E}]\langle C_A \rangle_{V,t}(t) + P_N[p, \mathbf{E}]\langle C_N \rangle_{V,t}(t)); \quad (2)$$

where M is the mass of solid particles per unit of mixture (carrier liquid phase-solid dispersed phase) volume, kg/m³; d_{32} is Sauter mean diameter of solid particles, m; ρ_{sol} is density of solid particle substance, kg/m³; t is reaction time, s; m_s is mass of single molecule of solid, kg; C_A is concentration of active elements of liquid phase (free radicals, ions or coordination unsaturated compounds), mol/m³; C_N is concentration of original molecules of liquid phase (which aren't free radicals, ions or coordination unsaturated compounds), mol/m³; P_A is number of active elements reacted on surface per unit of time per unit of C_A per unit of surface, m/(mol·s); P_N is number of active elements reacted on surface per unit of time per unit of C_N per unit of surface, m/(mol·s); p is pressure in liquid due to cavitation shock waves, Pa; $\mathbf{E}$ is electrical field occurred during cavitation bubbles collapse, V/m.

For simplification of mass changing $\frac{\partial M}{\partial t}$ calculation the following assumptions were taken into account for the model development:

1. $\langle C_A \rangle_{V,t}(t)$ is stationary. This means that it does not depend on time. The assumption is followed from results obtained by Margulis [12].

2. $2 \cdot 10^{11} \cdot \langle C_N \rangle_{V,t}(t) \ll \langle C_A \rangle_{V,t}(t) \ll \langle C_N \rangle_{V,t}(t)$. It is followed from the data about number of free radicals formed by single act of collapse of single bubble ($\sim 2 \cdot 10^5 \dots 2 \cdot 10^6$) [12] and data about cavitation bubbles concentration ($\sim 10^9 \dots 10^{10} \text{ m}^{-3}$) [19] according to the following estimation:

$$\frac{\langle C_A \rangle_{V,t}(t)}{\langle C_N \rangle_{V,t}(t)} \sim \left[\frac{T_{est} f N_{SBC} n_{bub}}{N_A} \right] \left/ \left[\frac{\rho_{liq}}{M_{liq}} \right] \right.; \quad 2 \cdot 10^{-11} < \frac{T_{est} f N_{SBC} M_{liq} n_{bub}}{\rho_{liq} N_A} < 7.5 \cdot 10^{-4} \ll 1; \quad (3)$$

where T_{est} is relaxation time which is necessary for achievement of stationary radicals concentration, s; N_{SBC} is number of free radicals generated by single act of collapse of single bubble; M_{liq} is molar mass of liquid phase, kg/mol; n_{bub} is concentration of cavitation bubbles, m⁻³; ρ_{liq} is density of liquid, kg/m³; N_A is Avogadro number.

3. $P_A \langle C_A \rangle_{V,t}(t) \ll P_N \langle C_N \rangle_{V,t}(t)$. The assumption is proved by following estimation

$$\frac{P_N \langle C_N \rangle_{V,t}(t)}{P_A \langle C_A \rangle_{V,t}(t)} \sim \left[e^{\frac{E_{a,o}}{RT_{temp}}} \langle C_N \rangle_{V,t}(t) \right] / \left[e^{\frac{E_{a,r}}{RT_{temp}}} \langle C_A \rangle_{V,t}(t) \right] < \frac{e^{\frac{E_{a,r}}{RT_{temp}} - \frac{E_{a,o}}{RT_{temp}}}}{2 \cdot 10^{11}} < 0.001 \ll 1; \quad (4)$$

where T_{temp} is temperature of liquid phase, K; R is universal gas constant, 8.31 J/(mol·K); $E_{a,r}$ is minimum energy which is necessary for reaction between active element (free radicals, ions or coordination unsaturated compounds) and molecule of solid phase, J/mol; $E_{a,o}$ is minimum energy which is necessary for reaction between original molecule of liquid phase (which isn't free radicals, ions or coordination unsaturated compounds) and molecule of solid phase, J/mol.

4. Finiteness duration of shock wave generated by collapsed cavitation bubble.

5. If the considered volume V (in which the reaction is performed) is analog of local simply connected cavitation domain (its size is about half-wave length), the time intervals of shock waves generation from different cavitation bubbles do not intersect (for any two different cavitation bubbles with numbers i and j , positions $\mathbf{r}_i$ and $\mathbf{r}_j$, $(t_i; t_i + \tau) \cap (t_j; t_j + \tau) = \emptyset$; t_k – characterization time of starting generation of k -th bubble shock wave, s; τ – characterization time of shock wave durability, s). This is explained as follows,

that the duration of shock wave much less than $\frac{|\varphi(\mathbf{r}_i) - \varphi(\mathbf{r}_j)|}{2\pi f}$ ($\varphi(\mathbf{r})$ – initial phase of ultrasonic oscillation in space position $\mathbf{r}$, rad; i and j is numbers of neighboring bubbles):

$$\frac{\tau}{\frac{|\varphi(\mathbf{r}_i) - \varphi(\mathbf{r}_j)|}{2\pi f}} \sim \frac{c\tau}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \sim \sqrt[3]{n_{bub}} c\tau \ll 1; \quad (5)$$

where n_{bub} is concentration of cavitation bubbles, m⁻³; c is sound speed in liquid, m/s.

6. In each US oscillation period the offset of particle much less than it's diameter. It is true for diameter from 3 μm and more. The assumption is explained in monography [19].

According the assumptions the expression (1) is reduced to (6):

$$k(f, I) = \frac{P_{A \text{ with US}} \langle C_{A \text{ with US}} \rangle_{V,t}(t)}{P_{A \text{ without US}} \langle C_{A \text{ without US}} \rangle_{V,t}(t)}. \quad (6)$$

The relation $\langle C_{A \text{ with US}} \rangle_{V,t}(t) / \langle C_{A \text{ without US}} \rangle_{V,t}(t)$ is determined by known data [12, 13]. The novelty of proposed model is theoretical description for determining $P_{A \text{ with US}} / P_{A \text{ without US}}$.

Due to the fact that P_A defines probability of active elements reaction on surface, the P_A weakly depends on electrical field formed in cavitation nuclei. It is caused by that the electrical field near solid particle is insufficient for significantly molecules activation. Thus, the model considers that the P_A depends on pressure formed by collapsing cavitation bubbles only. Due to non-uniformity distribution shock wave pressure in space and time, the P_A (in fixed volume V) is determined as the following expression (7), obtained by author with using assumptions 4, 5, 6:

$$\begin{aligned} \frac{P_{A \text{ with US}}}{P_{A \text{ without US}}} &= \frac{\int_0^T \int_V \frac{P_{Amicro}(p_0 + p_{cav}(t, \mathbf{r}, f, I))}{P_{Amicro}(p_0)} dV(\mathbf{r}) dt = \\ &= 1 + f \frac{n_{bub} P_{Amicro}(p_0)}{V} \int_0^T \int_V \int_V \left[-1 + \frac{P_{Amicro}(p_0 + p_{sh.bub}(t, |\mathbf{r} - \mathbf{s}|, f, I))}{P_{Amicro}(p_0)} \right] dV(\mathbf{r}) dV(\mathbf{s}) dt; \end{aligned} \quad (7)$$

where $P_{Amicro}(p)$ is microscopic probability of reaction between active elements of liquid and molecule of solid, m/(mol·s); $\mathbf{r}$ is the spatially coordinate in volume V , m; $p_0 + p_{cav}(t, \mathbf{r}, f, I)$ is pressure by cavitation, Pa; T is ultrasonic oscillation period, s; p_0 is atmospheric pressure, Pa; f is ultrasonic frequency, Hz; n_{bub} is cavitation bubbles concentration, m⁻³.

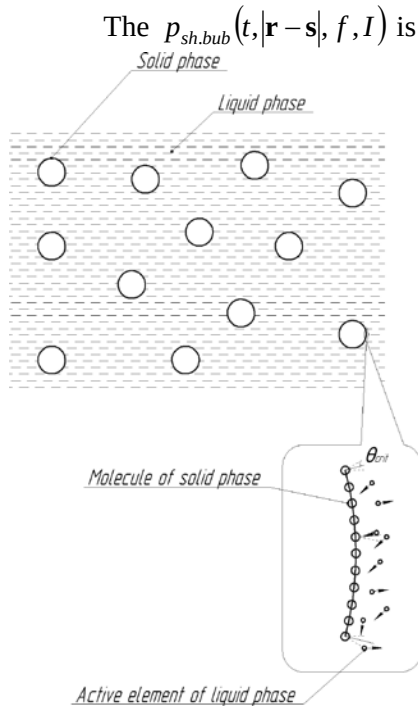


Fig. 1. The diagram of reacting between active element of liquid phase and solid phase

The determining $P_{A \text{ micro}}(p)$ is based on diagram of reacting between active element of liquid phase and solid phase presented on Fig. 1. The diagram illustrates theory of collisions between active elements of liquid phase and molecules of solid phase for surface chemical reactions. According to the theory, for the reaction between molecules of cellulose and enzyme solution the two conditions must be fulfilled:

1) the velocity of liquid phase active element must be exceeded critical value v_{crit} (m/s) determined by activation energy E_a (J/mol).

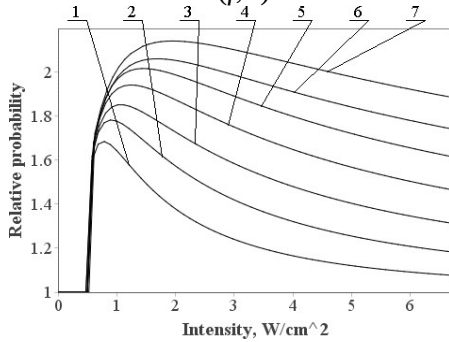
2) the direction of velocity (of liquid phase active element) must be should point at some solid phase molecule and orientation of the velocity direction must be in solid angle Ω_+ (determined by critical angle θ_{crit} , see Fig. 1).

According to the conditions, the rate of change of solid particles mass is determined by (8):

$$\frac{P_{A \text{ with US}}}{P_{A \text{ without US}}} = \frac{\int_{v_{crit}}^{\infty} v F(v, p) dv}{\int_{v_{crit}}^{\infty} v F(v, p_0) dv}. \quad (8)$$

where $F(v, p)$ is probabilistic function of distribution by liquid phase molecules velocities v (modulus of velocity).

According to the presented model the dependences of relative probability of reaction between active element of liquid and molecule of solid, relative chemical reaction rate $k(f, I)$ were obtained and presented in Fig. 2, 3.



1 – 20 kHz; 2 – 25 kHz; 3 – 30 kHz; 4 – 35 kHz; 5 – 40 kHz; 6 – 45 kHz; 7 – 50 kHz

Fig. 2. The dependencies of relative probability of reacting between liquid active element and molecule of solid on ultrasonic intensity at different frequencies

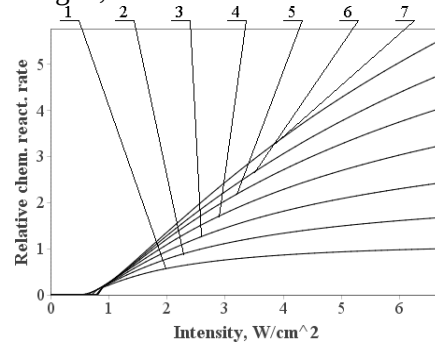


Fig. 3. The dependencies of relative chemical reaction rate on ultrasonic intensities at different frequencies

As follows from the dependencies, the growing of intensity and growing of frequency grows the chemical reaction rate. This corresponds to the available experimental data [1, 2, 12]. However, at maximum intensity of the considered range the bubbles become almost non-collapsing. This leads to the fact that the chemical reaction rate slows growth. It means that the most effective (optimum) intensity at which the relation between chemical reaction rate and introduced acoustic energy is maximum.

In the next Fig. 4 the dependencies of chemical and cavitation efficiencies on ultrasonic intensity at different frequencies are presented. The chemical efficiency is relation between energy transformed to chemical reaction $E_{chem}(I, f)$ and introduced acoustic energy

$E_{ac}(I, f)$. The cavitation efficiency calculated in [18] is relation between energy transformed to cavitation bubbles collapsing $E_{cav}(I, f)$ and introduced acoustic energy.

$$\eta_{chem}(I, f) = \frac{E_{chem}(I, f)}{E_{ac}(I, f)}; \quad (9) \quad \eta_{cav}(I, f) = \frac{E_{cav}(I, f)}{E_{ac}(I, f)}. \quad (10)$$

The dependencies have extremes at intensities providing maximum chemical efficiency (curves 1) and providing cavitation efficiency (curves 2).

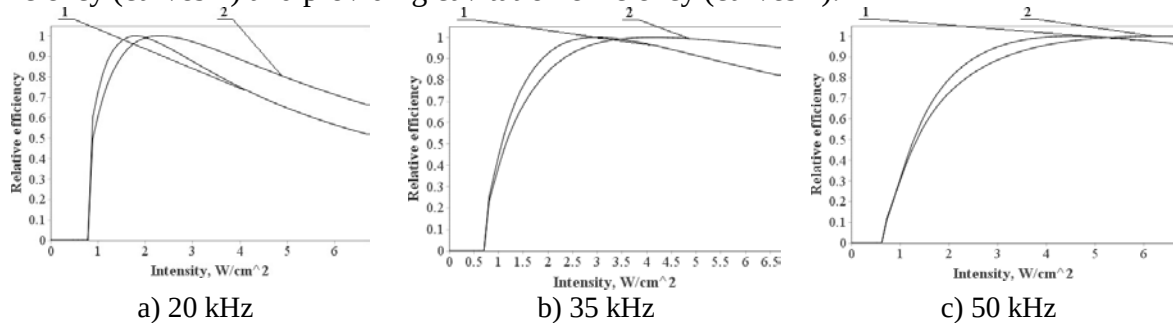


Fig. 4. The dependencies of relative chemical (1) and cavitation (2) efficiency on ultrasonic intensity at different frequencies

As follows from the dependencies, the optimum ultrasonic intensity providing maximum chemical efficiency is less than optimum intensity providing maximum cavitation efficiency.

This is caused by that the growth of intensity since the some critical value reduces the cavitation bubbles concentration. Despite the fact that the amplitude of the shock wave pressure increases as well as intensity grows, the concentration of cavitation bubbles is the main factor influencing on probabilities of formation of active elements and of reacting between active elements and solid phase molecules.

As follows from the figures, the optimum ultrasonic intensity providing maximum chemical efficiency is ~ 0.72 from optimum intensity providing maximum cavitation efficiency. It means that the models of cavitation area formation without taking into account of kinetics of chemical process in heterogeneous systems are not enough for evaluation of ultrasonic optimum modes. For examples, at frequency 20 kHz the optimum intensity is 1.83 W/cm^2 and at 50 kHz the optimum intensity is 4.5 W/cm^2 .

Thus, the model of heterogeneous chemical reaction under ultrasonic cavitation influence in system with carrier liquid phase and solid dispersed phase was created. The model has following novelty:

1. The model takes into account together the cavitation influence on formation active elements (for example, free radicals) in liquid phase and cavitation influence on probability of surface reacting between active elements and solid phase molecules.
2. The model considers reacting between active elements of liquid phase and solid phase molecules by mechanism based on elements kinetic energy changing under cavitation bubbles collapsing.
3. The model allows calculating optimum intensities providing maximum heterogeneous chemical reaction energy efficiency.

Calculated intensities can be used for development of ultrasonic equipment for heterogeneous chemical reaction intensification.

References

1. Bussemaker, M.J. Effect of ultrasound on lignocellulosic biomass as a pretreatment for biorefinery

- and biofuel applications [Текст] / M.J. Bussemaker, D.K. Zhang // Ind. Eng. Chem. Res. – 2013. – Iss. 52. – P. 3563–3580.
2. Jia, L. Ultrasound-enhanced conversion of biomass to biofuels [Текст] / L. Jia, F. Zhen, L. Richard, Jr. Smith // Progress in Energy and Combustion Science. – 2013. – P. 1–38.
 3. Kiatsiriroat, T. Research Study on Biofuels at Chiang Mai Universit [Текст] / T. Kiatsiriroat, N. Vorayos // Journal of Sustainable Energy & Environment. – 2011. – Special Issue. – P. 73–76.
 4. Shimanskaya, E.I. Processing of lignin and lignin-containing raw materials into liquid fuels [Текст] / E.I. Shimanskaya, A.A. Stepacheva, U.V. Lugovoy, E.M. Sulman, A.E. Filatova, M.G. Sulman, E.V. Rebrov // Scientific and technical bulletin of Volga region. – 2015. – Iss 5. – P. 99–101. In Russian.
 5. Sidor, J. Mechanical layered model of a vibratory mill [Текст] / J. Sidor // Mechanics and control. – 2010. – 29(3). – P. 138–148.
 6. Golyazimova, O.V. Increasing of efficiency of milling of lignin and cellulose plant raw by chemical treatment [Текст] / O.V. Golyazimova, A.A. Politov, O.I. Lomovsky // Chemistry of plant raw. – 2009. – Iss. 2. – P. 53–57. In Russian.
 7. Kukhlenko, A.A. Process of Dissolution of Polydisperse Materials in a Unit with a Rotary Pulsation Apparatus [Текст] / A.A. Kukhlenko, S.E. Orlov, D.B. Ivanova, M.S. Vasilishin // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. – 2014. – 88. – P. 23–34.
 8. Leibtag, S. Ultrasonic Dispersing and Wet-milling of Calcium Carbonate (CaCO₃) [Текст] / S. Leibtag // Industrial Sonomechanics. – 2016.
 9. Li, X. Theoretical and experimental study on ultrasonic dispersion of nanoparticles for strengthening cast Aluminum Alloy A356 [Текст] / X. Li, Y. Yang, D. Weiss // Metallurgical Science and Technology. – Vol. 26-2. – P. 12–20.
 10. Khmelev, V.N. Research of the Process of Ultrasonic Dispersing on the Example of Brown Coal and Peat [Текст] / V.N. Khmelev, S.N. Tsyganok, V.A. Shakura // International Conference of Young Specialists on Micro/nanotechnologies and Electron Devices, EDM. – 2018. – P. 292–296.
 11. Taurozzi, J.S. Ultrasonic dispersion of nanoparticles for environmental, health and safety assessment – issues and recommendations [Текст] / J.S. Taurozzi, V.A. Hackley, M.R. Wiesner // Nanotoxicology, early online. – 2010. – P. 1–19.
 12. Margulis, M.A. Principles of sonochemistry: chemical reactions in acoustic fields [Текст] / M.A. Margulis // Moscow: High school, 1984. – 272 p. In Russian.
 13. Margulis, M.A. Sonochemistry reaction and sonoluminescence [Текст] / M.A. Margulis. – Moscow: Chemistry, 1986. – 288 p. In Russian.
 14. Mason, T.J. Sonochemistry: Theory, Applications and Uses of Ultrasound in Chemistry [Текст] / T.J. Mason, P.J. Lorimer. – Ellis Horwood Publishers, Chichester, 1989.
 15. Margulis, M.A. Sonochemistry and Cavitation [Текст] / M.A. Margulis. – London: Gordon and Breach Publishers, 1995. – 543 p.
 16. Nowak, F.M. Sonochemistry: Theory, Reactions and Syntheses, and Applications (Chemistry Engineering Methods and Technology) [Текст] / F.M. Nowak. – Nova Science Publishers, Inc., 2011.
 17. Bhangu, S. Theory of Sonochemistry. Topics in Current Chemistry [Текст] / S. Bhangu, M. Ashokkumar. – Springer, 2016. – 374.
 18. Golykh, R.N. Ultrasonic: influence on systems with carries liquid phase [Текст] / R.N. Golykh, V.N. Khmelev, A.V. Shalunov, S.N. Tsyganok. – Barnaul: Publisher of AltSTU, 2018. – 276 p.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАБОТКИ ФОНОКАРДИОГРАММЫ В СРЕДЕ MATLAB

Л.Р. Григорьян, Е.Г. Ляшко, А.Л. Григорьян

Кубанский государственный университет,
leonmezon@mail.ru, elena_luashko12@mail.ru, ms.bucky@mail.ru

Сердце человека в процессе работы издает множество звуков, которые характеризуют процесс сокращения миокарда, движения створок, удары движущейся крови о стенки сосудов [1].

В настоящее время самым доступным способом определения звуков является аускультация, когда врач выслушивает сердце с помощью фонендоскопа. Однако, многие звуковые волны при этом остаются не услышанными. Более совершенный метод, применяемый в кардиологии, заключается в использовании фонокардиографии совместно с электрокардиографией. В этом случае, врач имеет возможность более точно определить время появления конкретного шума и его связь с сокращением определенных отделов сердца [2]. Однако, следует отметить, что метод фонокардиографии по сложности реализации (за счет раздельного обнаружения и анализа звуковых волн низкого, среднего и высокого диапазона), а также по клинической важности проигрывает эхокардиографии, и остается как метод, применяемый только в самых сложных и неспецифических случаях.

В тоже время, появление разнообразных мобильных (или встроенных) аппаратно-программных методов анализа сердечно-сосудистой системы (например, добавление в носимые устройства датчика пульса, упрощенной системы ЭКГ и т.д.) позволяет использовать метод фонокардиографии для простейшего доврачебного анализа сердечной деятельности и при любых отклонениях от средне нормальной рекомендовать к обращению к медицинской помощи, а так же использование цифровых фонендоскопов с алгоритмами обработки звука в терапевтической практике врача. Например, все устройства мобильной связи имеют возможность записи звука (смартфоны со встроенным или внешним микрофоном), что позволяет их использовать как простейшее диагностическое устройство сердечно-сосудистой системы.

Практическое использование фонокардиографического метода в переносных мобильных устройствах требует: самой простой схемы реализации, при которой не удорожается устройство, реализуется возможность использования его без медицинского образования, минимального ложноположительного срабатывания при анализе звука. Поэтому наиболее простой реализацией, на наш взгляд, является использование возможностей встроенного микропроцессора, который после обработки звуковой информации выдает результат о состоянии сердца в виде визуального оповещения показывающими устройствами (экран ЖКИ, набор многоцветных светодиодов и другое).

Цель работы – исследование методов обработки фонокардиограммы человека. В основе работы лежит анализ временной диаграммы сердечных тонов.

В работе разработан аппаратно-программный алгоритм, реализующий временной анализ амплитуд. В качестве аппаратных средств используются: программируемые усилители, компараторы, счетчики и формирователи временных интервалов.

Выбор компонентов обусловлен следующими соображениями. Известно, что наиболее ранним симптомом сердечно-сосудистых заболеваний является проявление в той или иной мере аритмии, которая первоначально появляется при физических нагрузках или нервном перенапряжении. Касательно звуковой работы сердца, аритмии могут проявляться изменением частотного или амплитудного интервалов тонов сердца. На начальном этапе эти изменения могут быть не заметны - самочувствие человека не изменяется, или только при определенных нагрузках может возникнуть неясное чувство беспокойства, которое большинство людей игнорируют. Использование при таких симптомах ЭКГ или ЭхоКГ позволило бы определить первые признаки аритмии и применить соответствующие медицинские методы, но, как сказано

ранее, в большинстве случаев функциональная диагностика сердечно-сосудистой системы не проводится. Поэтому метод анализа фонокардиограмм должен включать в себя анализ частотного и амплитудного диапазона.

Амплитуду сигнала (после калибровки звуковой системы мониторинга) проще всего реализовать, используя совместно программные усилители и компаратор, что позволяет сравнивать новую запись амплитуды сердца с имеющейся эталонной, и при выходе амплитуды за ее доверительный интервал – подать соответствующие сообщения.

Частотные методы анализа довольно разнообразны, в то же время, если не касаться именно изменения самой частоты тонов, а ограничиться именно временным анализом тонов, то такая реализация потребует добавки к программному усилителю и компаратору формирователей временных интервалов и счетчиков импульсов.

Выбор перечисленных компонентов обусловлен также и тем, что почти все современные микропроцессоры содержат аппаратно-программные модули, позволяющие реализовать усилители с программируемым коэффициентом усиления, компараторы, с управляемой установкой диапазона позволяющие работать в режиме детектора сигналов и счетчиков таймеров, на которых можно реализовать как формирователь временных интервалов, так и сам процесс подсчета импульсов за определенный промежуток времени. Сравнение полученных интервалов и их периодичность реализуется арифметическо-логическим устройством микропроцессора.

На рисунке 1 представлена упрощенная схема для моделирования обработки фонокардиограммы в среде MatLab [3].

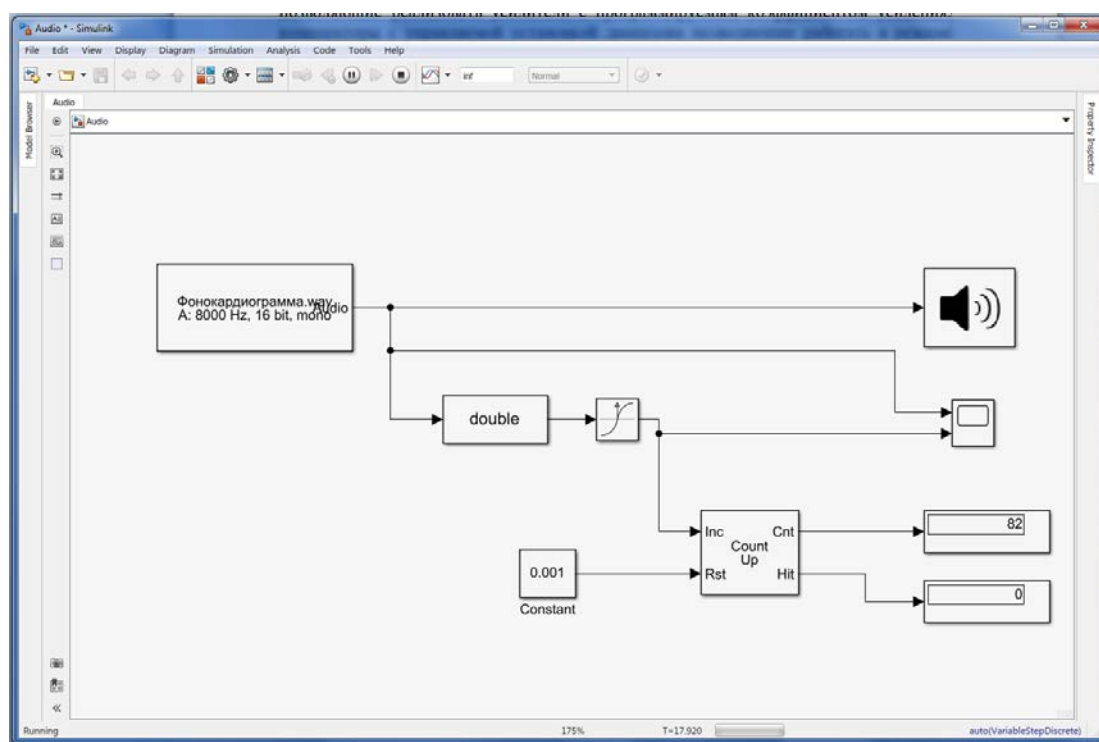


Рис1. Упрощенная схема анализа амплитуды фонокардиограммы.

В ходе моделирования обработки звуковой информации использовались записи фонокардиограммы реальных пациентов.

Рассмотрим подробно процесс моделирования обработки информации.

На рисунке 2 представлена АЧХ сигнала здорового сердца и временная диаграмма амплитуд.



Рис.2. АЧХ сигнала здорового сердца и временная диаграмма амплитуд.

Как видно из временной диаграммы, несмотря на то, что в некоторых случаях мы имеем двойной всплеск (который можно устранить заданием соответствующих параметров компараторов), длительность между всплесками остается одинаковой, что соответствует нормальной работе сердца.

На рисунке 3 представлена АЧХ сигнала сердца при митральном стенозе и временная диаграмма амплитуд.

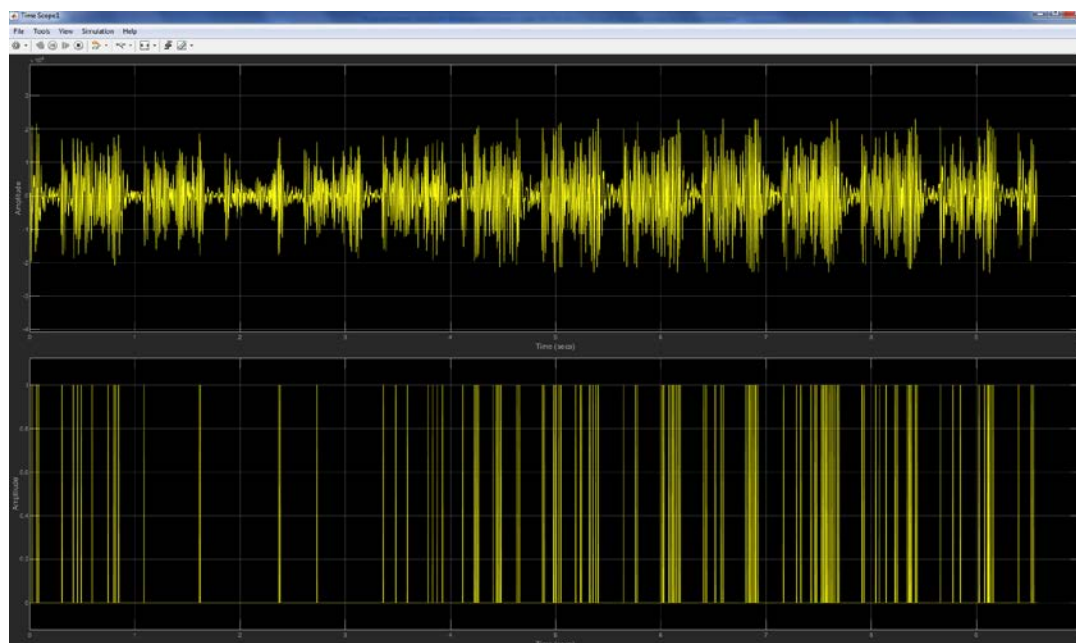


Рис.3. АЧХ сигнала и временная диаграмма амплитуд сердца при митральном стенозе.

Как видно из временной диаграммы, длительность между всплесками имеет хаотичный характер и легко определяется стандартными алгоритмами микропроцессора.

На рисунке 4 представлена АЧХ сигнала сердца при пролапсе митрального клапана и временная диаграмма амплитуд.

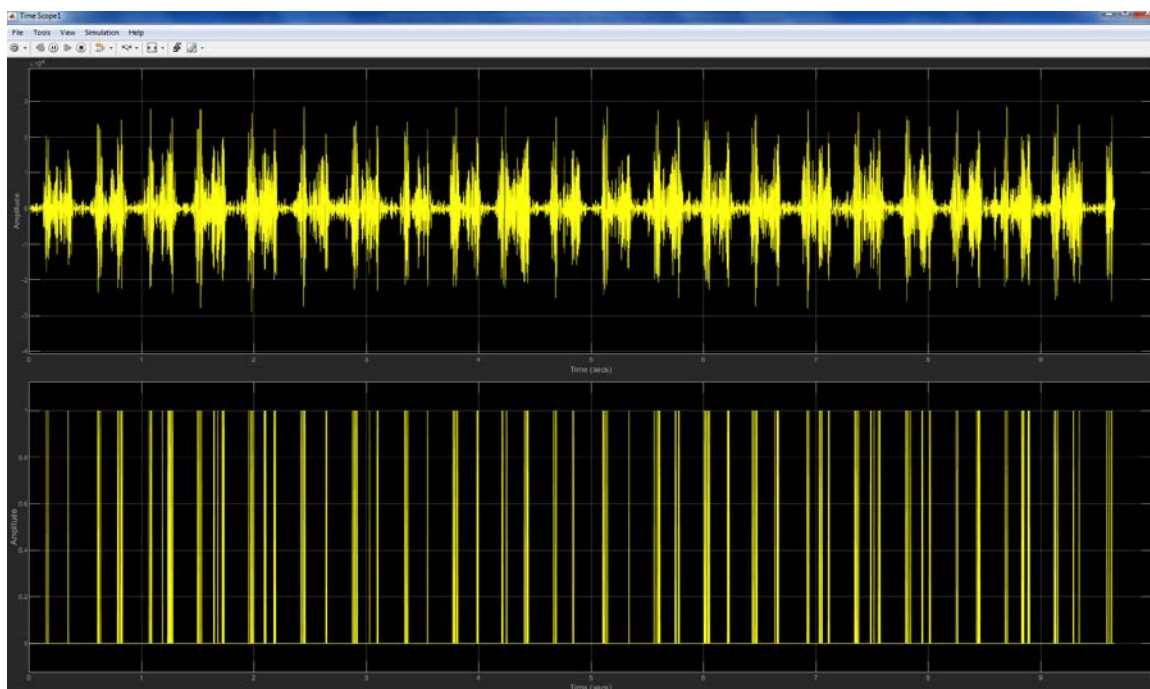


Рис.4. АЧХ сигнала и временная диаграмма амплитуд сердца при пролапсе митрального клапана.

Как видно из временной диаграммы, длительность между всплесками имеет хаотичный характер и также не требует сложных алгоритмов для выявления. Несмотря на то, что на рисунке 3 и 4 представлены запущенные случаи болезни сердца, общая закономерность нарушения периодичности тонов сердца и не идентичность временных интервалов сохраняется, хотя и не так явно.

Анализ предложенного решения показал, что разработанный алгоритм временного исследования тонов сердца для микропроцессора соответствует решению поставленной задачи, и позволяет в мобильной индивидуальной аппаратуре добиться простейшего анализа тонов сердца и вывести полученный результат на показывающие устройства.

Список литературы

1. Яковлев В. М. Аускультативно-фонокардиографическая диагностика сердца и сосудов / В. М. Яковлев, Р. С. Карпов. – Т.: Медицина, 1983. – С. 34–40.
2. Мустецов Н. П. Инструментальные методы медико-биологических исследований / Н. П. Мустецов. – Харьков: ХТУРЭ, 1999. – 176 с.
3. С.П. Иглин. Математические расчеты на базе Matlab. СПб.: БВХ Петербург 2005г. – 640 с.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГАЗОЛАЗЕРНОЙ РЕЗКИ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ КВАЗИСТАЦИОНАРНОГО ТЕЧЕНИЯ РАСПЛАВА

Г.В. Дружинин, Ф.К. Смородин, Н.М. Бодунов

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

Предложена математическая модель процесса газолазерной резки (ГЛР) на основе упрощенных уравнений Навье-Стокса с граничными условиями на внешней и внутренней поверхности расплава с твердым материалом и газовой струей.

Введение. Технология лазерной резки востребована и широко используется в настоящее время в ведущих отраслях промышленности (авиа- и ракетостроении, автомобиле- и судостроении). Доля операций лазерной резки в общем объеме применения лазерных макротехнологий материалов (резка, сварка, наплавка, модификация поверхности, маркировка и пр.) составляет 30-50% [1].

Моделирование процесса ГЛР, базирующееся на уравнении баланса энергии [2], определяет зависимость между мощностью лазерного излучения и скоростью резки. Однако надежного определения вклада различных процессов в полный энергетический баланс ЛР эти модели не учитывают. Высокая производительность процесса с требуемым качеством поверхности реза ГЛР позволяет осуществлять технологию резки по сложному контуру плоских и объемных деталей с высокой степенью автоматизации процесса. Сложность физической картины процесса ГЛР, а также потребности производства поддерживает высокую активность исследований. Поэтому возникает необходимость в теоретическом исследовании данного процесса. Модель, отвечающая такой потребности сложна и в законченном виде к настоящему времени не разработана.

Важнейшей проблемой при резке материалов больших толщин (свыше 15-20 мм) является удаление расплава из узкой щели лазерного реза. При этом роль струи технологического газа возрастает, поэтому был сделан переход от дозвуковых струй на сверхзвуковые в сопловом устройстве лазерной головки с практической реализацией резки сталей до 20 мм, алюминиевых сплавов до 30 мм и лазерно-кислородной – до 50 мм [3,4]. В известных физико-механических моделях [5,6], как и в предложенной в данной работе используются уравнения пограничного слоя, но с другими граничными условиями.

Постановка задачи. Рассматривается механизм газолазерной резки с непрерывным удалением жидкого расплава вдоль фронта реза, образующегося под воздействием плавления металла лазерным излучением. В модели принимается, что «сдвиг» жидкого расплава из узкого реза (0,1-1,5 мм) осуществляется как за счет перепада статического давления в струе режущего газа, так и за счет силы трения со стороны квазистационарного потока инертного газа.

Для материалов с четко выраженной температурой плавления и при допущениях, что и в задаче о плавлении материала [7-10], в предположении, что гидродинамика течения расплава в резе осуществляется под действием градиента давления и сил трения, предлагается следующая математическая модель, с добавлением в граничные условия $q_n + q_c$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}(r^k u) + \frac{\partial}{\partial y}(r^k v) &= 0 \quad (0 < x < l, 0 < y < \delta), \\ \frac{\partial u}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) &= \frac{dP_e}{dx} \equiv F, \\ \rho c \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right), \quad \rho_1 c_1 v_m \left(\frac{\partial T_1}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial y} \right).\end{aligned}\quad (1)$$

Выписанная система уравнений замыкается соответствующей системой граничных условий (рисунок):

$$-\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right)_w - G_w \Delta Q_w + \varepsilon \sigma T_w^4 = q_l + q_c, \quad (\rho v)_w = -G_w, \quad \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w = -\frac{\tau_w}{\mu_w(T_w)} \quad \text{при } y = 0; \quad (2)$$

$$\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right)_{\delta=0} = \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right)_{\delta=\delta_0} + H \rho_1 v_m(x, \delta), \quad u = 0, \quad (T)_{\delta=0} = (T)_{\delta+\delta_0} \equiv T_m \quad \text{при } y = \delta; \quad (3)$$

$$T_1 \rightarrow T_\infty, \quad \text{при } y \rightarrow \infty. \quad (4)$$

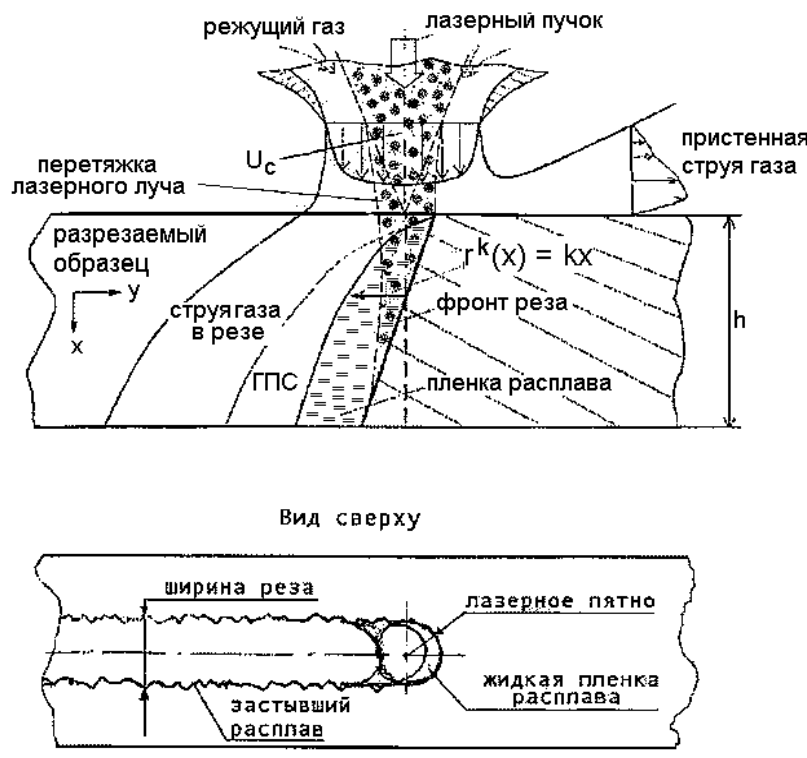


Рис. Схема плавления кристаллического материала и уноса пленки расплава газовой струей

Здесь u, v — продольная и поперечные составляющие скорости; F, r^k — заданные функции независимой переменной x ; $F = dP_e/dx$; $P_e = P_{e0} \left(1 - (x/h)^2 \right)$ — заданное давление; h — толщина разрезаемого материала; $P_{e0} = \rho_e u_c^2$; ρ_e — плотность набегающего потока, u_c — скорость истечения из сопла; μ, λ, c — заданные функции температуры; λ — теплопроводность; μ — коэффициент динамической вязкости; c — удельная теплоемкость

пленки расплава при постоянном давлении; ρ – плотность пленки расплава; T – абсолютная температура; δ – толщина пленки расплава; H_m – удельная теплота плавления материала; T_m – температура плавления; q_l – плотность лазерного излучения; $v_m(x, \delta)$ – скорость плавления материала, которая заранее неизвестна; 1 – нижний индекс относится к исходному материалу.

Решение задачи. Решение системы (1) при постоянных теплофизических свойствах материала представим в следующем виде:

$$u = u_c \bar{x} \bar{\Phi}(\bar{y}); \quad v = u_c \left[\bar{\Omega}(\bar{y}) - \frac{1}{4} \bar{y} \bar{\Phi}(\bar{y}) \right]; \quad T = T^* \bar{\theta}(\bar{y});$$

$$T_1 = T^* \bar{\theta}_1(\bar{y}); \quad v_m = u_c \bar{\Omega}_m(\bar{\delta}). \quad (5)$$

Здесь $\bar{x} = x/h$, $\bar{y} = y/h$.

Подставив решение (4) в (1), получим редуцированную математическую модель:

$$\frac{7\bar{\Phi}}{4} \frac{\bar{y}}{4} \frac{d\bar{\Phi}}{d\bar{y}} + \frac{d\bar{\Omega}}{d\bar{y}} = 0; \quad \frac{d^2\bar{\Phi}}{d\bar{y}^2} = -2 \operatorname{Re}; \quad \left(\bar{\Omega} - \frac{\bar{y}\bar{\Phi}}{4} \right) \frac{d\bar{\theta}}{d\bar{y}} = \frac{d}{d\bar{y}} \left(D \frac{d\bar{\theta}}{d\bar{y}} \right) \quad (0 < \bar{y} < \bar{\delta});$$

$$\bar{\Omega}_m \frac{d\bar{\theta}_1}{d\bar{y}} = \frac{d}{d\bar{y}} \left(D_1 \frac{d\bar{\theta}_1}{d\bar{y}} \right) \quad (\bar{\delta} < \bar{y} < \infty), \quad (6)$$

где $\bar{\delta} = \frac{\delta}{h}$, $\operatorname{Re} = \frac{u_c h \rho}{\mu}$.

Решение системы (6) при постоянных теплофизических свойствах кристаллических материалов запишется:

$$\bar{\Phi} = -\frac{\bar{y}^2 \operatorname{Re}}{2} + C_1 \bar{y} + C_2; \quad \bar{\Omega} = -\frac{5\bar{y}^3 \operatorname{Re}}{24} - \frac{3\bar{y}^2}{4} C_1 - \frac{7\bar{y}}{4} C_2 + C_3;$$

$$\bar{\theta} = \frac{T}{T_*} = C_4 + C_5 \int_0^{\bar{y}} e^{\frac{1}{D} \int_0^{\bar{y}} \left(\bar{\Omega} - \frac{t\bar{\Phi}}{4} \right) dt} dt, \quad D = \frac{a}{u_c h}, \quad a = \frac{\lambda}{\rho c};$$

$$\bar{\theta}_1 = \frac{T_1}{T_*} = C_6 + C_7 e^{\left(\frac{\bar{\Omega}_m}{D_1} (\bar{y} - \bar{\delta}) \right)}, \quad \bar{\Omega}_m < 0, \quad D_1 = \frac{a_1}{u_c h}, \quad a_1 = \frac{\lambda_1}{\rho_1 c_1}. \quad (7)$$

Здесь $\bar{\Omega} - \frac{\bar{y}\bar{\Phi}}{4} = -\frac{\bar{y}^3 \operatorname{Re}}{12} - C_1 \bar{y}^2 - 2C_2 \bar{y} + C_3$, $\bar{\Omega}_m(\bar{\delta}) = -\frac{5}{24} \operatorname{Re} \bar{\delta}^3 - \frac{3}{4} \bar{\delta}^2 C_1 - \frac{7}{4} \bar{\delta} C_2 + C_3$,

$$\int_0^{\bar{y}} \left(\bar{\Omega} - \frac{t\bar{\Phi}}{4} \right) dt = -\frac{\bar{y}^4 \operatorname{Re}}{48} - \frac{\bar{y}^3}{3} C_1 - C_2 \bar{y}^2 + C_3.$$

Константы интегрирования находим из граничных условий (2) – (4):

$$C_1 = \frac{h}{\mu(T_w) u_c} \left(\frac{\alpha}{c_p} \right)_w \left(\frac{du_e}{dx} \right)_w P_r^{2/3}, \quad C_2 = \frac{\operatorname{Re}}{2} \delta^2 - C_1 \delta, \quad C_3 = \frac{G_w}{\rho u_c},$$

$$C_4 = \bar{T}_w = \frac{T_w}{T^*}, \quad C_5 = (T_m - T_w) \left(T^* \int_0^{\bar{\delta}} e^{\frac{1}{D} \int_0^{\bar{y}} \left(\bar{\Omega} - \frac{t\bar{\Phi}}{4} \right) dt} d\bar{y} \right)^{-1}, \quad C_6 = \frac{T_m - T_w}{T^*}; \quad C_7 = \frac{T_m - T_\infty}{T^*}.$$

Здесь $T = T_m$ при $y = \delta$, T_m – температура плавления.

Толщину пленки расплава δ и температуру плавления T_m определим уравнений баланса тепла (2) и (3), предварительно подставив в них решение (5):

$$-C_5 + \frac{h}{\lambda T_*}(-G_w + \varepsilon \sigma T_w^4) = \frac{h}{\lambda T_*}(q_c + q_n),$$

$$C_5 e^{\frac{1}{D} \left(-\frac{1}{48} \text{Re} \bar{\delta}^4 - C_1 \frac{\bar{\delta}^3}{3} - C_2 \bar{\delta}^2 + C_3 \bar{\delta} \right)} = \bar{\Omega}_m \left[\frac{\lambda_1 (T_m - T_\infty)}{\lambda T_*} + \frac{h}{\lambda T_*} H_m \rho_1 u_c \right]. \quad (8)$$

Решив систему нелинейных уравнений (8) численным методом определим толщину пленки расплава δ и температуру на поверхности жидкого расплава T_m . Скорость переноса ГЛР кристаллического материала v_m найдем по формуле

$$v_m = u_c \left(-\frac{5}{24} \text{Re} \bar{\delta}^3 - \frac{3}{4} C_1 \bar{\delta}^2 - \frac{7}{4} C_2 \bar{\delta} + C_3 \right). \quad (9)$$

Численные расчеты по модели проводились для выявления влияния инертной газовой струи на лазерную резку металлов (в качестве примера была выбрана хромоникелевая сталь 08X18H10T, широко используемого в авиастроении) при интенсивности лазерного излучения $(2 \div 5) \times 10^{10}$ Вт/м². Производительность процесса газолазерной резки хромоникелевой стали в инертном газе (азот) определена по соотношению (9) для толщин 5, 20, и 50 мм и при четырех значениях скорости истечения технологического газа на срезе сопла лазерной головки 150, 341, 620 и 840 м/с, т.е. на одном дозвуковом режиме $M = 0,44$ и трех сверхзвуковых режимах истечения газа $M = 1,0; 1,88$ и $2,52$. Результаты расчетов приведены в таблице.

Таблица

$h = 5$ мм			$h = 20$ мм			$h = 50$ мм		
u_c , м/с	δ , мкм	T_w , К	u_c , м/с	δ , мкм	T_w , К	u_c , м/с	δ , мкм	T_w , К
150	21	1800	150	60	2010	150	115	2330
341	15	1770	341	41	1905	341	78	2141
620	9	1740	620	27	1870	620	56	1890
840	5	1720	840	22	1838	840	45	1940

Результаты расчетов показывают удовлетворительное количественное соответствие экспериментальным данным, особенно на толщинах от 0,5 до 25 мм, а на больших толщинах вплоть до 50 мм и более количественное соответствие ухудшается. Это объясняется тем, что при проведении экспериментов мощность лазеров изменялась от 0,6 до 3,1 кВт. Для повышения производительности процесса ГЛР металлов больших толщин необходимо использовать лазеры мощностью порядка $5 \div 6$ кВт, но с обеспечением плотности излучения $q_n > 5 \times 10^{11}$ Вт/м².

Заключение. В работе предложена математическая модель процесса ГЛР, базирующаяся на дифференциальных уравнениях неразрывности, количества движения и энергии в жидком и твердом материале, редуцированных к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Получено аналитическое решение, которое позволяет вычислить искомые величины δ и T_m из системы (8) и найти производительность

процесса ГЛР кристаллических материалов (металлов и сплавов) в инертном технологическом газе из выражения (9).

Для материалов большой толщины необходимы, в первую очередь, учет канализированного проникновения лазерного излучения в материал, так и энергетической составляющей высокоскоростной струи технологического газа в процессах удаления расплава из узких и протяженных каналов лазерной резки.

Список литературы

1. Лазерные технологии обработки материалов // Ред. В.Я. Панченко. – М.: – Физматлит. – 2009. – 664 с.
2. Fleming O. Olsen. Fundamental mechanisms of cutting front formation in laser cutting // SPIE. – 1994. – Vol.2. – 2007. – P. 402-413.
3. Зайцев А.В. Лазерная резка толстых стальных листов при использовании сверхзвуковой струи кислорода / А.В. Зайцев, О.Б. Ковалев, А.Г.Маликов и др. // Квантовая электроника. – 1996. – Т.19. – №9. – С.910 – 915.
4. Смородин Ф.К. Газолазерная резка конструкционных материалов большой толщины / Ф.К. Смородин, А.М. Тощев, В.А. Точилкин // Авиационная промышленность. – 1991. – №5. – С.29-31.
5. Ковалев О.Б. Сопряженные задачи механики сплошных сред в процессах газолазерной резки металлов / О.Б. Ковалев, А.М.Оришич, В.М.Фомин и др. // ПМТФ. – 2011. – Т.52. – №3. – С.16-23.
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. Метод расчета основных характеристик разрушения материалов на основе инвариантных решений уравнений в частных производных / Г.В. Дружинин, Н.М. Бодунов // Моделирование неравновесных систем: Материалы XV Всероссийского семинара / Ред. В.В. Слабко; отв. за выпуск М.Ю. Сенашова. Красноярск: ИВМ СО РАН. – 2012. С.41– 47.
8. Бодунов Н.М. Математическое моделирование лазерной резки на основе редуцированных уравнений пограничного слоя / Н.М. Бодунов, Г.В. Дружинин, Ф.К. Смородин // Динамические системы в науке и технологиях (DSST-2018): Сборник тез. докл. Международной конференции / Ред. О.В. Анашкин. Симферополь: Крымский федеральный ун-т. – 2018. С.16– 17.
9. Полежаев Ю.В. Тепловая защита / Ю.В. Полежаев, Ф.Б. Юревич. – М.: Энергия. – 1976. – 392 с.
10. Дружинин Г.В. Метод расчета характеристик разрушения материалов на основе инвариантных решений уравнений в частных производных / Г.В. Дружинин, Ф.К. Смородин // ПМТФ. – 2013. – Т.54. – №5. – С.169-179.

ОЦЕНКА УРОВНЯ ТЕХНОГЕННОЙ ОПАСНОСТИ ГОРОДСКИХ МУНИЦИПАЛЬНЫХ ОБРАЗОВАНИЙ СИБИРСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ОКРУГА³

У.С. Иванова^{1,2}, В.В. Москвичев^{1,2}, О.В. Тасейко^{3,4}

¹Институт вычислительных технологий СО РАН,

²Сибирский федеральный университет, Политехнический институт,
каф. диагностики и безопасности технических систем

³Институт вычислительного моделирования СО РАН

⁴Сибирский государственный университет науки и технологии
имени академика М.Ф. Решетнева, ulyana-ivanova@inbox.ru

Увеличение числа и тяжести последствий чрезвычайных ситуаций (ЧС), вызванных природными и техногенными опасными процессами, поставили одну из глобальных проблем - обеспечение безопасности общества и окружающей среды. Для повышения безопасности территории в условиях возможных опасностей, необходимо принимать соответствующие программы развития, обеспечивающие максимальную защищенность и основанные на научном обосновании уровней рисков [1, 2].

В работе рассматриваются источники и факторы риска техногенных аварий и катастроф на примере крупных городов Сибирского федерального округа (СФО) с целью оценки уровня их техногенной опасности.

СФО один из крупнейших округов, занимает треть площади РФ и имеет стратегически-важное значение для страны. В составе СФО крупные промышленные регионы, которые с одной стороны влияют на экономическое развитие, с другой - подвержены возникновению крупных аварий и катастроф техногенного характера [3]. Для анализа было выбрано 19 крупных городов Сибири с численностью более 100 тыс. человек и следующие опасные события (факторы) [4]:

1. Аварии на системах жизнеобеспечения;
 2. Аварии на воздушном транспорте;
 3. Аварии на железнодорожном транспорте;
 4. Аварии на водном транспорте;
 5. Аварии с выбросом АХОВ;
 6. Аварии с разливом нефтепродуктов;
 7. Взрывы на промышленных объектах;
 8. Взрывы на социальных объектах;
 9. Возгорания на объектах с массовым пребыванием людей;
 10. Возгорания на промышленных объектах;
 11. Возгорания на социальных объектах;
 12. Крупные ДТП;
 13. Падения строительных конструкций, башенных кранов;
 14. Пожары на объектах с массовым пребыванием людей;
 15. Пожары на промышленных объектах;
 16. Пожары на социальных объектах;
 17. Обнаружение АХОВ;
 18. Обрушения на социальных объектах;
 19. Обрушения на промышленных объектах;
 20. Отказы и неисправности оборудования на промышленных объектах.
- Количественные значения выбранных факторов определялись с использованием

³ Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: «Методы и информационные технологии оценки рисков развития социально-природно-техногенных систем промышленного региона».

информации официальной базы данных АИУС РСЧС период 1999-2017 гг. Для анализа факторов и их влияния использовался метод многомерного статистического анализа – иерархический кластерный анализ, на базе программного обеспечения STATISTICA. Данный метод заключается в рассмотрении каждого объекта (города), как отдельного кластера, объединение кластеров происходит последовательно (объединяются наиболее близкие объекты на основе матрицы расстояний или матрицы сходства). Для нормирования показателей, характеризующих опасные техногенные события, использовался метод «максимум – минимум». Нормирование исходных значений выполнялось на основе соотношения:

$$x'_{ij} = \left| \frac{x_{ij} - x_j^{\min}}{x_j^{\max} - x_j^{\min}} \right|, \quad (1)$$

где x_{ij} — исходное значение показателя;

$x_j^{\max}$ — максимальное значение показателя;

$x_j^{\min}$ — минимальное значение показателя.

На рисунке 1 представлена дендрограмма распределения городов по группам кластеров, которая показывает результаты расчета, позволившие выделить 3 относительно однородных группы (1 – Красноярск, Новосибирск, Омск; 2 – Иркутск, Томск, Барнаул, Ачинск, Ангарск; 3 – Новокузнецк, Северск, Рубцовск, Кызыл, Бийск, Бердск, Норильск, Кемерово, Братск, Абакан).

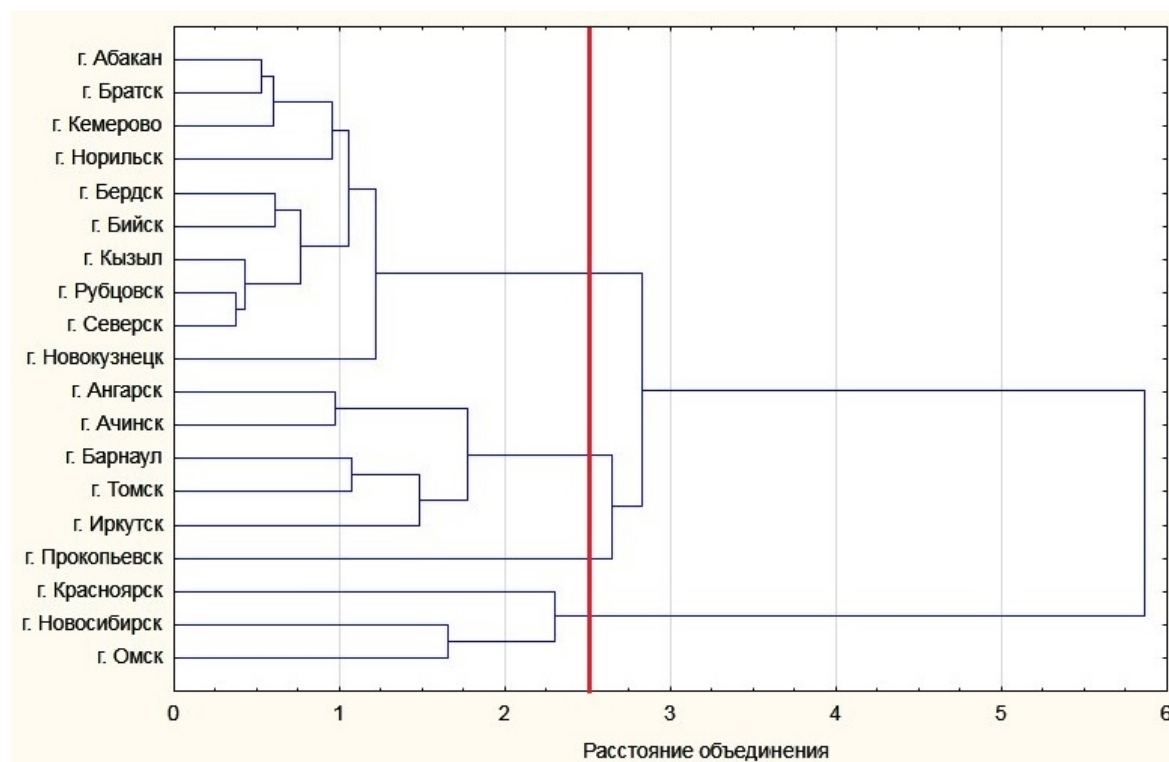


Рис. 1. Дендрограмма кластеризации крупных городов Сибири по методу Варда

Для каждого кластера были проанализированы наиболее важные факторы, которые влияют на показатели техногенного риска (рисунок 2). В таблице 1 приведены средние значения наблюдаемых факторов по каждому кластеру. Город Прокопьевск не вошел ни в

один из кластеров, в связи с существенным отличием значений факторов. Город характеризуется большим количеством промышленных объектов, в том числе шахт, на которых за наблюдаемый период произошло большое количество опасных событий (возгорания, пожары, обрушения, отказы и неисправности оборудования) приведших к гибели и травматизму людей.

Таблица 1

Средние значения опасных событий по группам кластеров

Факторы	Группы кластеров			
	1	2	3	Прокопьевск
Аварии на системах жизнеобеспечения	75,7	28	7,4	1
Авария на воздушном транспорте	20,7	6,4	2,9	0
Аварии с выбросом АХОВ	5	4	1	0
Взрыв на промышленном объекте	5	1,6	1,7	8
Взрыв на социальном объекте	11,3	4	1,4	1
Возгорание ОСМПЛ	3,7	0,8	0,4	0
Возгорание промышленного объекта	6	2,4	1,1	9
Возгорание социального объекта	5,7	1,8	1	1
Крупное ДТП	38	11	3,7	6
Падение крана	5	1	0,3	1
Пожар ОСМПЛ	72	19,2	11,5	1
Пожар на промышленном объекте	37,3	16,6	6,3	5
Пожар на социальном объекте	255,7	95,8	46	74
Обнаружение АХОВ	14	3,6	0,9	0
Обрушение на социальном объекте	10	4,4	1,3	0
Аварии с разливом нефтепродуктов	1,3	2,2	0,1	0
Отказы и неисправности на промышленном объекте	3,7	2,6	2,2	23
Авария на ж/д транспорте	2	1	0,4	0
Авария на водном транспорте	3,7	1	0,4	0
Обрушение на промышленном объекте	1,7	0,8	0,8	23

Полученные кластеры анализировались с целью определения наиболее высоких факторов техногенных рисков. Данный анализ позволяет определить основные факторы, над которыми необходимо проводить работу для минимизации негативных последствий. Во всех кластерах основными влияющими факторами стали пожары на социальных, промышленных и объектах с массовым пребыванием людей, а также аварии на системах жизнеобеспечения. Однако можно заметить и влияние плотности населения, средние значения по исследуемым факторам для 1 Кластера (Красноярск, Омск, Новосибирск) в разы выше по сравнению с другими.

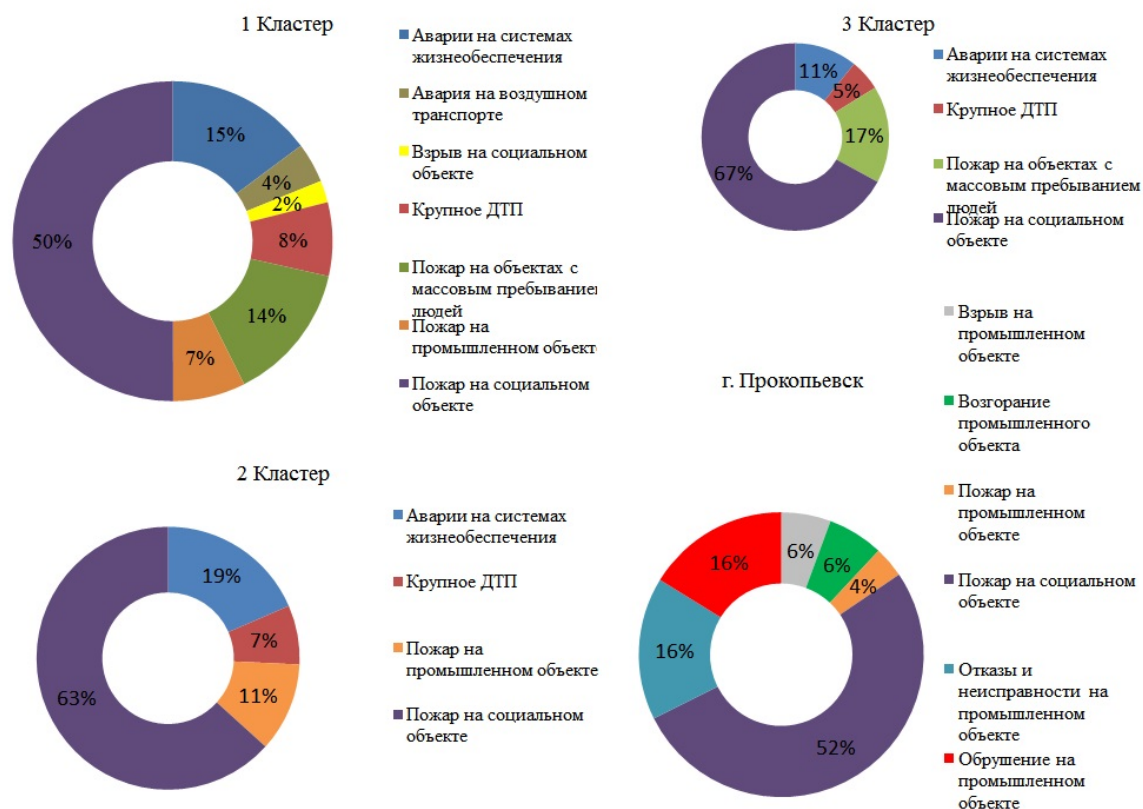


Рис. 2. Основные виды техногенной опасности по группам кластеров

Управление субъектами СФО невозможно без анализа опасных факторов, определяющих уязвимость территории. На основе данного метода были выявлены города с повышенным уровнем техногенной опасности (1 группа кластеров). Предлагаемый подход позволяет выявить основные факторы риска, на основе которых могут разрабатываться экономические механизмы регулирования безопасностью регионов и территорий.

Список литературы

1. Махутов Н.А. Безопасность и риски: системные исследования и разработки / Новосибирск: Наука, 2017. – 724 с.
2. Москвичев В.В., Бычков И.В., Потапов В.П., Тасейко О.В., Шокин Ю.И. Информационная система территориального управления рисками развития и безопасностью / Вестник Российской академии наук. – 2017. – №8. С. 696 – 705.
3. Москвичев В.В., Тасейко О.В., Иванова У.С., Черных Д.А. Базовые региональные риски развития территорий Сибирского федерального округа / Вычислительные технологии. – 2018. – № 4. – С. 95-109. – DOI: 10.25743/ICT.2018.23.16506.
4. Постановление Правительства РФ от 21 мая 2007 г. №304 «О классификации чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера».

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ДАННЫХ МЕДИЦИНСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСА CON-TREX

Е.М. Кабаев¹, А.Н. Мацулев², К.В. Симонов²

¹ Центр восстановительной медицины ФГБУ ФСНКЦ ФМБА России,
kabaevem@mail.ru

² Институт вычислительного моделирования СО РАН, *simonovkv@icm.krasn.ru*

Введение

Для обеспечения быстрых, но реалистичных скоростей натурального движения, разработан специальный роботизированный биомеханический диагностический тренажерный комплекс Con-trex, позволяющий удовлетворять потребности людей с дисфункциями опорно-двигательного аппарата. Задачами данного комплекса является диагностика и объективная функциональная оценка состояния опорно-двигательного и нейромышечного аппаратов пациента на основе объема выполняемого движения, регистрируемого усилия пациента и определения оптимальных скоростных характеристик его движения [1-2].

Современный спортивно-тренировочный комплекс Con-trex позволяет выполнять несколько видов упражнений и регистрировать в цифровом виде физические показатели в процессе выполнения тренировки. В исследовании представлено упражнение, направленное на разработку плечевого сустава после травмы. Рассмотрим три ключевых показателя: крутящий момент в Н*м (далее «усилие»), создаваемый рукой пациента, закрепленной в манипуляторе тренажера; угловая скорость движения руки в град/сек; положение руки (это то же самое, что положение манипулятора тренажера) в угловых градусах. Названные физические показатели (величины) регистрируются с частотой 265 Гц (т.е. 265 раз в секунду). Упражнение состояло из 50 циклов движения руки «Вперед-Назад» (по/против часовой стрелки – ЧС/ПЧС), продолжалось 410.9921875 сек. и состояло из 108894 отсчетов 3-х, названных выше величин.

Целью в исследования в эксперименте является улучшение визуального представления всей совокупности данных, показанных на правой панели рисунка 1.

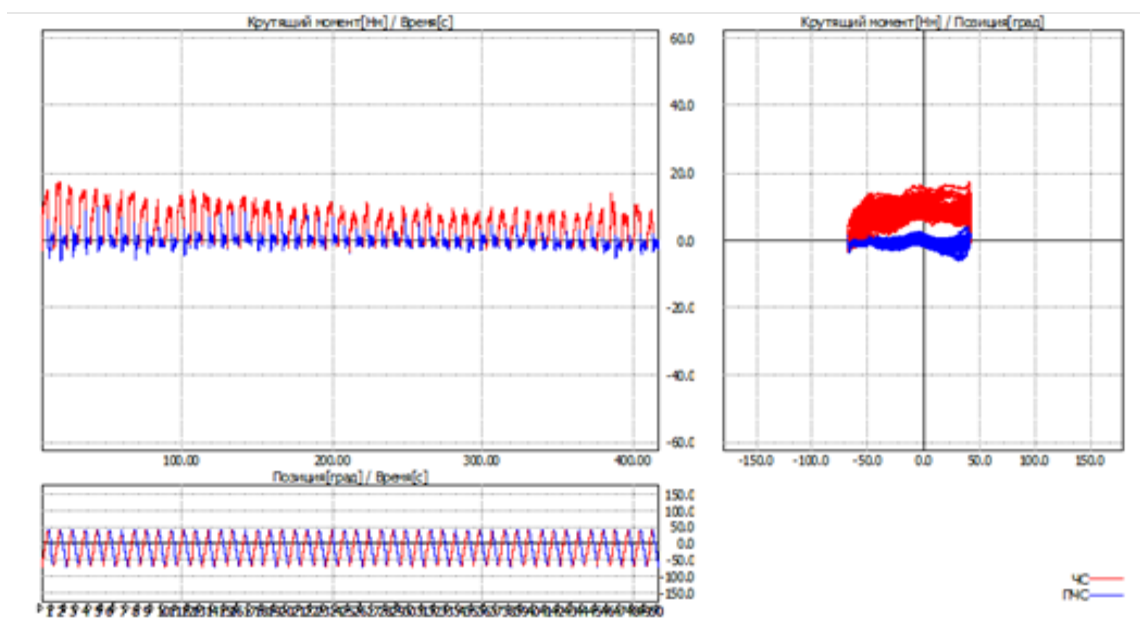


Рис. 1. Результаты эксперимента.

Визуализация данных на основе гистограммного подхода

В статистическом анализе, который выполнен, абсолютные величины регистрируемых

показателей не являются принципиально важными, поэтому для удобства в процессе анализа будем переходить к относительным величинам. При анализе величины «усилия», развиваемую пациентом во всем процессе тренировки (по времени в течение одного цикла и по всем циклам) нами будет употребляться значение величины в % диапазона от минимальной до максимальной величины за тренировку. Время так же будет считаться в % от начала полуцикла (т.е. ЧС или ПЧС) до конца текущего полуцикла (или цикла). Также будут использоваться естественные единицы: для «усилия» (крутящийся момент) – Н*м , а для времени будут использоваться отсчеты – т.е. 1/265 раз в секунду. В процессе выполнения упражнения монитор Con-trex выдает текущую информацию в графическом виде, как показано на рисунке 1

Рассмотрим визуальное представление совокупности данных, показанных на правой панели рисунка 1. Представим эти данные в виде двумерной гистограммы, т.е. учтем частоту попадания точек в ячейку с выбранными интервалами по осям абсцисс и ординат (рис. 2).

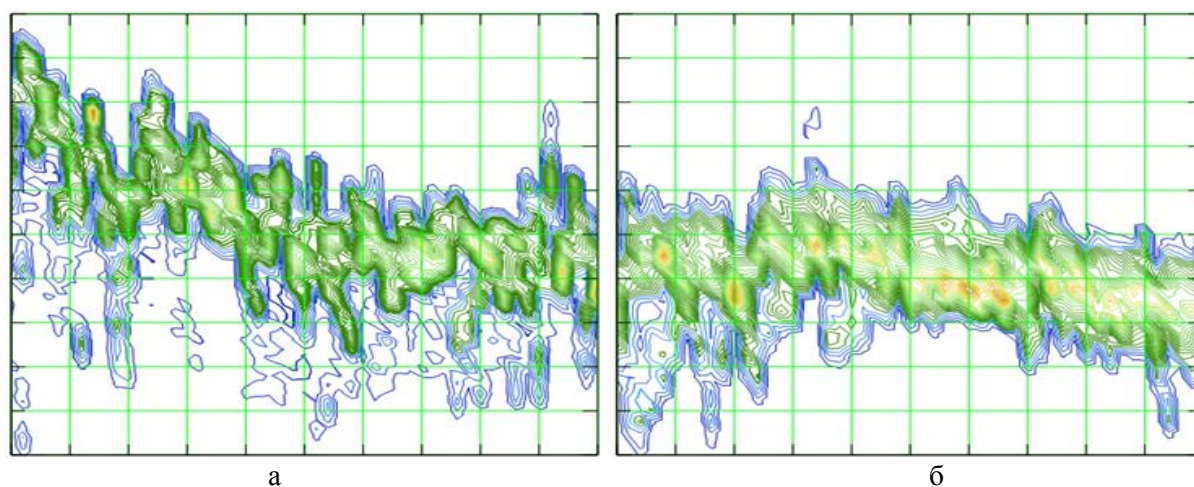


Рис. 2. Двумерные гистограммы «усилий» от времени для полуциклов (ЧС – слева (а), ПЧС – справа (б)). По оси абсцисс отложено время в долях для каждого полуцикла от 0 до 1, по оси ординат «усилие» (крутящий момент) в долях от минимального (0) до максимального значения (1).

На рисунке 2 представлены две двумерные гистограммы по каждому полуциклу, которые более детально представляют совокупные данные монитора Con-trex (рис. 1). Отметим, что относительно оси времени рисунок 2 является зеркальным отражением правой панели на рисунке 1. Это является следствием того, что на рисунке 1 по оси абсцисс координатой является положение (руки) в градусах, а на рисунке 2 по этой оси находится время в долях полуцикла. Дополнительно следует отметить, что минимальное/максимальное значение «усилия» (крутящего момента) для прямого (ЧС)/обратного (ПЧС) движения руки равны (2.634, +17.388 Н*м)/(6.058, +7.062 Н*м), т.е. при движении в прямом направлении создается большее усилие, чем в обратном направлении.

Имея двумерную гистограмму, естественно продолжить статистический анализ и определить среднее усилие, которое создавал пациент в каждом положении (момент полуцикла) и разбросанность – изменчивость этой величины, которую характеризуем среднеквадратичным отклонением. Графики соответствующих величин представлены на рисунках 3-4.

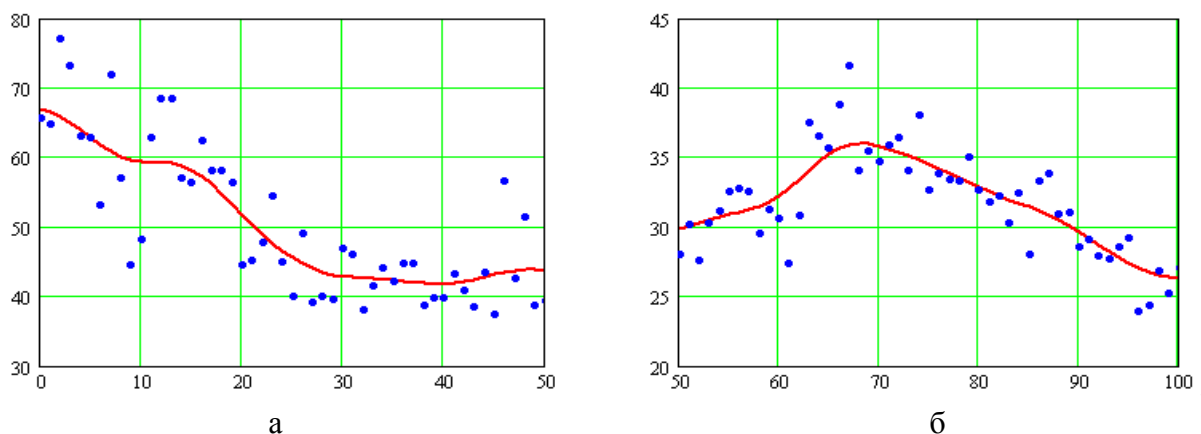


Рис. 3. Представлены средние значения усилий (крутящего момента).

Этот показатель измерен в процентах от диапазона самих усилий (max-min) с учетом разницы минимальных и максимальных значений для движения ЧС/ПЧС (левая/правая панели, а, б) в зависимости от времени (в % от цикла).

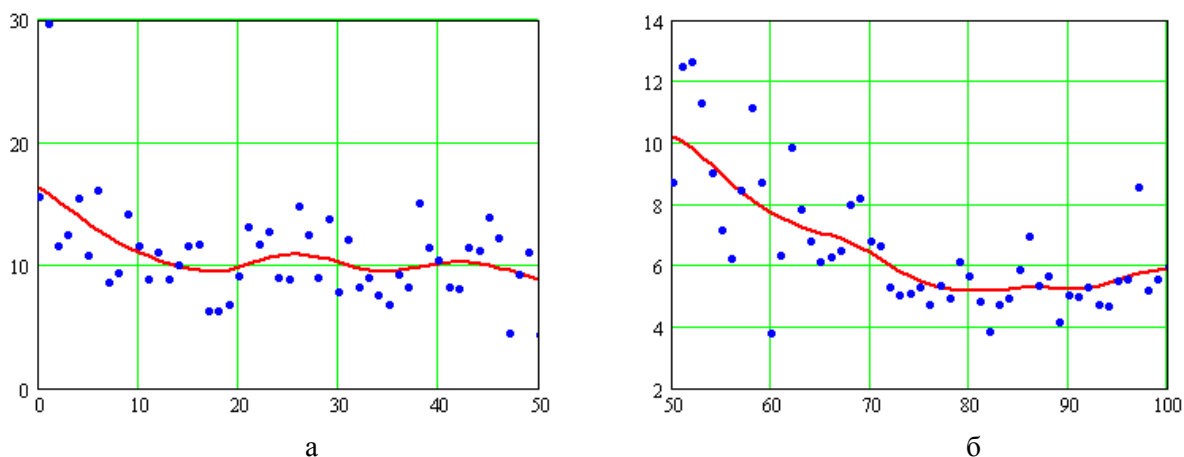


Рис. 4. Представлены среднеквадратичные отклонения от средних значений «усилия» (крутящего момента), измеренного в процентах диапазона усилий (max-min) с учетом разницы минимальных и максимальных значений для движения ЧС/ПЧС (левая/правая панель – а, б) в зависимости от времени (в % от цикла).

В проведенном статистическом анализе сосредоточились на той части информации, которая показывается на мониторе Con-trex в правой панели (рис. 1). Соответственно получена информация о том, как изменяется величина «усилия», развиваемого пациентом, в среднем цикле упражнения. На рисунке 2 и более определенно на рисунках 3-4 показано, что прямое движение (ЧС, левые панели – рис. 3-4 а) более естественно для пациента. Он стабильно, как показывает среднеквадратичное отклонение от среднего усилия (рис. 4 а), развивает большее усилие, чем в обратном движении (ПЧС, правые панели, рис. 3-4 б).

Кроме того, величина «усилия» монотонно падает от начала до примерно половины полуцикла, а потом остается примерно постоянной до конца движения. Обратное движение отмечено меньшим прикладываемым усилием и большей нестабильностью в начале движения. Затем – в конце первой 1/3 полуцикла – удастся приложить большую силу, которая далее монотонно спадает к концу полуцикла. Нестабильность прикладываемого усилия в первой 1/3 части полуцикла (ПЧС) падает от максимума в начале до значения, которое остается примерно неизменным оставшиеся 2/3 полуцикла. Следовательно, можно предположить, что в начале обратного движения руки пациент испытывает какое-то затруднение. Это видно по малой

величине среднего создаваемого «усилия» (крутящий момент) и большой нестабильности, отраженной в большом среднестатистическом отклонении от среднего значения.

Визуализация данных на основе нелинейной регрессии

Выполнены численные эксперименты для решения задачи аппроксимации: построение функций тренда и колебательной составляющей при обработке всего объема экспериментальных медицинских данных с применением программы «Модели» (нейросетовой подход) [3-4]. Основные этапы построения регрессии (аппроксимации) следующие: предобработка; расчет параметров регрессии; оценка гладкости; оптимизация, быстрый метод перекрестной проверки.

Для решения задачи аппроксимации выполнены ряд расчетов, в результате получены оптимальные значения параметров для основного варианта расчета. В рамках численного моделирования для построения аппроксимационных функций выполнен учет гладкости данных и определено количество гармоник при заданной точности (модификация базовой методики): величина спектральной плотности равна 0.5 и 10 для функции тренда и колебательной составляющей, соответственно; общее число гармоник – 48 (рис. 5).

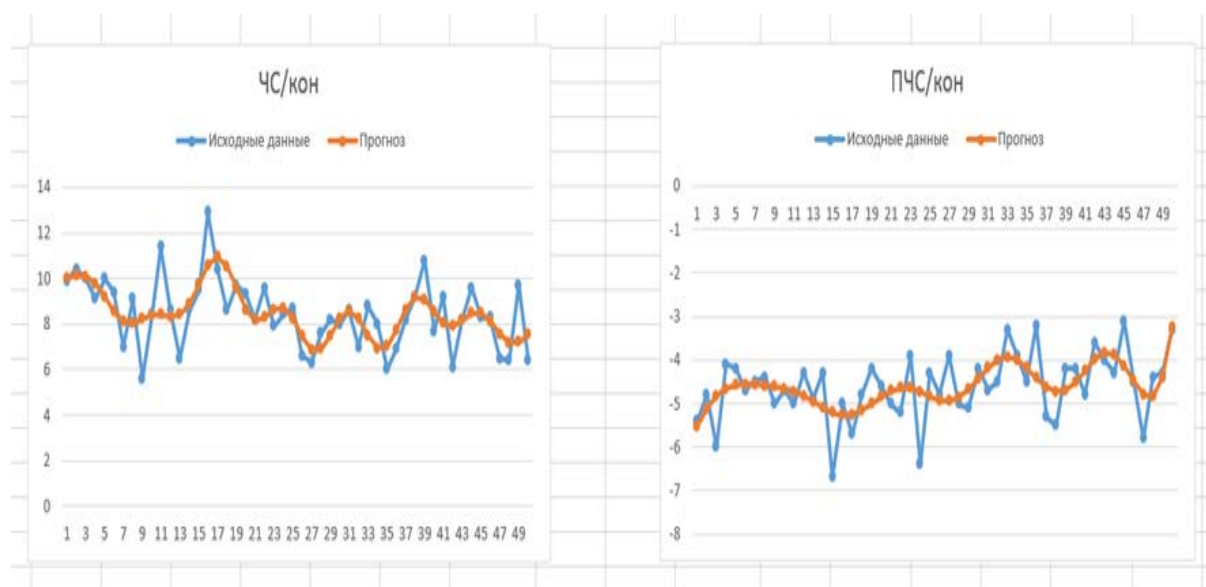


Рис. 5. Графики исходных данных и результатов аппроксимации для показателя крутящийся момент.

Визуализация данных на основе метода упругих карт

Исследуются исходные экспериментальные данные на основе метода упругих карт [5-6]. Для более наглядного представления имеющейся информации построены вложения упругой карты в пространство главных компонент. Это осуществлено с помощью построения «мягкой» карты, что показано на рисунке 6. Ценность такого моделирования наиболее полно отражена в возможности наложения информации связанной с данными с помощью раскраски, которая может изобразить значения любого признака.

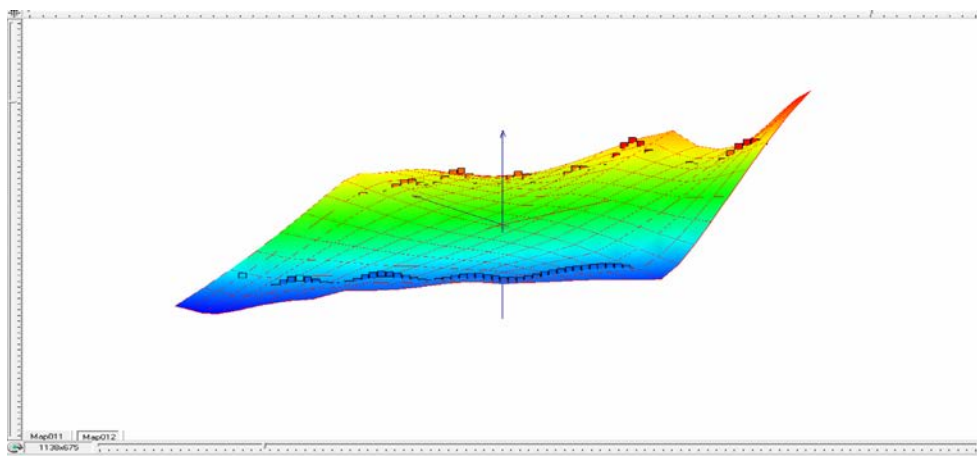


Рис. 6. Закодированный цветом массив данных, мягкая карта, крутящий момент максимальный, модель.

Заключение

Выполнено численное моделирование экспериментальных данных, полученных на основе применения биороботизированного комплекса Con-trex в рамках решения задачи восстановления плечевого сустава. Построены аппроксимационные модели и выполнена визуализация динамики для каждого измеряемого в эксперименте показателя. В процессе построения аппроксимационных функций выполнен учет гладкости данных и определено количество гармоник при заданной точности (модификация базовой методики): величина спектральной плотности равна 0.5 и 10 для функции тренда и колебательной составляющей, соответственно; общее число гармоник – 48.

Сравнительный анализ мягких и жестких карт показал, что более адекватное представление динамики изучаемых показателей имеем при визуализации в модели мягких карт. Улучшение визуального представления для всей совокупности исходных экспериментальных данных с помощью двумерных гистограмм позволяет оперативно оценить и диагностировать состояние пациента.

Список литературы

1. Кабаев, Е.М. Возможности применения диагностическо-тренажерного комплекса с биологической обратной связью Con-trex в послеоперационной реабилитации при травмах плечевого сустава / Е.М. Кабаев, А.Б. Малков, В.И. Трубников // Медицина экстремальных ситуаций. — 2017. — № 4 (62). — С. 56 – 62.
2. Тицкая, Е.В. Анализ экспериментальных данных послеоперационного ремоделирования плечевого сустава посредством Con-trex / Е.В. Тицкая, Е.М. Кабаев, А.Н. Мацулев, К.В. Симонов // Медицина и высокие технологии. — 2018. — № 4. — С. 65 – 73.
3. Горбань, А.Н. Нейронные сети на персональном компьютере / А.Н. Горбань, Д.А. Россиев. — Новосибирск: Наука. — 1996. — 276 с.
4. Носков М.В. Нелинейная многопараметрическая регрессия данных наблюдений / М.В. Носков, К.В. Симонов, А.Л. Щемель // Вопросы математического анализа. — Красноярск: ИЦП КГТУ. — 2003. — Вып. 7. — С. 103 – 120.
5. Зиновьев, А.Ю. Визуализация многомерных данных / А.Ю. Зиновьев. — Красноярск, Изд. КГТУ. — 2000. — 180 с.
6. Горбань, А.Н. Визуализация данных методом упругих карт / А.Н. Горбань, А.Ю. Зиновьев, А.А. Питенко // Информационные технологии — 2000. — № 6. — С. 26 – 35.

УСЛОВНОЕ ТЕРМОДИНАМИКО-ЦЕПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Каганович Б.М., Стенников В.А., Зароднюк М.С., Барахтенко Е.А.
Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН,
thermo@isem.irk.ru, sva@isem.irk.ru, max@isem.irk.ru, barakhtenko@isem.irk.ru

В настоящем докладе обсуждаются проблемы и перспективы нового направления в равновесном моделировании физико-химических и технико-экономических систем. Его идея заключается в совместном использовании преимуществ обладающего инвариантными многообразиями термодинамического и обязательно потенциального одномерного цепного пространств переменных. Эти преимущества уже рассматривались в работах ИСЭМ за последние пять лет [1–4]. Здесь акцент делается на оценке удобств условного термодинамико-цепного моделирования в анализе энергетических задач. Ведь ни в одной другой отрасли народного хозяйства нет такого разнообразия взаимодействий между входящими в нее элементами как в энергетике. В ней едиными режимами работы, текущим и перспективным управлениями связаны объекты, находящиеся на расстояниях в сотни и тысячи километров один от другого.

Разнообразие процессов функционирования вызывается в первую очередь разнообразием природы соответствующих энергетических частей. Так, транспорт энергоносителей осуществляется железнодорожными, автомобильными и водными перевозками, по различным трубопроводам и электрическим сетям. Сложность моделируемых систем обуславливает сложность построения используемых моделей и методов. Оказывается необходимым с помощью достаточно простых математических выражений описать зависимости между переменными, обладающие такими неприятными особенностями как дискретность величин, существенная неопределенность исходных данных, неоднозначность искомых результатов проводимого анализа. Для преодоления возникающих трудностей в ИСЭМ используется два способа: многомерный пошаговый и одномерный термодинамико-цепной.

Достоинства пошагового обуславливаются разбиением вычислительного процесса на столь малые отрезки, что делается допустимой предпосылка о стационарности движения и неизменности его закономерностей. Эта предпосылка определяет возможность равновесного описания необратимых процессов. В термодинамико-цепном моделировании аналогичное сравнительное достоинство обеспечивается потенциальностью одномерного цепного пространства переменных. Идея равновесного термодинамического изучения движения многомерной сплошной среды с помощью условных цепей заимствована авторами доклада у Кирхгофа, который такую цепь использовал для анализа потокораспределения в плоской пластине [5, 6]. Сравнительная легкость равновесного описания необратимых процессов в одномерном пространстве вслед за Кирхгофом была проиллюстрирована Максвеллом [7]. Достаточно строгое математическое объяснение таких возможностей дал Каратеодори [8].

Обнаруженные перспективы дальнейшего расширения области применений классической равновесной термодинамики стимулировали значительный рост ее использования в энергетических исследованиях в ИСЭМ. Применительно к энергосистемам стали решаться задачи: выбора их схем и параметров; расчета режимов эксплуатации; обеспечения требований надежности и безопасности; минимизации вредного воздействия на природу. Основным объектом выполняемых работ явились

интегрированные энергетические системы (ИЭС) [9], включающие подсистемы самой разнообразной природы. Сравнительно простая равновесная термодинамическая модель распределения потоков энергоносителей в транспортной пассивной ИЭС записывается в виде:

$$\text{найти} \quad \min \left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{j_i} z_{ij} x_{ij}^{\beta_i+1} \right) \quad (1)$$

при условиях

$$A_i x_i = Q_i, \quad i = \overline{1, m}, \quad (2)$$

где i – индекс подсистемы, по ветвям которой распространяется i -й энергоноситель; A_i – матрицы соединений независимых узлов и ветвей; x_i – вектор потоков энергоносителя, распространяющегося в i -ой подсистеме; z_{ij} – сопротивление j -ой ветви i -ой подсистемы; Q_i – вектор внешних притоков и стоков i -ой подсистемы; β_i – показатель степени в формуле потерь давления

$$\Delta P_j = z_j x_j^{\beta_i} \quad (3)$$

на j -ой ветви.

Минимальность критерия экстремальности (1) объясняется принятой предпосылкой о пассивности транспортных ИЭС. Аналогичные (1)–(3) описания активных систем приводятся в [1, 3] и других термодинамико-цепных работах ИСЭМ. На основе объединения моделей потокораспределения с моделями оптимизации параметров создавались модели оптимального синтеза [1]. Развитие методов оптимизации все больше связывается с расширением списка оптимизируемых величин. Наряду с предельными значениями денежных затрат отыскиваются: максимальные выходы полезных продуктов энергетических технологий и вредных веществ, загрязняющих природу; допустимые отпуска энергии в отдельных узлах потребления в аварийных ситуациях и условиях дефицита топлива; уровни антропогенного загрязнения в различных районах занимаемой моделируемой энергосистемой территории; возможность регулирования антропогенного экологического воздействия.

В создании с использованием блоков, подобных (1)–(3), новых моделей, служащих для решения энергетических проблем, одним из наиболее сложных и интересных оказалось условное экологическое моделирование. Оно потребовалось в анализе и распределения грязи в воздушной среде, и ее образования в процессах производства и транспорта энергии. Опыт построения условных транспортных маршрутов в значительной мере может быть заимствован из работ Канторовича [10, 11], в которых он дискретные железнодорожные, автомобильные и водные перевозки отображал непрерывными кривыми. Обязательным образцом в моделировании грязераспределения в воздушной среде должны стать упомянутые выше работы Кирхгофа.

Условная модель распределения в атмосфере потоков воздуха и грязи, соответствующая приведенному ниже рисунку, имеет вид:

$$\text{найти} \quad \max P^{\text{mov}} x_1 \quad (4)$$

при условиях

$$A x_a = Q, \quad (5)$$

$$P^{\text{mov}} x_1 - \sum_{j=1}^6 z_j x_j^{\beta+1} = 0 \quad (6)$$

$$\sum_{k=1}^7 x_{dkj} = 0, \quad (7)$$

$$x_{di}^{\text{end}} = f(x_{di}^{\text{beg}}), \quad (8)$$

где x_a – вектор воздушных потоков на ветвях; x_d – вектор потоков загрязнителей; k – индекс загрязнителя; x_{dj}^{end} и x_{dj}^{beg} – векторы потоков загрязнителей в конечной и начальной точках i -й ветви; P^{mov} – разность давлений между узлом 1 – входа воздуха в рассматриваемую систему и окружающей средой, преодолеваемая условным нагнетателем. Целевая функция (4) имеет смысл работы, затрачиваемой на перемещение воздуха. Равенства (5) и (6) представляют воздушные материальный и энергетический балансы. Равенство (7) – материальный грязевой баланс в узле стыковки воздушных потоков. Уравнение (8) описывает превращения и фазовые переходы грязи на ветвях цепи.

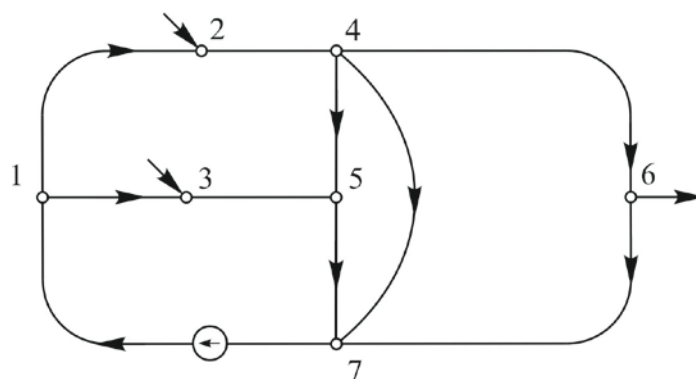


Рис. Воздушно-грязевая цепь. 1 – узел притока воздуха из окружающей среды; 2, 3 – узлы притоков грязи; 4, 5, 6 – узлы стоков грязи в окружающую среду; 7 – окружающая среда.

Уже из элементарного приведенного примера обнаруживается сложность моделирования реальных энергетических систем. Трудно разрешимой задачей оказывается выбор мест расположения и определение объемов притоков грязи, отображенных на рисунке узлами 2 и 3. Ведь источниками вредных выбросов являются тепловые электростанции и котельные; промышленные предприятия; жилая застройка; железнодорожный, автомобильный и водный транспорт. Построение условной схемы образования загрязнений – это самостоятельная важная и интересная проблема. Она включает задание условных источников, их размещение на схеме, описания процессов образования поллютантов. Условные источники могут отображать и отдельные предприятия, и целые районы промышленного, коммунального или транспортного энергопотребления. Предельные выходы отдельных загрязнителей и смесей должны определяться с помощью созданных в ИСЭМ моделей экстремальных промежуточных состояний (МЭПС) [1] и их новых создаваемых модификаций. Проведение анализа грязеобразования на основе МЭПС – это тоже серьезное научное исследование. К решаемым при его выполнении сложным вопросам следует отнести выбор списка искомых концентраций и описание в исходной информации механизмов их образования.

Но главной и наиболее сложной проблемой термодинамико-цепного моделирования, бесспорно, является построение условных моделей изучаемых энергосистем. Основные трудности связываются с определением схем цепей и оценкой эффективности их использования. Эффективность, естественно, обуславливается

важностью и качеством (прежде всего точностью) полученных результатов. В цепном моделировании требуется точное определение потокораспределения. Например, в экологическом цепном – распределения потоков загрязнителей. Удовлетворительная точность может достигаться в результате итеративной детализации выбираемых расчетных схем ИЭС. В ходе итераций следует варьировать количество и расположение контуров и узлов притоков и стоков. Искусство выбора вида цепей будет необходимо непрерывно совершенствовать с расширением круга проводимых исследований. Отмеченное выше разнообразие энергетических задач будет стремительно нарастать как в связи с трудностями обеспечения энергоресурсами, так и в связи необходимостью резкого повышения качества энергоснабжения, в частности уровня комфорта в узлах потребления. Для оценки этого уровня понадобятся принципиально новые модели кондиционирования воздуха в помещениях, позволяющие определять не только температуру и влажность, но и состав загрязнителей. Ведь при усилении загрязнения атмосферы увеличение воздухообмена, традиционно служащего для освежения воздушной среды в помещениях, может приводить к резкому росту содержания в ней вредных веществ. Высокие актуальность и сложность термодинамико-цепного моделирования свидетельствуют об обязательности значительного повышения объема исследований, связанных с его дальнейшим эффективным развитием.

Список литературы

1. Каганович Б.М. Равновесная термодинамика. Проблемы и перспективы / Б.М. Каганович. – LAP Lambert Academic Publishing, 2015. – 239 с.
2. Каганович Б.М. Развитие термодинамического моделирования на графах в виде многоконтурных схем или деревьев / Б.М. Каганович, М.С. Зароднюк, С.В. Якшин // Материалы XIX Всероссийского семинара "Моделирование неравновесных систем – 2016", 7–9 октября 2016. – Красноярск: ИВМ СО РАН, 2016. – С. 60–64.
3. Каганович Б.М. Развитие моделей и методов теории цепей и их энергетических приложений / Б.М. Каганович, Н.И. Воропай, В.А. Стенников, Н.Н. Новицкий // Изв. АН. Энергетика. – 2017. – №6. – С. 24–32.
4. Каганович Б.М. Термодинамико-цепное моделирование загрязнения атмосферы / Б.М. Каганович, М.С. Зароднюк, С.В. Якшин, Е.А. Барахтенко // Материалы XXI Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВСМПС'2019), 24–31 мая 2019 г., Алушта. – М.: Изд-во МАИ, 2019. – С. 66–68.
5. Кирхгоф Г. О прохождении электрического тока через плоскую пластину, например, круглой формы / Г. Кирхгоф // Избранные труды. – М.: Наука, 1988. – С. 155–165.
6. Кирхгоф Г. О применении формул для силы гальванического тока в системе линейных проводников к системе, частично состоящей из нелинейных проводников / Г. Кирхгоф // Там же – С. 178–189.
7. Максвелл Д.К. Трактат об электричестве и магнетизме / Д.К. Максвелл. – М.: Наука, 1989. – Т.1. – 416 с.
8. Каратеодори К. Об основах термодинамики / К. Каратеодори. Развитие современной физики. – М.: Наука, 1964. – С. 188–223.
9. Воропай Н.И. Интегрированные интеллектуальные энергетические системы / Н.И. Воропай, В.А. Стенников // Изв. РАН. Энергетика. – 2014. – №1. – С. 64–72.
10. Канторович Л.В. О перемещении масс / Л.В. Канторович // Доклады АН СССР. – 1942. – Т.37, №7/8. – С. 227–229.
11. Канторович Л.В. Экономический расчет наилучшего использования ресурсов / Л.В. Канторович // М.: Изд-во АН СССР. – 1959. – 344 с.

АНАЛИЗ РИСКОВ ЗДОРОВЬЮ НАСЕЛЕНИЯ Г. КРАСНОЯРСКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВОЛЮЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ

Л.С.Калиманова¹, О.В.Тасейко^{1,2}

¹Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика
М.Ф. Решетнева

Институт лесных технологий, каф.безопасности жизнедеятельности,
kalimanova.l@mail.ru

²Институт вычислительного моделирования СО РАН, ***taseiko@gmail.com***

Одной из проблем загрязнения атмосферного воздуха города Красноярска являются промышленные предприятия, которые участвуют в формировании высоких концентраций химических веществ за счёт выбросов специфических углеводородов в атмосферный воздух, из которых синтезируется канцерогенные и нейротоксические вещества. Это приводит к увеличению заболеваний нервной, эндокринной, иммунной, сердечно-сосудистой и дыхательной систем человека [1]. Задачей исследования являлась оценка рисков заболевания органов дыхания и сердечно-сосудистой системы, вызванных загрязнением атмосферного воздуха. В расчетах использовались данные по содержанию оксида углерода и диоксида серы в атмосферном воздухе г. Красноярска в 2010 году, полученные на постах государственной наблюдательной сети Среднесибирского УГМС.

Сущность проблемы методологии анализа риска состоит в оценке потенциальных последствий для здоровья человека при различных вариантах предшествующих, существующих или возможных в будущем экспозициях вредных факторов, а также из сравнительной характеристики различных факторов, источников их образования, медико-социальной и экономической эффективности различных вариантов управленческих решений.

Наиболее важным представляется определение приоритетов в действиях, направленных на снижение риска, для чего необходимо знать, как основные источники риска, так и наиболее эффективные пути его устранения или снижения до приемлемого уровня. Анализ риска для здоровья человека на определенный момент времени производится с помощью показателей загрязнения химических веществ и уже существующих и разработанных эпидемиологических моделей в соответствии с МР 2.1.10.0062-12 «Количественная оценка неканцерогенного риска при воздействии химических веществ на основе построения эволюционных моделей» [2].

Использование количественных параметров оценки неканцерогенного риска на основе эволюционных моделей при воздействии химических веществ, предназначено для оценки накопления рисков. Это позволяет количественно оценить уровень риска нарушения здоровья в определенный момент времени.

При построении эволюционной модели учитываются процессы накопления функциональных нарушений в организме за счет естественных причин. Прогнозирование риска нарушения здоровья в модели производится через расчетное значение риска на текущий момент времени. В начальный момент времени значение риска принимается равное 0,01. На основании парных моделей «экспозиция-эффект»,

которые являются элементами эволюционной модели, можно оценить временную динамику риска нарушений органов и систем.

Риск для дыхательной системы, вызванный ингаляционным воздействием оксида углерода [3]:

$$0,00065 * (e^{-0,102} - e^{-0,034*x}) > ;$$

Риск для сердечно-сосудистой системы, вызванный наличием диоксида серы в атмосферном воздухе [3]:

$$0,26 * (e^{-0,000233} - e^{-0,00466*x}) > .$$

В результате исследования была получена модель рекуррентных соотношений по отдельным системам организма, отражающих влияние отдельных факторов среды обитания на эволюцию риска функциональных нарушений критических систем:

Риск развития нарушений деятельности дыхательной системы различной тяжести от воздействия оксида углерода на момент времени t [3]:

$$R_{t+1}^D = R_t^D + (0,0515 * R_t^D + 0,00065 * (e^{-0,102} - e^{-0,034*x}) > * 0,0274;$$

Риск развития нарушений работы сердечно-сосудистой системы различной тяжести от воздействия диоксида серы на момент времени t [3]:

$$R_{t+1}^D = R_t^D + (0,05 * R_t^D + 0,26 * (e^{-0,000233} - e^{-0,00466*x}) > * 0,0274.$$

Приведенные соотношения позволяют выполнить расчёт дополнительного риска, расчёт показателей для анализа структуры риска и расчёт показателей для оценки риска. Дополнительный риск применительно к данному исследованию характеризует воздействие факторов на состояние здоровья. Для расчета дополнительного риска использовались два сценария экспозиции, которые отражают фактические и фоновые уровни факторов. При фоновом уровне используется сценарий накопления риска нарушений функций органов и систем только за счет естественных причин, если отсутствует действующий фактор.

Дополнительный риск в каждый момент времени рассчитывается как разность рисков в условиях фактической и фоновой экспозиции факторов [4]:

$$\Delta R_j(t) = R_j(t) - R_j^\Phi(t),$$

где $R_j(t)$ – дополнительный риск нарушения j -й системы органов в возрасте t ;

$R_j(t)$ – риск нарушения j -й системы органов под воздействием совокупности факторов в соответствии с фактическим сценарием экспозиции;

$R_j^\Phi(t)$ – риск нарушения j -й системы органов без воздействия факторов (в соответствии с фоновым сценарием).

Выполнение расчетов показателей риска позволяет анализировать вклады отдельных факторов в формирование нарушений здоровья в течение времени экспозиции. При выполнении категорирования риска используется специальная оценочная шкала, основанная на расчете приведенного индекса риска здоровью [5].

В результате проведения сравнительного анализа с использованием специального оценочного индекса риска получены результаты дополнительного риска нарушений здоровья населения, связанные с анализируемыми факторами.

Таблица 1.

Результаты расчётов дополнительного риска для сердечно-сосудистой системы.

Возраст	Дополнительный риск здоровью [2]	Приведенный индекс риска	Характеристика риска
10 лет	0,0021	0,001	Пренебрежимо малый
20 лет	0,0085	0,009	Пренебрежимо малый
40 лет	0,039	0,044	Пренебрежимо малый
60 лет	0,019	0,25	Умеренный
70 лет	0,32	0,49	Высокий

Таблица 2.

Результаты расчётов дополнительного риска для дыхательной системы

Возраст	Дополнительный риск здоровью [2]	Приведенный индекс риска	Характеристика риска
10 лет	0,0021	0,001	Пренебрежимо малый
20 лет	0,0085	0,009	Пренебрежимо малый
40 лет	0,019	0,35	Умеренный
60 лет	0,44	0,64	Высокий
70 лет	0,32	0,49	Высокий

Приведенные результаты свидетельствуют, что структура риска сердечно-сосудистой и дыхательной систем изменяется в зависимости от возраста и продолжительности воздействия анализируемых факторов. На этом этапе интегрируются все данные, полученные в процессе идентификации опасности, оценки зависимости «экспозиция-ответ» и оценки экспозиции. Для характеристики полученных результатов оценки риска используется классификация основных показателей (Таблица 3).

Таблица 3.

Классификация уровней риска.

Уровень риска	Риск социально значимых эффектов и риск других стохастических (беспороговых) эффектов	Коэффициент опасности развития неканцерогенных эффектов (SO ₂) для отдельных веществ	Индекс опасности развития неканцерогенных эффектов (CO) для группы веществ с однородным действием	Общая характеристика
Высокий	Более 10-3	> 3	>6	Неприемлем ни для населения, ни для профессионалов. При его

				достижении необходимо проведение экстренных мероприятий по его снижению
Настораживающий	$1,0 \times 10^{-3} - 1,1 \times 10^{-4}$	1,1 -3	3,1 - 6	Приемлем для профессионалов и неприемлем для населения в целом. Появление такого риска требует разработки и проведения плановых оздоровительных мероприятий.
Допустимый (приемлемый)	$1,0 \times 10^{-4} - 1,1 \times 10^{-6}$	0,11-1,0	1,1 – 3,0	Уровень приемлемого риска. Подлежит динамическому контролю
Минимальный (целевой)	10-6 и менее	0,1 и менее	1,0 и менее	Уровни риска, которые воспринимаются всеми людьми как пренебрежимо малые, не отличающиеся от обычных, повседневных рисков. Подобные риски не требуют никаких дополнительных мероприятий по их снижению и их уровни подлежат только периодическому контролю.

Необходимо отметить, если рассчитанный уровень неканцерогенного риска (коэффициент опасности SO₂) вещества не превышает единицу, то вероятность развития у человека критических эффектов при ежедневном поступлении вещества в течение жизни незначительна, и такое воздействие характеризуется как допустимое. В случае превышения коэффициента опасности единицы, вероятность возникновения вредных эффектов у человека возрастает пропорционально увеличению SO₂ [5].

Наблюдение риска развития неканцерогенных эффектов при комбинированном воздействии химических соединений проводится на основе расчёта индекса опасности (СО). Расчёт индексов опасности, как правило, проводится с учётом критических органов/систем, поражаемых исследуемыми веществами.

Исследование позволило определить, что в целом воздействие на сердечно-сосудистую систему населения г. Красноярска от загрязнения гораздо значительнее, чем воздействие на дыхательную систему. Это подтверждается, тем фактом, что свыше 50 % жителей городов страдают хроническим бронхитом. Люди, проживающие вблизи цементных заводов, чаще болеют раком лёгкого.

Дальнейшие расчеты по эволюционным моделям позволят оценить сокращение продолжительности жизни людей, подвергшихся ингаляционному воздействию загрязняющих веществ.

Список литературы

1. Золотарев И. И. Влияние загрязнения окружающей среды на здоровье населения Сибири / И.И.Золотарев. – 2006. – С.87.
2. Зайцева Н. В., П. З. Шур И. В., Май, Кирьянов Д. А, Атискова Н. Г., Чигвинцев В. М, Цинкер М. Ю., Хрущева Е. В. Количественная оценка неканцерогенного риска при воздействии химических веществ на основе построения эволюционных моделей// Методические рекомендации. М.: Федеральный центр гигиены и эпидемиологии Роспотребнадзора. - 2012. - С.36..
3. Онищенко Г. Г., Зайцева Н. В. Анализ риска здоровью в стратегии государственного социально-экономического развития. Монография/ Г.Г.Онищенко, Зайцева Н.В. - 2014. – С.738.
4. Кирьянов Д. А., Камалтдинов М. Р. Методика расчета дополнительной заболеваемости и смертности на основе эволюционного моделирования риска здоровью населения // Анализ риска здоровью. - 2014. - С.31–39.
5. Рахманин Ю. А., Сеницына О. О., Новиков С. М. Руководство по комплексной профилактике экологически обусловленных заболеваний на основе оценки риска. //Методические рекомендации М: Федеральный центр гигиены и эпидемиологии Роспотребнадзора. - 2017. – С68.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ СТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ БЛОКА РАДИОЭЛЕКТРОННОЙ АППАРАТУРЫ ПО ДАННЫМ НАБЛЮДЕНИЙ ОТ СИСТЕМЫ ВСТРОЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ДАТЧИКОВ

Е. Д. Карепова¹, Ю. В. Шанько¹, В. В. Деревянко¹, Д. А. Нестеров¹

¹Институт вычислительного моделирования СО РАН, e.d.karepova@icm.krasn.ru

В настоящее время имеется многолетний опыт использования электронного оборудования в космической промышленности, соответственно, накоплен опыт его отказов и поломок. Анализ причин неисправностей показывает, что 80 % электромеханических отказов связано с различными термическими воздействиями на оборудование и примерно 20 % отказов приходится на различные виды вибраций и ударное воздействие [1]. В этом контексте контроль тепловых режимов бортовой радиоэлектронной аппаратуры (РЭА) является важным способом повышения надежности космического аппарата. Есть несколько других областей, в которых возникают сходные проблемы, например, надежность печатных плат высокой плотности [2,3], контроль температуры и мощности в многоядерных, многопроцессорных и мобильных устройствах [3–6].

На сегодняшний день существует, по крайней мере, два подхода к повышению надежности электронного оборудования: во-первых, использование сложных математических моделей поведения радиоэлектронной аппаратуры на этапе проектирования и, во-вторых, внедрение систем мониторинга и прогнозирования состояния в реальном времени.

Комплексные модели, основанные на механике твердого тела, динамике жидкости и газа, термо- и электродинамике, получившие в литературе специальное название моделей физики отказов [2,3] используются на этапах проектирования устройств. Эти подходы, как правило, требуют определения набора параметров модели, и часто наблюдаемых или экспериментальных данных недостаточно для определения значений этих параметров с приемлемой точностью (см., например, [8]). Кроме того, некоторые параметры могут изменяться во время эксплуатации оборудования, а другие принципиально зависят от ситуаций, возникающих во время функционирования устройств (см., например, [4,7]).

В этом контексте прогнозирование ближайшего поведения устройства в реальном времени, основанное на мониторинге его состояния за короткий предыдущий период, является важным компонентом повышения надежности электронного оборудования. Как правило, для этого используются простые математические и эвристические модели, а также методы анализа данных [4–7,9].

Для прогнозирования установившейся температуры систем с источниками тепла обычно используется уравнение теплообмена [10] и сопутствующие эвристические модели. Для валидации параметров применяется метод наименьших квадратов и его модификации [4,5], а также многопараметрическая оптимизация [7]. Для оперативного прогнозирования температуры электронного оборудования используются следующие методы (см. [8] и его список литературы): потоковый предиктор (history predictor) [6,11,13], авторегрессия [6], фильтры Калмана [13,14], линейная регрессия [4,5,7] и т.д. Обычно эти подходы дополняются эвристическими моделями процессов, которые не могут быть строго описаны простыми математическими моделями.

Как правило, методы прогнозирования температуры электронного оборудования основаны на показаниях датчиков, которые считаются изолированными друг от друга. В этой статье представлен подход к прогнозированию температуры

устойчивого состояния электронного блока на основе показаний всей системы датчиков.

В данной работе обсуждается построение алгоритмов прогноза температуры стационарного состояния блока РЭА по данным измерений системы температурных датчиков. Алгоритмы используют исходные данные о температуре, полученные во время экспериментов на многофункциональном лабораторном стенде, который имитирует работу блока РЭА.

Лабораторный стенд представляет собой вакуумную камеру в которой укреплено теплоотводящее основание для установки макетов блоков РЭА (тепловых имитаторов), которое обеспечивает поддержку температуры в пределах $\pm 1^\circ\text{C}$ в диапазоне от минус 30 до $+60^\circ\text{C}$. Макет блока РЭА выполнен в виде прямоугольной алюминиевой рамки с наклеенной текстолитовой платой, на которую установлено 16 нагревателей VT1–VT16 (мощных транзисторов), имитирующих работу реальных радиоэлементов на силовом модуле. Тепло от греющихся при работе транзисторов отводится по рамке через плоскую нижнюю поверхность блока («пятку») к теплоотводящему основанию стенда. Конструкция макета и схема отвода тепла близки к реальным конструкциям модулей, входящих в состав бортовой РЭА. Лабораторный стенд оснащен средствами измерения теплофизических параметров с помощью тепловизора и температурных датчиков (термисторов, термометров сопротивления и термопар), расположенных на поверхности рамки и теплоотводящем основании. Схема размещения элементов на макете РЭА показана на Рис. 1А. Стенд обеспечивает работу тепловых имитаторов в атмосферных условиях и в вакууме при давлении не выше $1.3 \cdot 10^{-3}$ Па (10^{-5} мм рт. ст.).

Бортовая РЭА может работать в нескольких штатных режимах. Каждый режим определяется фиксированным набором активных радиоэлементов, которые выделяют тепло, следовательно, можно говорить о соответствующих *тепловых режимах работы* РЭА (Рис. 1Б). В [15] было показано, что если блок РЭА работает в определенном режиме, то по данным от системы датчиков можно достоверно определить этот режим.

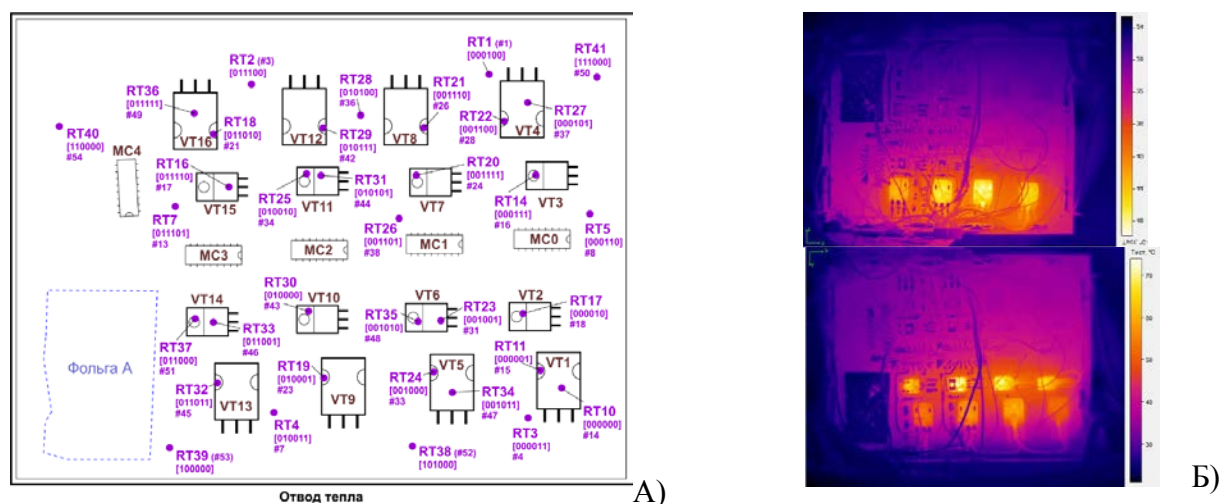


Рис. 1. Макет РЭА: А) схема размещения элементов; Б) примеры тепловых режимов работы (снимки тепловизором).

При смене режима работы блока РЭА, температурное поле поверхности платы начинает постепенно изменяться, что фиксируется каждым датчиком. Через некоторое время температурное поле устанавливается соответствующим новому рабочему режиму блока РЭА, и показания датчиков перестают сильно изменяться, т.е. для каждого

датчика s устанавливается температура T_s^{st} стационарного состояния, которая зависит только от номера датчика s и режима работы блока РЭА.

Пусть на некотором достаточно большом временном интервале имеются наблюдения за температурой $T_s(t_i)$ в моменты времени $t_i = t_{start} + i\tau$ с равномерным шагом τ . Зафиксируем $K > 0$ в качестве длины окна предсказания и рассмотрим интервал $[t_0 - K\tau, t_0]$ как окно предсказания температуры $T_s^{st}(t_0)$, к которой будет стремиться показания сенсора s при сохранении режима работы блока РЭА. Можно показать, что с некоторой точностью $T_s^{st}(t_0)$ линейно зависит от температуры датчиков в окне предсказания

$$T_s^{st}(t_0) \approx \sum_{k=0}^K q_k T_s(t_0 - \tau k). \quad (1)$$

Коэффициенты q_k могут быть найдены, например, методом наименьших квадратов из данных наблюдений.

Нами были обработаны данные большой серии экспериментов, которые проводились с помощью лабораторного стенда. Каждый эксперимент начинался с «нулевого» режима работы, когда все нагреватели выключены и система находилась в устойчивом тепловом состоянии. Эксперимент состоял из последовательности циклов. Каждый цикл имел два этапа: 1) быстрая смена режима работы блока РЭА; 2) непрерывная работа в этом режиме до тех пор, пока тепловое поле блока не достигнет устойчивого состояния.

Изменение режима работы блока РЭА характеризуется либо изменением конфигурации активных нагревателей, либо изменением мощности, подаваемой на нагреватели. Смена режима происходит практически мгновенно. Далее блок работает в заданном режиме до конца цикла. На Рис. 2 показан график мощности, подводимой к одному из нагревателей в течение серии из 4 циклов (синяя линия в форме лестницы). После смены режима тепловое поле поверхности РЭА начинает изменяться, поэтому показания каждого датчика также начинают изменяться. Этот нестационарный процесс длится некоторое время, затем температура каждого датчика становится стабильной. На Рис. 2 показана зависимость температуры от времени для двух датчиков. Датчик RT10 (Рис. 2, красная линия) расположен на нагревателе, а датчик RT26 (Рис. 2, зеленая линия) установлен на поверхности платы вдали от активных нагревателей. Один цикл длится до тех пор, пока температура всех датчиков не достигнет устойчивого состояния. Затем начинается новый цикл с быстрой сменой режима работы блока РЭА.

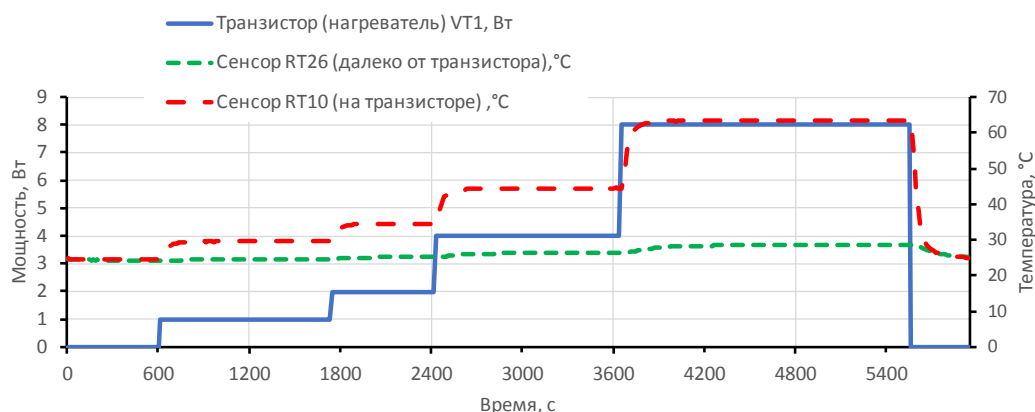


Рис. 2. Данные экспериментов.

Все данные экспериментов были разделены на обучающую и тестовую выборки. Обучающая выборка сформирована из 14186 наблюдений в 99 последовательных циклов продолжительностью около 47 часов. Тестовая выборка состояла из 1010 наблюдений в 6 последовательных циклах продолжительностью около 4 часов. Интервал измерения составлял 12 секунд.

На основе данных обучающей выборки по модели (1) были получены коэффициенты q_k . На рис. 3 показаны результаты прогноза по тестовой выборке для датчика RT10, расположенного на нагревателе. График показывает температуру стационарного состояния (синяя линия в форме лестницы), которое достигается на втором этапе каждого цикла, фактическую температуру показаний датчика (пунктирная черная кривая) и результат онлайн-прогноза температуры устойчивого состояния (сплошная красная линия). Для прогноза использовалось равенство (1) с шириной окна предсказания равной 5 интервалам (1 минуте).

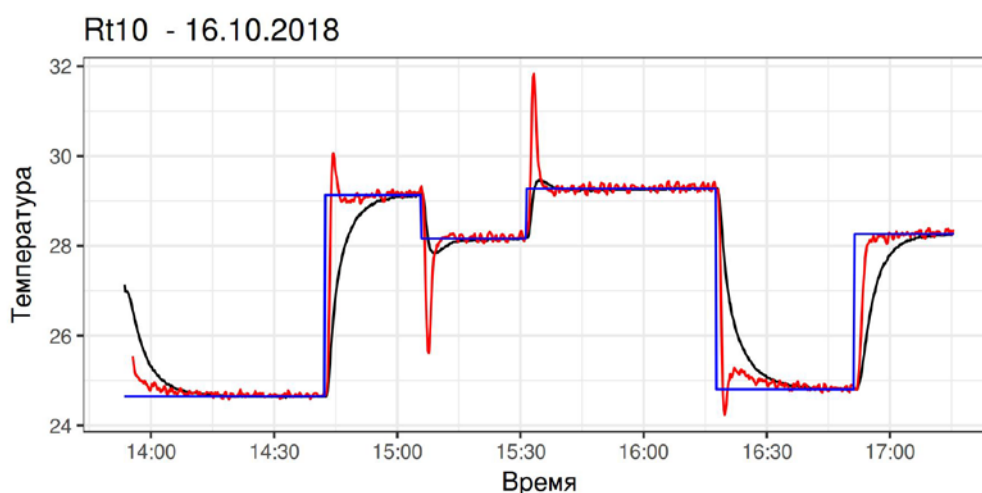


Рис. 3. Результат предсказания для датчика Rt10, расположенного на нагревателе.

Из представленных графиков видно, что стационарная температура датчика прогнозируется с хорошей точностью. Максимальные ошибки предсказания (пики сплошной красной линии) соответствуют ситуации, при которой момент времени смены режима попадает в окно предсказания и формула (1) становится некорректной, поскольку часть данных относятся к периоду, когда блок РЭА работал не в том режиме, для которого рассчитывается температура установившегося состояния.

Анализ выполнен в среде статистической обработки данных R [16].

Отметим, что имея набор предсказанных температур системы датчиков, можно воспользоваться классификатором, построенном в [15], и заблаговременно определить режим работы блока РЭА по еще не установившемуся температурному полю. Можно так же заподозрить отклонения от нормальной работы блока, если предсказанный набор температур не будет соответствовать ни одному из штатных режимов.

Список литературы

1. Steinberg Dave S. Vibration analysis for electronic equipment. — New York: A Wiley-Interscience publication, 2000. — 432 p.

2. Matthews B. Space Shuttle Main Propulsion System Anomaly Detection: A Case Study / B. Matthews, A. Srivastava, D. Iverson, B. Beil, and B. Lane // IEEE Aerospace and Electronic Systems Magazine. — 2011. — V. 26. — P. 4–13.
3. Chary G.V. Improving the reliability in the next generation of US army platforms through physics of failure analysis / Chary G.V., Habtour E., Drake G.S. // J. of Failure Analysis and Prevention. — 2012. — V. 12 (1). — P. 74–85.
4. Bhat G. Algorithmic Optimization of Thermal and Power Management for Heterogeneous Mobile Platforms / G. Bhat, G. V. Singla, Ali K. Unver, Umit Y. Ogras // IEEE Transactions on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems. — 2018. — V. 26 (3). — P. 544–557. doi: 10.1109/TVLSI.2017.2770163.
5. Yeo I. Predictive dynamic thermal management for multicore systems / Inchoon Yeo, Chih Chun Liu, Eun Jung Kim // In: 45th ACM/IEEE Design Automation Conference. — 2008. — IEEE, Anaheim, CA, USA.
6. Coskun A.K. Utilizing Predictors for Efficient Thermal Management in Multiprocessor SoCs / Ayse K. Coskun, Tajana S. Rosing, Kenny C. Gross // IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems. — 2009. — V. 28 (10). — P. 1503–1516. doi: 10.1109/TCAD.2009.2026357.
7. Sharifi Sh. PROMETHEUS: A Proactive Method for Thermal Management of Heterogeneous MPSoCs / Shervin Sharifi, Dilip Krishnaswamy, Tajana S. Rosing // IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems. — V. 32 (17). — P. 1110–1123. doi: 10.1109/TCAD.2013.2247656.
8. Jiaoa J. Integrated circuit failure analysis and reliability prediction based on physics of failure / Jian Jiaoa, Xinlin De, Zhiwei Chena, Tingdi Zhaoa // Engineering Failure Analysis. — 2019. — V. 104. — P. 714–726. doi: 10.1016/j.engfailanal.2019.05.021.
9. Ababei Cr. A survey of prediction and classification techniques in multicore processor systems / Ababei Cristinel, Moghaddam Milad Ghorbani // IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems. — 2018. — V. 30 (5). — P. 1184–1200.
10. Kreith F. Principles of heat transfer / Kreith Frank, Manglik Raj M., Bohn Mark S. 2012. Cengage learning.
11. Kim Y. Smartphone analysis and optimization based on user activity recognition / Kim Yeseong, Parterna Francesco, Tilak Sameer, Rosing Tajana S. // In: IEEE/ACM International Conference on Computer-Aided Design (ICCAD). — 2015. — P. 605–612.
12. Dutt R.N. Design of an RMS based Steady State Detector for a Cryogenic Temperature Control Process and Automation of Temperature vs Material Property Characterizations / Dutt R.N., Soni V., Kumar A., Das A., Kar S., Singh F., Datta T.S. // IFAC-PapersOnLine. — 2018. — V. 51 (1). — P. 407–412.
13. Bishop G. An introduction to the Kalman filter / Bishop Gary, Welch Greg, and others // In: Proc of SIGGRAPH, Course N 27599–23175. — 2001. — 41 p.
14. Bang S.-Y. Run-time adaptive workload estimation for dynamic voltage scaling / Bang Sung-Yong, Bang Kwanhu, Yoon Sungroh, Chung Eui-Young // IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems. — 2009. — V. 28 (9). — P. 1334–1347.
15. Karepova E. Statistical Data Analysis for Identification of Operating Modes of Electronic Units / Karepova E., Derevyanko V., Nesterov D., Shan'ko Yu. // AIP Conference Proceedings. — 2018. — V. 2025. — Art. 110002.
16. R Core Team (2014). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. E-print: <http://www.R-project.org/> (дата обращения: 04.09.2018).

МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ОДНОМЕРНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ⁴

Р.А. Козлитин, В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, Инженерно-технологический институт, кафедра производственных технологий и техносферной безопасности, Россия, Хакасия, г. Абакан, пр. Ленина, д. 92, 655017

kran80@mail.ru , udodov@khsu.ru

Введение

Фазовые переходы – один из ключевых вопросов физики твердого тела. В последнее время в различных областях физики и химии замечен значительный интерес к перколяционным одномерным структурам, состоящим из наноразмерных объектов, такие как нанотрубки и нанопроволоки [1-10]. Нанотрубки с уникальной одномерной структурой являются хорошими кандидатами для конструирования новых устройств, таких как: тонкопленочные транзисторы, химические сенсоры, проводящие электроды в фотоэлектрических и опто-электронных приборах и др. [2].

В литературе по теории одномерной перколяции рассчитаны ее основные характеристики для задачи узлов и задачи связей [1-2, 4]. В одномерной перколяционной задаче автокаталитических реакций результатов практически нет. Для моделирования автокаталитических реакций используется представление о взаимодействующих узлах перколяционной задачи [5, 6]. В зависимости от параметров взаимодействия узлов может изменяться перколяционный предел (порог протекания P_c) рассматриваемой задачи. В данной работе рассматривается задача перколяции на примере одномерной решетки, в условиях существования топохимического взаимодействия реагирующего узла (реагента) и превращенного узла (продукта). По типу взаимодействия задача разделялась на автокаталитическую (когда узел продукта способствует превращению узла реагента) и автоингибированную (торможение превращения). Совокупность связанных узлов в перколяционной задаче называется кластером.

Модель

Рассмотрим цепочку узлов, соединенных целыми связями, часть узлов которой испытала превращение (продукт реакции), другие еще нет (реагент). Вероятность превращения любого узла реагента (координаты которого выбираются с помощью генератора случайных чисел), равна [5-6]

$$P = P_0 * k^n, \quad (1)$$

где P_0 - вероятность превращения в отсутствии взаимодействия, определяется генератором случайных чисел; n – количество превращенных соседей, связанных с исходным узлом; k – коэффициент взаимодействия узлов: $k < 1$ – система с автоингибированным превращением, $k > 1$ – система с автокатализом, $k = 1$ – стохастическая задача перколяции [5-6].

Полученная величина P сравнивается с пороговой вероятностью P_t . Если $P > P_t$, то происходит превращения узла, иначе (как и в случае занятости места уже превращенным узлом) лишь увеличиваем счетчик времени. В моделируемой системе учитывалось взаимодействие как ближайших соседей, так и вторых соседей в одномерной решетке. Максимальное расстояние, на котором узлы могут быть связаны друг с другом при образовании кластера, назовем радиусом протекания (перколяции) R . Радиус протекания

⁴Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 19-41-190003.

имеет смысл расстояния в единицах постоянной решетки. Например, при $R=1$ связь идет только по ближайшим соседям цепочки. Для $R=2$ могут быть связаны первые и вторые соседи, для одномерной решетки это означает, что связи идут через один узел. Аналогично определяется произвольный радиус перколяции.

Модель позволяет производить расчеты порога протекания для произвольного радиуса перколяции в пределах размеров цепочки, с оборванными концами. Данную модель можно использовать для исследования изменения величины порога протекания и времени прохождения реакции всей системы в целом в зависимости от набора параметров пороговой вероятности P_t , коэффициента взаимодействия k , размеров системы N и радиуса протекания R . Предложенная модель может найти применение при исследовании химических реакций в нанотрубках, нанопроволоках и других одномерных объектах.

Результаты

Рассматривая одномерную перколяционную задачу с варьируемым взаимодействием узлов, мы получаем изменения значений порога протекания в поле учитываемых параметров. Результаты моделирования представлены на рисунках 1-3. На рисунках 1 и 2 рассмотрены зависимости значения порога протекания от коэффициента взаимодействия k , размеров системы N и пороговой вероятностью P_t при учете взаимодействия первых и вторых соседей в цепочке узлов ($R=2$). Количество опытов Q при компьютерном моделировании было фиксированным и равнялось 10000.

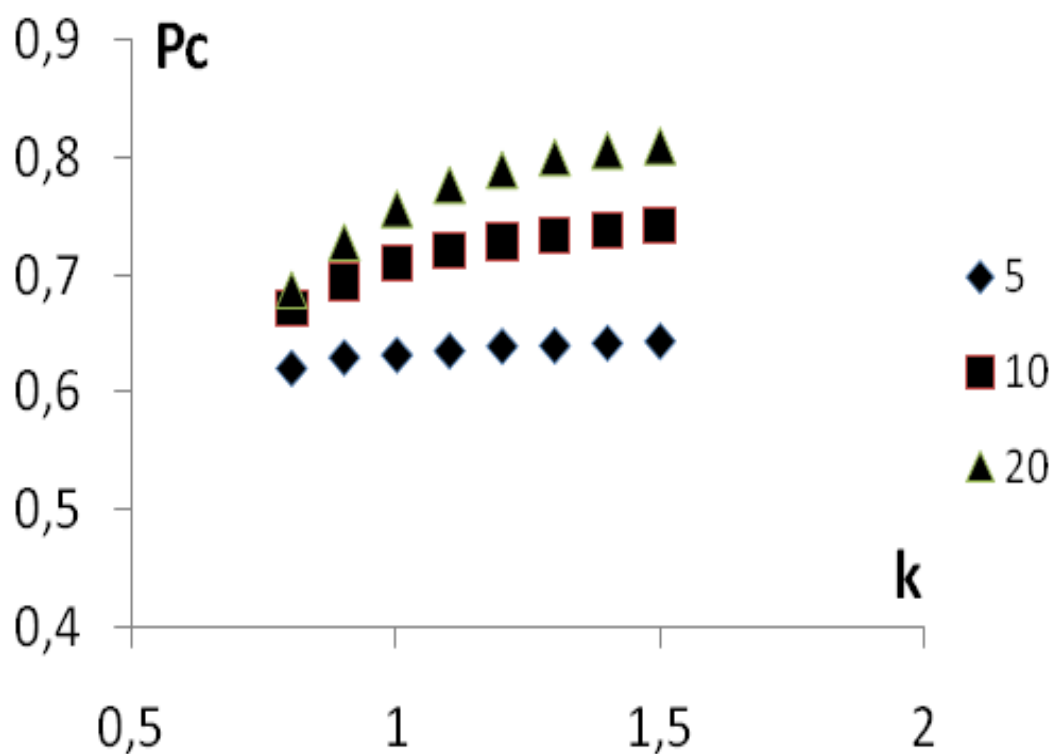


Рис.1. Порог протекания как функция коэффициента взаимодействия k , для $N=5, 10, 20$. $P_t=0.3$, $R=2$.

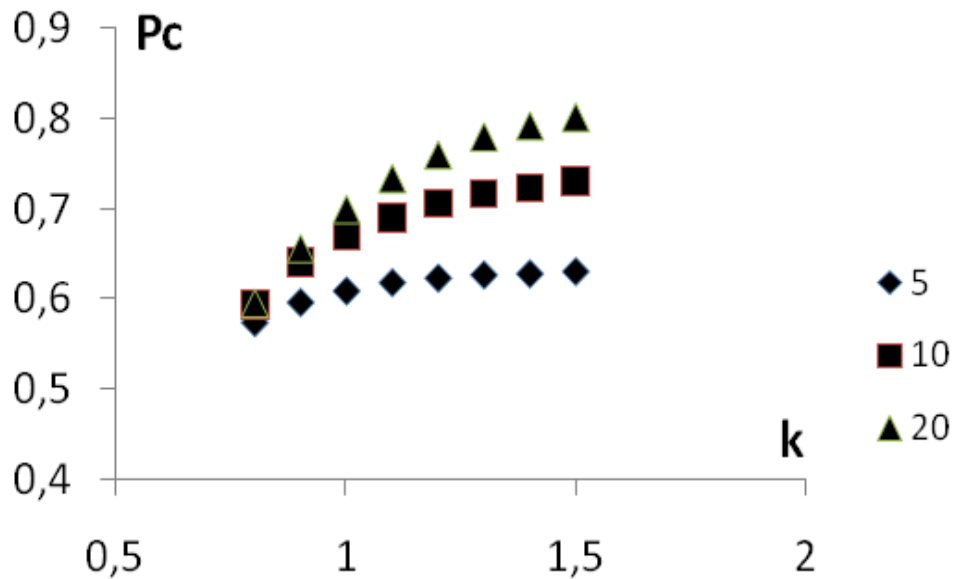


Рис.2. Порог протекания как функция k , для $N = 5, 10, 20$, $P_t = 0.5$, $R = 2$.

При увеличении пороговой вероятностью P_t при малых значениях коэффициента взаимодействия k (меньше единицы) порог протекания смещается в область меньших значений. При увеличении коэффициента взаимодействия k значения порога протекания возрастают. С увеличением размеров системы (при фиксированном радиусе перколяции) порог протекания возрастает. На рисунке 3 представлена зависимость времени достижения порога протекания t от коэффициента взаимодействия k , размеров системы N и пороговой вероятностью $P_t = 0.3$ при учете взаимодействия первых и вторых соседей в цепочке узлов ($R = 2$). С увеличением размеров системы время достижения порога протекания возрастает. Дальнейшее компьютерное моделирование подтвердило, что с увеличением пороговой вероятности P_t время достижения порога протекания растет. При этом плотность заселения одномерного кластера при возможном достижении порога уменьшается.

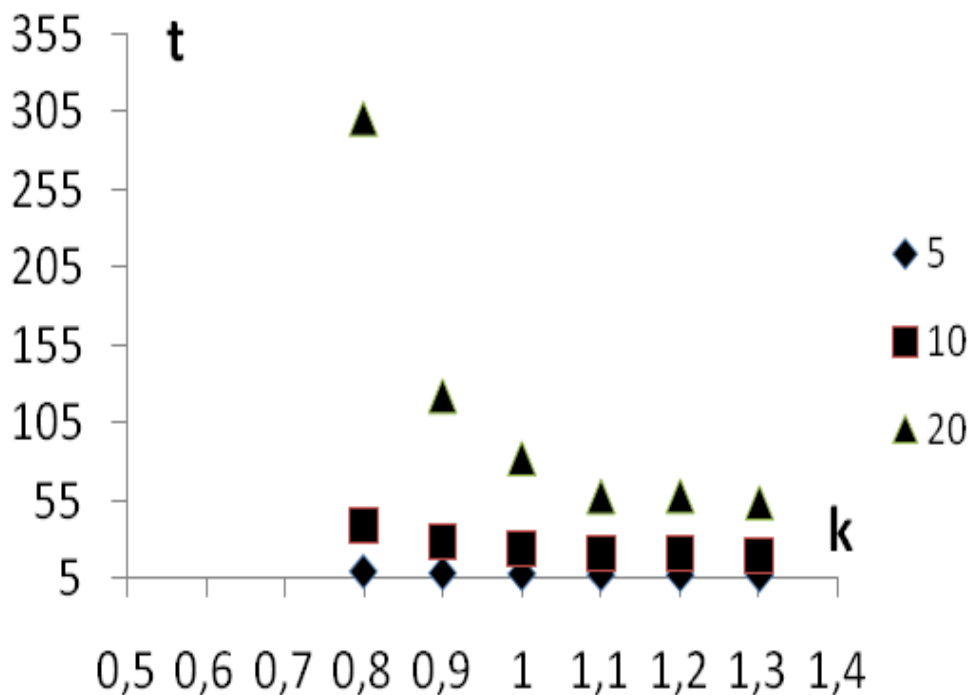


Рис.3. Время достижения порога протекания от k , для $N = 5, 10, 20$. $P_t = 0.3$, $R = 2$.

Выводы

Проведено компьютерное моделирование перколяции на примере одномерной решетки в условиях существования топомимического взаимодействия реагирующего узла (реагента) и превращенного узла (продукта). В ходе проведенного моделирования можно сделать предварительное заключение о повышении плотности заселения одномерного кластера (уменьшении количества «дыр» в нем) при росте коэффициента взаимодействия. С увеличением пороговой вероятности P_t время достижения порога протекания растет. Полученные результаты и дальнейшее их развитие, на наш взгляд, позволяет достаточно полно отразить понятие «структура перколяционного кластера» с точки зрения процесса химического превращения в одномерных системах. Для многомерных систем наблюдаются похожие закономерности [5, 6]. Рассматривая одномерную задачу перколяции с варьируемым взаимодействием узлов, можно получить изменение интересующей нас характеристик в поле учитываемых параметров.

Список литературы

1. Спирин Д.В. Немагнитные примеси и перколяционные эффекты в одномерном изинговском магнетике/ Д.В.Спирин, В.Н.Удодов, А.И.Потекаев // Известия вузов. Физика. — 2009. — № 9. — С. 145-150.
2. Усатова М.Г. Смешанная задача в одномерной теории перколяции для конечных систем/ М.Г.Усатова, Р.А.Козлитин, В.Н.Удодов // Математическое моделирование. — 2015. — Т. 27. — № 12. — С. 88-95.
3. Попов А.А. Особенности политипных превращений при изменении внешнего сдвигового напряжения и температуры/ А.А.Попов, В.Н.Удодов, А.И.Потекаев. // Известия вузов, Физика. — 1999. — №9. — С. 80-86.
4. Мартыненко М.В. Аномальная диффузия в модели с переменным радиусом протекания/ М.В.Мартыненко, В.Н.Удодов В.Н., А.И.Потекаев // Известия вузов. Физика. — 2000. — №10. — С.67-70.
5. Мамылов С.Г. Моделирование автокаталитических реакций в твердом теле. Фрактальная размерность перколяционных кластеров/С.Г. Мамылов // Журнал химической физики— 1998. —Т.17 — №10. — С.59-66.
6. Мамылов С.Г. Моделирование автокаталитических реакций в твердом теле. Перколяционный предел и критический индекс проводимости/С.Г. Мамылов //XV Международная школа-семинар ЭДС — 2018. —С. 59.
7. Соколов И.М. Размерности и другие критические показатели в теории протекания/И.М. Соколов // УФН. —1986. — Т. 150, вып. 2. — С. 221-255.
8. Герега А.Н. Моделирование кластерных структур в материале: силовые поля и дескрипторы/ А.Н.Герега // Физическая мезомеханика. — 2013. —Т. 16, № 5. — С. 87-93.
9. Герега А.Н. Управление свойствами композиционных материалов. Перколяционный подход / А.Н.Герега, В.Н.Выровой // Вестник Одесской государственной академии строительства и архитектуры. —2005.— № 20 —С. 56-61.
10. Герега А.Н. Ковер Серпинского с гибридной разветвленностью: перколяционный переход, критические показатели, силовое поле/ А.Н.Герега, Н.Г.Дрик, А.П.Угольников // УФН. — 2012. — Т. 182, вып. 5. — С. 555-557.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ РЕЛЬЕФА НА ДИНАМИКУ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ И РОСТ ДРЕВОСТОЕВ

Н.Ф. Овчинникова

Институт леса им. В.Н.Сукачева СО РАН, Федеральный исследовательский центр
«Красноярский научный центр СО РАН», nf@ksc.krasn.ru

В лесу, как экосистеме, доминантной подсистемой выделяют древостой, который формирует особую среду, имеет определенный тип обмена веществом и энергией. Чтобы непосредственно проследить динамику даже одного поколения образующих древостой деревьев, требуются усилия нескольких поколений исследователей, что практически трудно выполнимо. Большинство сведений о динамике лесов собраны косвенным методом временных рядов, сравнительного изучения растительных сообществ, составляющих пространственные сукцессионные ряды. Само предположение, что изучение изменений во времени можно заменить исследованием изменений сообществ в пространстве, вносит субъективизм еще на стадии сбора материала. Хотя постоянно создаются методы изучения многолетней динамики в наиболее короткие сроки, достаточно разработанной единой количественной теории возрастной динамики популяций древесных растений не существует. Имеются оригинальные количественные методы прогноза процессов роста отдельных популяций древесных растений, но для совокупности популяций, лесных многовидовых и разновозрастных сообществ, существуют лишь словесные описания динамических процессов. Ведущиеся с середины XVIII в. исследования динамики древостоев, привели к противоречивым выводам о общих закономерностях [5].

При анализе процесса динамики древостоев, кроме характеристики роста необходимы знания о механизмах дифференциации и отпада деревьев, о меняющейся со временем структуре сообщества. Изучение последней в пространственном отношении имеет не только частное теоретическое и практическое, но и общебиологическое значение. Сложилось, что одновидовой одновозрастный древостой, ограниченный рамками отдельного фитоценоза (насаждения, биогеоценоза) называется популяцией, ценопопуляцией, ценозом. Считается, что каждый фитоценоз приурочен к однородным условиям местообитания. Исследования структуры фитоценозов, начавшееся в равнинных условиях, позволили углубить знания закономерностей биологической устойчивости лесов, усовершенствовать методики научных исследований, таксации, учета и оценки естественного возобновления, разработать теорию, методы рубок ухода и главного пользования [5, 7, 15, 17, 18, 22]. Но, в отличие от равнинных, горные леса имеют свою специфику.

За счет большого биоразнообразия, контрастности и мозаичности условий произрастания в горах биогеоценозы с разной структурой территориально сближены, сосредоточены на коротких расстояниях, по сравнению с равнинными. Отсюда возникает необходимость дифференцировать решения исследовательских и прикладных задач с учетом специфики природного разнообразия горных лесов, их горизонтальной структуры [15]. Влияние высотно-климатических поясов и экспозиции склона на древостой общепризнано, а влияние самого склона, как фактора внешней среды, практически не учитывается.

Одна из существующих гипотез – становление пространственно-возрастной структуры древесных ценозов в рамках онтоценогенеза в ценоячейках, где развитие особей синхронизировано. Однако объем пространства, площадь синхронизации, соизмерим с расстоянием, на котором сказывается влияние одной особи на другую. Когда пространство превышает радиус индивидуального влияния, причины, синхронизирующие фазы динамики

удаленных друг от друга особей, могут лежать только вне сообщества. Необходимо доказать, каким образом особи ценопопуляции оказываются взаимосвязанными за пределами осязаемости их взаимодействий. Сложность заключается в том, что приспособляясь к условиям роста, деревья, соответственно генотипическим особенностям, размерам и состоянию, вырабатывают специфический тип роста, от которого зависит их внутривидовая изменчивость и дифференциация [5, 7, 8, 17, 22], в результате которой в каждом древесном ценозе формируется свое размещение особей на площади.

Для изучения пространственной структуры древостоев предлагаются различные методы [1 – 5, 16, 19, 21]. Статистическими методами сопоставляется характер фактического распределения особей в формируемых ими сообществах с ожидаемым случайным распределением. Принято выделять три типа размещения деревьев: случайное, равномерное (регулярное, разреженное) и групповое (агрегированное, контагиозное).

В основе нашей работы лежат наиболее достоверные результаты исследований динамических процессов в растительном покрове, полученные на постоянных пробных площадях в ходе длительного мониторинга (с 60-х годов XX в.). Постоянные пробные площади заложены в различных лесорастительных условиях в древостоях разного видового состава, возраста. Согласно принятой методике [3, 9, 11, 20], на пробных площадях сделана съемка микрорельефа, вся древесная растительность закартирована, во все учеты зафиксированы морфометрические параметры и особенности онтогенеза каждого дерева с индивидуальным номером. Последнее исключает ошибки при периодических исследованиях. С бумажных носителей часть собранных данных перенесена в пополняемую электронную базу данных, где они изначально были организованы и хранятся в виде электронных таблиц пакета Microsoft Excel [8]. Часть из них переведена в среду Microsoft Access. В 2011 г. зарегистрирована база данных «Учеты деревьев на постоянных пробных площадях Красноярского края» [10]. На сегодняшний день в базе данных более 30 тыс. записей. В каждой содержится количественная и качественная информация о морфологии и особенностях онтогенеза в нескольких временных срезах закартированных деревьев и подроста разных лесобразующих и подлесочных пород Сибири с 14 постоянных пробных площадей, расположенных на разной высоте над уровнем моря в двух районах Красноярского края. Наибольший ряд наблюдений с 1968 по 2013 гг.

Нами для анализа данных сплошных периодических учетов на постоянных пробных площадях составлены с учетом координат «матрицы» распределения древесной растительности на учетных площадках [11, 12]. Для оценки типа размещения деревьев на основе планов их картирования использован критерий относительной дисперсии, характеризующий отклонение от случайного распределения при заданном размере учетных площадок [14]. При этом признаком случайного распределения растений является равенство среднего значения густоты

(N) и дисперсии (σ^2), то есть $\frac{\sigma^2}{N} = 1$; при равномерном типе – $\frac{\sigma^2}{N} < 1$, а при групповом

размещении – $\frac{\sigma^2}{N} > 1$. Расчеты показали, что на склоне на одной и той же территории (постоянной пробной площади), один и тот же метод определения типа размещения деревьев по данным ленточных трансект, вытянутых поперек склона и идущих вдоль склона, может дать противоречивый результат (табл. 1).

Таблица 1.

Типы размещения деревьев сосны верхнего яруса на постоянной пробной площади в
трансектах поперек и вдоль склона

Сред- ний воз- раст дре- востоя , лет	N , шт.	$\pm m$	σ^2	$\frac{\sigma^2}{N}$	Тип размещени я	N , шт.	$\pm m$	σ^2	$\frac{\sigma^2}{N}$	Тип размещени я
42	60.1	6.86	470.5	7.83	групповой	60.1	2.92	85.2	1.42	групповой
51	52.8	5.91	348.9	6.61	групповой	52.8	2.37	56.4	1.07	близко к случайном у
64	43.1	4.33	187.1	4.34	групповой	43.1	1.84	33.9	0.79	равно- мерный
71	32.6	2.37	56.1	1.72	групповой	32.6	0.98	9.6	0.29	равно- мерный
86	29.5	1.58	24.9	0.84	равно- мерный	29.5	0.87	7.6	0.26	равно- мерный

Из табл. 2 видно, что при меняющихся с возрастом древостоя средней густоте (N) и запасе (M), стандартные отклонения (σ), указывающие на разбросанность значений рядов распределения численности числа деревьев и суммы объемов их стволов в трансектах, расположенных вдоль или поперек склона, имели существенные различия между собой.

Таблица 2

Динамика густоты и запаса верхнего яруса древостоев и их статистических показателей
в зависимости от положения на склоне

Год	Густота			Запас		
	N, шт. в полосе	σ и t^* по склону		M, м³ в полосе	σ и t по склону	
		вдоль	поперек		вдоль	поперек
Сосновый в Восточном Саяне [12]						
1968	60.1	9.23 (20.59)	21.69 (8.76)	4.97	0.64 (24.69)	0.84 (9.29)
1977	52.8	7.51 (22.23)	18.68 (8.94)	7.57	0.99 (24.44)	1.07 (9.12)
1990	43.1	5.82 (23.42)	13.68 (9.96)	10.14	1.28 (22.22)	1.68 (7.07)
1997	32.6	3.10 (33.27)	7.49 (13.77)	11.10	1.60 (22.03)	1.45 (8.93)
2012	29.5	2.76 (33.81)	4.99 (18.68)	13.56	1.57 (23.30)	3.87 (4.12)
Осиновый в Западном Саяне [11]						
1976	32.0	4.99 (20.3)	9.73 (10.4)	2.38	0.55 (14.06)	0.84 (9.29)
1980	27.3	2.83 (30.5)	7.82 (11.04)	3.09	0.72 (11.04)	1.07 (9.12)
1985	18.6	3.53 (16.66)	5.13 (11.47)	3.76	0.97 (11.47)	1.68 (7.07)
1990	15.6	3.37 (14.64)	4.58 (10.77)	4.1	1.16 (10.77)	1.45 (8.93)
1997	12.4	3.1 (12.65)	4.53 (8.66)	5.05	1.46 (8.66)	3.87 (4.12)
2008	7.9	2.28 (10.96)	3.2 (7.62)	5.38	2.03 (7.62)	2.19 (7.77)

*Критерий Стьюдента, табличное значение t при уровне значимости 0.01 и числе степеней свободы 9 составляет 2.82.

Это указывает на направленное изменение плотности ценопопуляций лесообразующих видов на склонах. Для таких условий В. С. Ипатов и Л. А. Кирикова [4] используют термин

«клинальное размещение». Можно предположить, что наблюдающееся различие статистического показателя густоты древостоя в трансектах, расположенных вдоль и поперек склона, обусловлено влиянием параметров среды на размещение деревьев, связанных с рельефом местности на пробных площадях [11, 12].

При том, что в горных лесах экспозиция и крутизна склона являются одними из основных факторов, определяющих условия произрастания деревьев [6, 7, 18], топографическая съемка пробных площадей сводится до сих пор к созданию карт с горизонталями, которые не позволяют проанализировать даже однородность древостоев на склоне. При закладке постоянных пробных площадей с нумерацией и картированием деревьев, такая характеристика, как высота местности у основания ствола каждого дерева, не определяется. Предложен способ расчетного определения высоты места основания ствола деревьев на пробной площади [13]. Он включает разбивку площади на квадраты, обычно со сторонами 5 или 10 м, нивелирную съемку с определением высоты местности в углах каждого квадрата и картирование деревьев относительно его сторон.

Для определения высоты места произрастания дерева в условном квадрате $OABC$ сторона OC принимается за ось координат X , а сторона OA – за ось координат Y . Проводим лучи через точку начала координат (O) и точки местонахождения деревьев (D_n) с координатами X_d, Y_d до пересечения со сторонами квадрата. Получаем два варианта определения высоты места основания ствола дерева.

Вариант 1. Если отношение координат дерева $\frac{X_d}{Y_d} \geq 1$, то луч из точки O пересечет сторону квадрата BC в точке E . Длину отрезка EC находим из подобия треугольников ODD_i и OEC , где OD_i – координата дерева X_d , DD_i – координата дерева Y_d , а OC – длина стороны квадрата (L). Тогда длина отрезка EC равна

$$EC = Y_d \times \frac{L}{X_d}. \quad (1)$$

Высота местности в точке E (H_E) находится по формуле 2:

$$H_E = H_C + (H_B - H_C) \times \frac{Y_d}{X_d}, \quad (2)$$

а высота места основания ствола дерева (H_D) находится по формуле 3:

$$H_D = H_0 + (H_E - H_0) \times \frac{X_d}{L}, \quad (3)$$

где H_B, H_C и H_0 – высоты местности в углах квадрата в абсолютных или относительных величинах.

Вариант 2. Если $\frac{X_d}{Y_d} \leq 1$, то луч из точки O пересечет сторону квадрата AB в точке F .

Длину отрезка AF находим из подобия треугольников ODD_i и $0AF$, где DD_i – координата дерева X_d , OD_i – координата дерева Y_d , а OA – длина стороны квадрата (L). Тогда длина отрезка AF

равна

$$AF = X_d \times \frac{L}{Y_d}. \quad (4)$$

Высота местности в точке F (H_F) находится по формуле 5:

$$H_F = H_A + (H_B - H_A) \times \frac{X_d}{Y_d}, \quad (5)$$

а высота места основания ствола дерева определяется по формуле 6

$$H_D = H_0 + (H_F - H_0) \times \frac{Y_d}{L}, \quad (6)$$

где H_A , H_B , и H_0 , как и в варианте 1 – высота местности в соответствующих точках квадрата.

Компьютерная программа позволяет по имеющимся данным и разработанному алгоритму определять высоту местности у основания ствола каждого дерева и более полно оценивать влияние рельефа на лесную растительность. Современные знания позволяют сделать вывод о неравномерном росте деревьев на склонах и необходимости учета клинального размещения при исследовании лесных экосистем, моделировании и проведении лесохозяйственных мероприятий. Глубокое познание процессов развития лесных экосистем и механизмов их устойчивости возможно только путем долговременного изучения динамики пространственной структуры и роста древостоев на постоянных пробных площадях. В настоящее время необходимы кооперация ученых, усилия разных организаций и ведомств для сохранения объектов и данных стационарных исследований, важность и актуальность которых не теряется со временем и осознается во всем мире [21].

Список литературы

1. Анализ структуры древесных ценозов / А.И.Бузыкин [и др.]. – Новосибирск: Наука. Сиб. отделение, –1985. – 95 с.
2. Грабарник, П.Я. Анализ горизонтальной структуры древостоя: модельный подход / П.Я.Грабарник // Лесоведение. – 2010. – №2. – С.77-85.
3. Ермоленко, П.М. Пространственно-временная структура древостоев темнохвойных лесов Западного Саяна / П.М.Ермоленко // В: Продуктивность и структура лесных сообществ. – Красноярск: ИЛиД, – 1985. – С. 59-70.
4. Ипатов, В.С. Фитоценология: учебник/ В.С.Ипатов, Л.А.Кирикова. – СПб.: Изд-во СПб. ун-та, – 1997. – 316 с.
5. Кузьмичев, В.В. Закономерности динамики древостоев / В.В.Кузьмичев. – Новосибирск: Наука, – 2013. – 208 с.
6. Михайлов, Н. А. Условия местопроизрастания, как основа лесного хозяйства / Н.А.Михайлов. – Петроград: «Якорь», – 1914. – 88 с.
7. Морозов, Г.Ф. Учение о лесе / Морозов Г. Ф. – М.-Л.: ГОСЛЕСБУМИЗДАТ, – 1949. – 455 с.
8. Овчинникова, Н.Ф. Возобновительные процессы в производных лесах черневого пояса Западного Саяна: Автореф. дис. ...канд.биол.наук.: 03.00.16 и 06.03.03. – Красноярск: Ин-т леса СО РАН, – 2005. – 17 с.
9. Овчинникова, Н.Ф. О долговременном мониторинге лесной растительности на постоянных пробных площадях / Н.Ф.Овчинникова // Аграрный вестник Приморья. – 2016, – №1. – С.

10. Овчинникова, Н.Ф. Учеты деревьев на постоянных пробных площадях Красноярского края / Н.Ф.Овчинникова, А.Е.Овчинников // Свидетельство о государственной регистрации базы данных №2011620706, заявл. 05.08.2011, зарег. 30.09.2011.
11. Овчинникова, Н.Ф. Динамика структуры осинового древостоя в черневом поясе Западного Саяна / Н.Ф.Овчинникова, А.Е.Овчинников // Лесоведение. – 2016, – №6. – С. 418-425.
12. Овчинникова, Н.Ф. Влияние склона на рост соснового древостоя и динамику его горизонтальной структуры на постоянной пробной площади в низкогорье Восточного Саяна / Н.Ф.Овчинникова, А.Е.Овчинников // Математическое моделирование в экологии: мат. V нац-ой науч. конф. с междунар. уч-ем, Пущино, 16-20 окт. 2017 г. – Пущино: ИФХ иБПП РАН, – 2017. – С.144-146.
13. Овчинникова, Н.Ф. Способ определения высоты места произрастания деревьев на склонах / Н.Ф. Овчинникова, А.Е. Овчинников // Актуальные проблемы сохранения биоразнообразия и экологически сбалансированного природопользования на Западном Кавказе: мат. Междунар. конф., Сухум, 5-8 мая 2019 г. – Нальчик, –2019. – С. 110-111.
14. Одум, Ю. Основы экологии: Пер. с англ. / Ю.Одум, – М.: Мир, – 1975. – 740 с.
15. Проскуряков, М.А. Горизонтальная структура горных темнохвойных лесов / М.А.Проскуряков. – Алма-Ата: Наука, – 1983. – 216 с.
16. Рогозин, М.В. Леса-долгожители вблизи города Перми и их структура / М.В.Рогозин, П.А.Красильников // Антропогенная трансформация природной среды. – Пермь, ПГНИУ, – 2017. – Вып. 3.– С.165-168.
17. Сеннов, С.Н. Итоги экспериментального изучения конкуренции в древостоях / С.Н.Сеннов // Известия С.-Петербург. лесотехн. акад. – СПб, – 1993. – С. 160-172.
18. Сукачев, В. Н. Избранные труды / В.Н.Сукачев, Ред.Е.М.Лавренко. – Т. I: Основы лесной типологии и биогеоценологии. – Л.: Наука, – 1972. – 418 с.
19. Illian, J. Statistical Analysis and Modelling of Spatial Point Patterns / J.Illian at all, – Chichester, USA, Wiley, – 2008. – 560 p.
20. Ovchinnikova N.F. Long-term forest vegetation inventories in West Sayan mountains / N.F. Ovchinnikova // Boreal Forest in a Changing World: Challenges and Needs for Actions: Proceedings of the international conference. August 15-21 2011, Krasnoyarsk, Russia. – Krasnoyarsk: Sukachev Institute of Forest SB RAS. – 2011. – P. 42-46.
21. Permanent Sample Plots: More than just forest data Proceedings of International Workshop on Promoting Permanent Sample Plots in Asia and the Pacific Region: Bogor, Indonesia, 3-5 August 2005/ed. By H.Priyadi, P.Gunarso, M.Kanninen. – Bogor, Indonesia: Center for International Forestry Research (CIFOR), – 2006. – 169 p.
22. Pretzsch, H. Forest Dynamics, Growth and Yield / H.Pretzsch, – Springer-Verlag Berlin Heidelberg. – 2009. – 664 p.

ПРИНЯТИЕ РЕШЕНИЙ В ХИМИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

А.Л. Осипов, В.П. Трушина

Новосибирский государственный университет экономики и управления, alosip@mail.ru

Статья посвящена исследованию статистических методов принятия решений и информационно-коммуникационных технологий, позволяющих оценивать биологическую активность химических веществ. В качестве факторов использовались различные подструктурные фрагменты, порождаемые из структурных формул молекул с помощью информационно-коммуникационных технологий, а также инфракрасные спектры поглощения. Вычислительные эксперименты продемонстрировали высокую эффективность прогнозирования за счет использования статистических методов принятия решений и компьютерных технологий.

Выявление закономерностей между биологическими свойствами химических веществ и строением их молекул составляет одну из важнейших задач теории и практики химико-биологических исследований. Достижения в решении этой проблемы определяют и успехи в создании методологических основ конструирования химических веществ с заранее заданными лекарственными, пестицидными и другими биологическими свойствами [1]. Целью данной работы является создание методов и моделей предсказания биологической активности химических веществ. Для ее реализации решаются следующие задачи: создание фактографических баз химико-биологических данных; построения математических подходов для установления количественной связи между структурой вещества и биологической активностью; разработка программных средств, для реализации используемых математических моделей в рамках разработанных подходов.

Для построения закономерностей используются различные подходы, основанные на определенных предпосылках. Наиболее существенные – объективная связь между строением соединений и его биологическим действием, возможность адекватного представления структуры соединения на принятом языке описания, возможность экстраполяции найденных закономерностей на свойства новых соединений. Статья содержит результаты исследований статистических алгоритмов распознавания биологической активности химических веществ. Также исследовалась возможность предсказания биологической (пестицидной) активности молекул по их инфракрасным спектрам поглощения, соответствующим образом дискретизованным, при этом в качестве признаков использовались частоты пиков поглощения в определенных спектральных интервалах. В вычислительных экспериментах использовались простейшие виды автоматически порождаемых подструктурных дескрипторов следующего типа: атом (микрофрагмент) – связь - атом (микрофрагмент) и атом (микрофрагмент) с учетом всего окружения первого уровня; те же дескрипторы, но с дополнительным указанием нахождения атома (микрофрагмента) в цепи или кольце; атом (микрофрагмент) с указанием валентности, кратности нахождения в структуре, размещения в цепи или кольце; атом (микрофрагмент) с указанием валентности, кратности нахождения в структуре, с метками, показывающими, где в цепи или кольце находятся соответствующий атом и его связи.

Для предсказания пестицидной активности по ИК спектрам использовался статистический метод принятия решений (байесовский алгоритм в предположении независимости всех признаков). Для распознавания биологической активности химических соединений по их ИК спектрам обучающая выборка содержала 100 активных и 122 неактивных вещества. Экзамен проводился на трех выборках объемом 100, 100 и 100 соединений. ИК спектры кодировались аналогично работе [2]. Полученные результаты экспериментов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты предсказания пестицидной активности по ИК спектрам

Модель распознавания	Процент ошибок			
	Обучение	Экзамен		
		объем выборки - 100	объем выборки - 100	объем выборки - 100
Байесовская модель на основе минимаксного правила	15,2	14,1	16,5	18,4

Средний процент ошибок на экзамене по трем выборкам составил 16,3.

Для предсказания биологической (пестицидной) активности по подструктурным фрагментам использовался байесовский алгоритм принятия решений в предположении независимости всех признаков. Для проверки эффективности байесовского алгоритма были выбраны два массива химических веществ.

В качестве массива биологически активных веществ была выбрана фактографическая база данных по мировому ассортименту пестицидов [3-4]. Она содержит химико-биологическую и структурную информацию о 757 химических веществ трех видов биологической активности: гербицидной, инсектицидной и фунгицидной.

В качестве массива неактивных химических соединений был выбран структурный файл 2800 органических веществ из атласа спектров [5]. Задача выявления критериев распределения соединений по классам активные и неактивные, внутри класса активных – по трем видам активности решалась с использованием упомянутых выше множеств дескрипторов и байесовских решающих правил.

При использовании минимаксного правила, условные вероятности ошибок составляют от 10% до 15% в зависимости от типа используемых подструктурных дескрипторов. Кривые ошибок на обучении и экзамене практически не отличаются, что свидетельствует об устойчивости полученных оценок процента ошибок при использовании соответствующих статистических решающих правил.

Для выработки критериев определения вида активности химического соединения, если оно признано активным, выборка активных соединений разбивалась на три группы активности: гербицидную, инсектицидную и фунгицидную. Решения принимались по байесовскому алгоритму и дескрипторам типа: атом (микрофрагмент)

– связь - атом (микрофрагмент) и атом (микрофрагмент) с учетом всего окружения первого уровня.

В таблице 2 показано число правильных ответов и процент ошибок при предсказании пестицидной активности по трем классам.

Таблица 2

Число правильных ответов и процент ошибок при прогнозе активности

Активность	Прогнозируемый класс активности			Процент ошибок
	гербицид	фунгицид	инсектицид	
Гербицидная	225	7	7	5,8
Фунгицидная	17	110	7	17,9
Инсектицидная	12	4	193	7,6

Полученные экспериментальные результаты демонстрируют, что описание структуры химических веществ на языке атомов и связей с учетом или без учета первого окружения и статистическая теория принятия решений делает весьма эффективным вычисление вероятностей гипотез об активности гипотетических структур без привлечения более сложных описаний и алгоритмов.

Разработанная методология на основе статистических моделей и алгоритмов теории принятия решений и линейных регрессионных моделей [6-10] позволяют с высокой степенью точности предсказывать биологическую активность и различные свойства химических веществ, что дает право рекомендовать разработанные модели для широкого практического использования.

В перспективе следует пополнять фактографические базы данных по биологическим и физико-химическим свойствам веществ, что позволит улучшить качество прогноза за счет увеличения экспериментального материала.

В статье проведено исследование математических моделей для распознавания биологической активности химических веществ. Приведены многочисленные компьютерные расчеты и показана эффективность предлагаемых моделей для предсказания биологической (пестицидной) активности. Созданный комплекс программных средств для распознавания биологической активности и физико-химических свойств [11] позволит планировать эксперименты по синтезу соединений с заданными биологическими и физико-химическими свойствами.

Данная информационно-вычислительная система позволяет в онлайн режиме создавать обучающие и экзаменационные выборки из фактографических баз химических данных, задавать или выбирать из меню различные способы описания молекулярной структуры или иных признаков, выбирать различные модели статистической обработки данных для построения зависимостей о принадлежности к тому или иному классу биологической активности, а также применять структурно-аддитивные и неаддитивные математические модели, которые широко используются в корреляциях структура – свойства химических веществ[12].

Список литературы

1. Осипов А.Л. Информационные технологии в задачах классификации токсических веществ / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, Р.Е. Баглай // *International Journal of Advanced Studies*. — 2017. — Т. 7. — № 4-2. — С.79-84.
2. Нигматуллин Р.С. Статистический метод составления и использования корреляционных таблиц / Р.С. Нигматуллин, В.И. Смирнов // *Журнал прикладной спектроскопии*. — Т. XXI, вып. 2. — 1974. — С.307-314.
3. Осипов А.Л. Теория принятия решений в химико-биологических исследованиях / А.Л. Осипов, В.П. Трушина // *В мире научных открытий*. — 2015. — № 4.2 (64). — С.843-849.
4. Трушина В.П. Математические модели предсказания физико-химических свойств / В.П. Трушина, А.Л. Осипов, А.Н. Мирошников // *В мире научных открытий*. — 2015. — № 8. — С.396-401.
5. The Sadtler Standart *Spectra* ^{13}C , NMR Spectra. — Philadelphia. — 1975-1982. — V. 1-65.
6. Осипов А.Л. Сравнительный анализ методов моделирования липофильности химических веществ / А.Л. Осипов, В.П. Трушина // *International Journal of Advanced Studies*. — 2018. — Т. 8. — № 1-2. — С.142-149.
7. Осипов А.Л. Анализ и прогнозирование липофильности лекарственных веществ на основе физико-химических свойств / А.Л. Осипов, В.П. Трушина // *International Journal of Advanced Studies*. — Volume 8. — No 2-2. — 2018. — С. 32-37.
8. Осипов А.Л. Компьютерные методы оценки параметров токсикологии / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, М.В. Яблонских // *International Journal of Advanced Studies*. — 2017. — Т. 7. — № 1-2. — С.49-54.
9. Осипов А.Л. Компьютерные методы оценки пожарной опасности веществ / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, Ф.Л. Осипов // *International Journal of Advanced Studies*. — Volume 7. — Number 2-2. — 2017. — С.97-107.
10. Осипов А.Л. Моделирование концентрационных пределов воспламенения химических веществ / А.Л. Осипов, В.П. Трушина, Д.В. Пятницев, И. О. Павлик // В сборнике: Материалы XIX Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2015), — 2015. — С.165-167.
11. Осипов А.Л. Об использовании моделей статистического распознавания в системе виртуального скрининга химических веществ / А.Л. Осипов, Л.К. Бобров // *НТИ*. — Серия 2. Информационные процессы и системы. — № 7. — 2012. — С.1-6.
12. Осипов А.Л. Методы обнаружения закономерностей и извлечения знаний в химических исследованиях / А.Л. Осипов // В сборнике: Знания – Онтологии – Теории (ЗОНТ-2015). Материалы Всероссийской конференции с международным участием. Российская академия наук, Сибирское отделение; Институт математики им. С.Л. Соболева. — 2015. — С.82-86.

MATHEMATICAL MODELLING OF ETHANOL PYROLYSIS IN A COMMERCIAL CHEMICAL VAPOR DEPOSITION REACTOR

Ilya I. Ryzhkov¹, Andrey V. Minakov², M.M. Simunin²

¹Institute of Computational Modelling SB RAS, Krasnoyarsk, Russia

²Siberian Federal University, Krasnoyarsk, Russia

E-mail: rui@icm.krasn.ru

1. Introduction

Chemical vapor deposition (CVD) is a process of depositing a thin solid film on a substrate through chemical reactions of gaseous species [1]. It involves the reactions in the gas phase initiated by high temperature (and possibly by radiation or plasma), and reactions, which occur at the surface leading to the formation of a solid deposit [2]. In carbon materials technology, pyrolytic carbon production via CVD is one of the most important processes [3]. It is widely used for preparing carbon-carbon (C/C) composites by densification of porous preforms.

Typical precursors for pyrolytic carbon formation are hydrocarbons (methane, ethylene, acetylene, propane), which are pyrolyzed at high temperature (900–1300 C) and subsequently deposit on a substrate as result of surface chemical reactions. The critical parameters controlling the deposit are the precursor gas, temperature, pressure, residence time (volume of reactor isothermal section divided by the volumetric flow rate), and ratio of surface area to free reactor volume [3]. The latter parameter determines the interaction between homogeneous and heterogeneous reactions as well as their relative contribution to the whole processes [4].

Apart from hydrocarbons, ethanol can be considered as an attractive alternative precursor for pyrolytic carbon formation. The experimental studies of ethanol pyrolysis were reported in [5,6] and the major observed products were hydrogen, water, carbon monoxide, ethylene, methane, acetaldehyde, and formaldehyde. The results were compared with the detailed kinetic model of ethanol oxidation by Marinov [7], which also takes into account the kinetics of thermal ethanol decomposition. Some overestimation of experimental data by the model calculations was found at 950 K [8]. At the same time, the simulations based on Marinov mechanism showed a very good agreement with the experimental results on ethanol pyrolysis in a shock tube [9]. The synthesis of pyrolytic carbon composites using ethanol as a precursor was reported in [10]. It was found that the ethanol exhibits much higher deposition rate in comparison with methane.

By using ethanol as the carbon source, a new simple catalytic CVD technique to synthesize high purity single-walled carbon nanotubes at low temperature was proposed in [11]. The influence of reaction temperature on the synthesis of carbon nanotubes and nanofibers from ethanol was investigated in [12]. We believe that ethanol would be a promising precursor for synthesis of carbon nanotubes inside the Anodic alumina membranes. The latter represent an array of aligned cylindrical nanopores with controlled diameter [13], and can be employed for chemically selective molecular transport and separation of complex molecular mixtures [14]. The ethanol CVD is also a promising technique for growing carbon layers on alumina nanofiber membranes (previously obtained using propane in [15,16]).

The prediction and control of carbon deposition kinetics on the surface of nanopores and nanofibers require extensive experimental and modelling studies. In this work, we perform 2D and 3D numerical modelling of ethanol pyrolysis in a commercial CVD reactor. This study will serve as the basis for the development of coupled gas phase and surface reaction model of carbon layer growth on nanoporous alumina substrates.

2. Mathematical model

The chemical vapour deposition reactor consists of a cylindrical mullite tube with inlet and outlet sections made of stainless steel flanges (Fig. 1). The tube is mounted inside the electric

furnace, which keeps the walls of the heated section at a given temperature T_w by resistive heating. Two cylindrical thermoblocks made of porous alumina are used to prevent the heat loss. The substrate in the form of a thin circular disc is placed in the tube center. The mixture of ethanol, water, and inert gas (argon) is supplied through the inlet with the total volume flow rate Q and temperature T_i . The gaseous mixture is prepared by the vaporization system, where the liquid mixture of ethanol and water with the volume flow rate Q_{EW} and ambient temperature T_a is evaporated and mixed with argon gas with the volume flow rate Q_A . In the heated section, the ethanol is pyrolyzed, and the carbon is deposited on the substrate from the pyrolysis products. The latter are removed through the outlet, which is connected to the vacuum pump. It keeps a given pressure P inside the reactor by pumping out the argon gas and reaction products. The described system corresponds to the commercial CVD furnace OTF-1500X-UL-3 and vaporization system LVD-F1 (MTI Corp., USA), which were previously used by the authors for depositing carbon layers on nanoporous membranes [15,16].

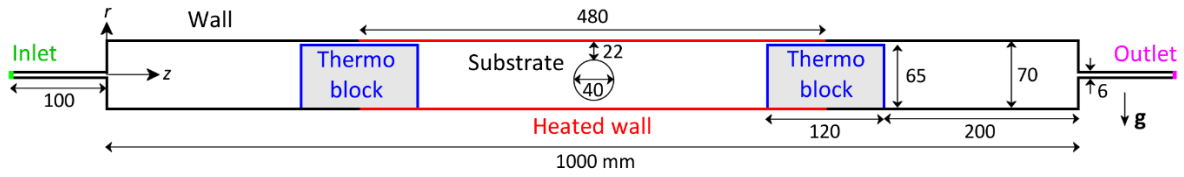


Fig. 1. The geometry of CVD reactor. The dimensions are given in mm.

The stationary model of flow and gas-phase kinetics in the CVD reactor is based on the conservation laws of mass, momentum, and energy for a mixture of N species. The continuity and momentum equations have the form

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0,$$

$$\rho(\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \Pi + \rho \mathbf{g},$$

where ρ is the density, $\mathbf{u}$ is the fluid velocity, p is the pressure, $\mathbf{g}$ is the gravity vector, Π is the viscous stress tensor

$$\Pi = \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T - 2/3 \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{E} \right),$$

$\mathbf{u}\mathbf{u}$, $\nabla \mathbf{u}$ are the dyadic product, and $\mathbf{E}$ is the unit tensor. The density is calculated assuming the ideal gas law for an incompressible fluid flow

$$\rho = P \left(R_g T \sum_{k=1}^N \frac{\omega_k}{M_k} \right)^{-1}$$

where P is the constant operating pressure, R_g is the universal gas constant, T is the temperature, ω_k and M_k are the mass fraction and molecular mass of species k , respectively.

The energy equation is written as

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_h + S_h,$$

where h is the enthalpy, $\mathbf{J}_h = -\kappa \nabla T$ is the conductive heat flux, κ is the thermal conductivity, and S_h is the energy source due to chemical reactions. The mixture enthalpy is

calculated as $h = \sum_{k=1}^N \omega_k h_k$, $h_k = \int_{T_0}^T c_{pk} dT$, where $c_{pk}(T)$ is the specific heat capacity of species k .

The species transport equation is given by

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \omega_k) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_k + R_k,$$

where $\mathbf{J}_k = -\rho D_k \nabla \omega_k$ is the diffusion flux and D_k is the diffusion coefficient of species k , respectively, while R_k (kg/m³s) is the net rate of production of species k by the chemical reactions.

Equations (1)–(5) are solved in the fluid zone of the reactor taking into account temperature-dependent physical properties. Within the thermoblocks and substrate, which are made of porous alumina and characterized by the thermal conductivity, only the stationary heat transfer equation $\nabla^2 T' = 0$ is solved. For description of ethanol pyrolysis, we employ the chemical reaction mechanism proposed by Marinov [7], which consists of 57 species participating in 383 reactions. The mechanism is used in CHEMKIN format along with the thermodynamic properties of species.

The boundary conditions are as follows. The mixture is supplied into the inlet with the axial velocity $U = Q/S$ and temperature T_i , where S is the inlet cross-section area. The mass fractions of ethanol ω_E , water ω_W , and argon ω_A are calculated from volume flow rates Q_A and Q_{EW} and specified at the inlet, while the mass fractions of other components are set to zero. At the outlet, the pressure is set to a constant value P , while the heat and species diffusion fluxes are set to zero since the convective transport is dominant there. On the tube and thermoblocks walls as well as on the substrate surface, the no-slip condition for velocity and the absence of species diffusion fluxes are imposed. The heated section wall is kept at constant temperature T_w , while on the other walls, the Newton law of cooling with heat transfer coefficient α and radiative heat transfer with emissivity of wall surface denoted by ε are imposed. On the walls of thermoblocks and substrate, the equality of temperatures and heat fluxes is set.

The preliminary calculations of ethanol pyrolysis in the working range of parameters showed that 14 species mainly contribute to the stationary mixture composition in the reactor: H₂, CO, CO₂, H₂O, CH₄, C₂H₂, C₂H₄, C₂H₆, C₃H₆, C₃H₈, CH₃CHO, CH₂O, C₂H₅OH, Ar.

We have performed the modelling of CVD reactor in three-dimensional (3D) and two-dimensional (2D) statements. The solution of 3D problem requires high computational cost and is not suitable for parametric studies. Thus, a series of 3D calculations was performed in order to choose and justify a proper reduction of full 3D problem to 2D problem. The simulations are performed in the software package ANSYS Fluent 17 using the finite-volume method on structured grids. The 2D grid is composed of 61300 cells, while the 3D grid consists of 822000 cells.

As a result of 3D modelling, the corrected values of gas velocity, which should be imposed at the inlet of 2D problem, have been determined. The correction is required in order to obtain 2D velocity and temperature fields, which closely resemble their 3D counterparts taken at the vertical longitudinal cross-section of the tube. The inlet velocity for 2D problem is calculated as

$U' = \gamma U$, where $\gamma = 0.1096$ is the empirical coefficient determined from the series of calculations.

3. Results and discussion

Our aim is to investigate the effect of reactor wall temperature $T_w = 500–1500$ C,

pressure $P = 0.1\text{--}1$ bar, argon volume flow rate $Q_A = 10\text{--}2000$ ml/min and ethanol/water liquid mixture flow rate $Q_{EW} = 0.05\text{--}5$ ml/min on the pyrolysis process in the gas phase. The variation of these parameters is easily accessible in a typical CVD experiment.

The velocity and temperature fields obtained from 3D calculations are presented in Fig. 2. The comparison of temperature fields between the models is shown in Fig. 3. For 3D model, the vertical cross-section is shown, and one can see that the 2D model provides similar results. The temperature in the heated section between thermoblocks is rather uniform. Strong temperature gradients are observed inside thermoblocks and near their faces, which are in contact with inlet

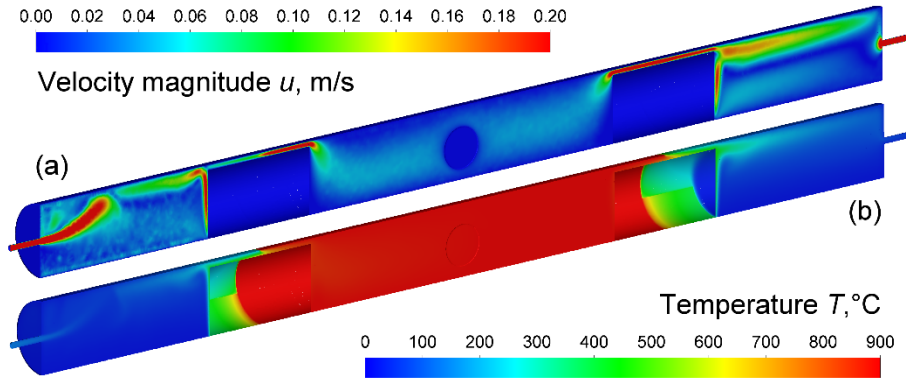


Fig. 2. Velocity (a) and temperature (b) fields obtained from 3D model calculations.
 $T_w = 900\text{C}$, $P = 0.5\text{bar}$, $Q_A = 200$ ml/min, $Q_{EW} = 0.5$ ml/min.

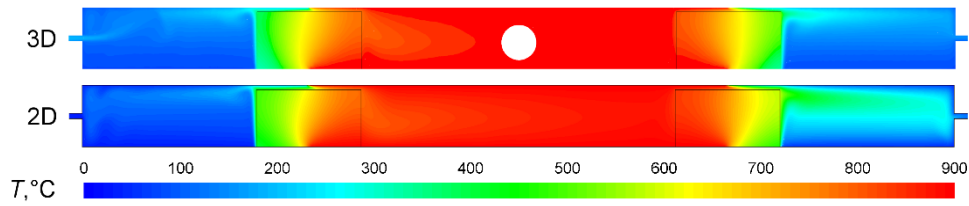


Fig.3. Temperature field at the tube cross-section for 3D and 2D models.
 $T_w = 900\text{C}$, $P = 0.5\text{bar}$, $Q_A = 200$ ml/min, $Q_{EW} = 0.5$ ml/min.

and outlet sections of the tube (i.e. the volume between inlet and left thermoblock and the volume between right thermoblock and outlet, respectively).

The comparison between mole fractions for major 14 species calculated from 2D and 3D models shows good agreement (the mole fractions averaged over the substrate are considered). So, we can conclude that the 2D model can be successfully used for calculation of ethanol pyrolysis in the CVD reactor instead of more realistic 3D model. However, it requires the correction of inlet velocity and could be less accurate for high flow rates.

The variation of species mole fractions with furnace wall temperature is shown in Fig. 4. The thermal decomposition of ethanol starts when T_w exceeds 600 C. With increasing temperature, we observe the production of ethylene, methane, hydrogen, acetaldehyde, and formaldehyde. The evolution of water occurs as well. The further increase of temperature above 700 C leads to the decomposition of acetaldehyde and formaldehyde with the evolution of hydrogen, water, methane, as well as carbon monoxide and dioxide. The ethylene is decomposed by radicals attack and further converted to acetylene. At higher temperatures (> 1000 C), the production of hydrogen and carbon monoxide increases greatly. The other dominant species under these conditions are acetylene, water, and methane.

Figure 5 presents the profiles of species along the reactor. The cross-sectionally averaged temperature is also shown. It reveals the jumps near the outer walls of thermoblocks due to local heating of gas in that areas, see Fig. 3. The decomposition of ethanol starts in the beginning of the heated section above the left thermoblock, but it fully disappears only at the central part of the reactor. The dominant products in this case are water, ethylene, and hydrogen.

4. Conclusion

In this work, we have performed computational modelling of ethanol pyrolysis in a commercial CVD reactor, which has the form of a cylindrical tube with the heated section. The inlet gas flow is produced by evaporating azeotrope ethanol/water mixture followed by mixing it

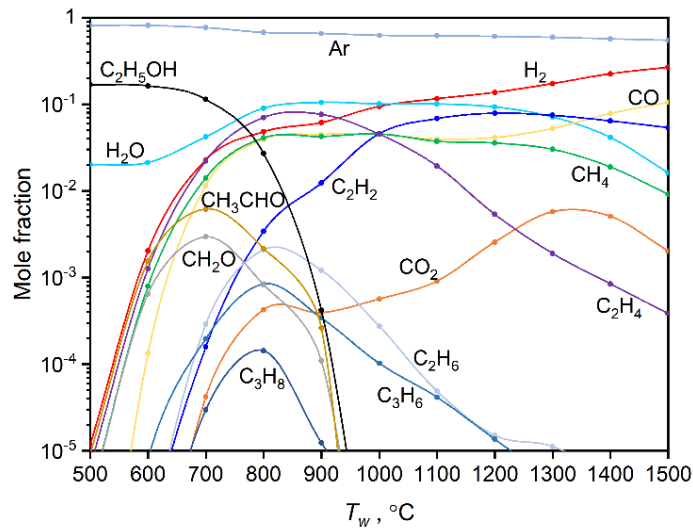


Fig. 4. The dependence of species mole fractions on temperature T_w .

$P = 0.5 \text{ bar}$, $Q_A = 2000 \text{ ml/min}$, $Q_{EW} = 0.5 \text{ ml/min}$.

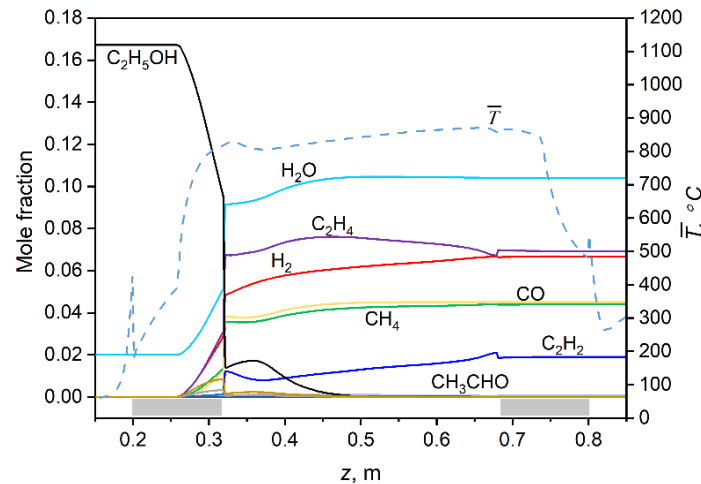


Fig.5. The profiles of species mole fractions and cross-sectionally averaged temperature along the tube. $T_w = 900 \text{ C}$, $P = 0.5 \text{ bar}$, $Q_A = 2000 \text{ ml/min}$, $Q_{EW} = 0.5 \text{ ml/min}$. The grey

rectangles near the horizontal axis show the position of thermoblocks with inert gas (argon). Previously, this reactor was employed for growing carbon layers on alumina substrates (membranes).

The meaningful comparison of results between a real 3D tubular reactor and a 2D plane channel requires the correction of inlet velocity, which should be an order of magnitude

smaller in the 2D statement.

In the considered range of flow rates, the ethanol decomposition starts at around 600 C. At moderate temperatures around 900 C, the main pyrolysis products are water, ethylene, hydrogen, carbon monoxide, and methane. The further temperature rise increases the mole fractions of hydrogen, acetylene, and carbon monoxide, while the water and methane mole fractions are decreased.

The obtained results can be employed for simulating and analyzing pyrolysis processes in realistic CVD reactors with complex geometry. They also provide the basis for the development of coupled gas phase and surface reaction model of carbon layer growth on alumina substrates.

This work is supported the Russian Foundation for Basic Research, Project 18-29-19078.

References

1. Xu Y., Yan X.T. Chemical vapour deposition. An integrated engineering design for advanced materials. Springer, London, 2010.
2. Chemical vapour deposition: precursors, processes, and applications. Edited by A.C. Jones, M.L. Hitchman. RSC Publishing, Cambridge, UK 2009.
3. Oberlin A. Pyrocarbons. Carbon, 2002. V. 40, 7–24.
4. Huttinger K.J. CVD in hot wall reactors – the interaction between homogeneous gas phase and heterogeneous surface reactions. Chem. Vapor. Dep., 1998. V. 4, 151–158.
5. Rotzoll G. High-temperature pyrolysis of ethanol. J. Anal. Appl. Pyrol., 1985. V. 9, 43–52.
6. Li J., Kazakov A., Dryer F.L. Ethanol pyrolysis experiments in a variable pressure flow reactor. Int. J. Chem. Kinet., 2001. V. 33, 859–867.
7. Marinov N.M. A detailed chemical kinetic model for high temperature ethanol oxidation. Int. J. Chem. Kinet., 1999. V. 31, 1823–220.
8. Li J., Kazakov A., Dryer F.L. Experimental and numerical studies of ethanol decomposition reactions. J. Phys. Chem. A, 2004. V. 108, 7671–7680.
9. J. Keicherer, C. Baanish, T. Bentz, M. Olzmann. Pyrolysis of ethanol: A shock tube/TOF MS and modeling study. Proc. Comb. Inst., 2015. V. 35, 465–472.
10. Li A., Zhang S., Reznik B., Lichtenberg S., Schoch G., Deutschmann O. Chemistry and kinetics of chemical vapor deposition of pyrolytic carbon from ethanol. Proc. Comb. Inst., 2011. V. 33, 1843–1850.
11. Maruyama S., Kojima R., Miyauchi Y., Chiashi S., Kohno M. Low temperature synthesis of high-purity single-walled carbon nanotubes from alcohol. Chem. Phys. Lett., 2002. V. 360, 229–234.
12. Bobrinetskii I.I., Nevolin V.K., Simunin, M.M. Production of carbon nanotubes by catalytic gas-phase pyrolysis of ethanol. Theor. Found. Chem. Eng., 2007. V. 41, 639–643.
13. Mattia D., Leese H., Lee K.P. Carbon nanotube membranes – from flow enhancement to permeability. J. Membr. Sci., 2015. V. 475, 266–272.
14. Alsawat M., Altalhi T., Kumeria T., Santos A., D. Losic. Carbon nanotube-nanoporous anodic alumina composite membranes with controllable inner diameters and surface chemistry: Influence on molecular transport and chemical selectivity. Carbon, 2015. V. 93, 681–692.
15. Solodovnichenko V.S., Lebedev D.V., Bykanova V.V., Shiverskiy A.V., Simunin M.M., Parfenov V.A., Ryzhkov I.I. Carbon coated alumina nanofiber membrane for selective ion transport. Adv. Engineer. Mater. 2017, V. 20, 1700244.
16. Solodovnichenko V.S., Simunin M.M., Lebedev D.V., Voronin A.S., Emelianov A.V., Mikhlin Y.L., Parfenov V.A., Ryzhkov I.I. Coupled thermal analysis of carbon layers deposited on alumina nanofibers. Thermochim. Acta, 2019. V. 675, 164–171.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИАГРАММЫ ЛАМЕРЕЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОНЯТИЯ «СРЕДНИЙ КЛАСС» В ЭКОНОМИКЕ

Д.А. Семёнов¹, М.Ю. Метелева²

¹Институт биофизики СО РАН, Лаборатория теоретической биофизики, dasem@mail.ru

²Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Факультет социальных наук, mariameteleva@yandex.ru

Точечные отображения, как простейший способ описания динамической системы.

Интересующий нас метод строится на предположении, что система дискретна по времени. Предположим, что состояние системы можно описать координатой X и существует функция $F(X)$ связывающая состояние в текущий момент и состояние в следующий момент. Мы сразу изобразили функцию в том виде, как нам и будет нужно (Рисунок 1).

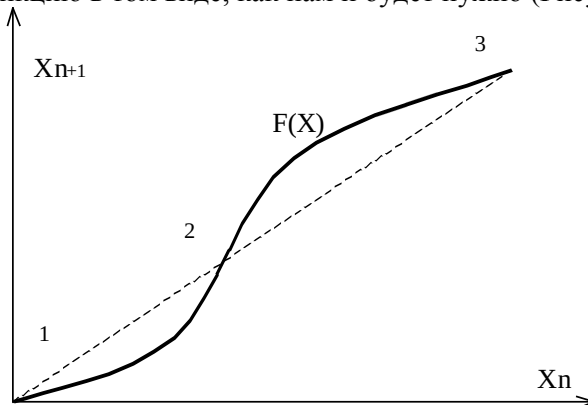


Рис. 1. Диаграмма Ламерея для S-образной кривой.

Что можно узнать из этого рисунка? То, что у данной системы существует три равновесных состояния, причем два устойчивых (1 и 3 на рисунке) и одно неустойчивое (2). Можно даже графически вычислять динамику приближения к равновесию в каждый момент времени. Этот прием называется «отражение в биссектрисе», а сам рисунок «диаграмма Ламерея» [1]. При всей своей простоте, диаграмма Ламерея позволяет исследовать качественное поведение некоторых систем нелинейных уравнений, не требуя досконального знания самих уравнений.

Экономический материал. Маркс и Шумпетер.

С таким инструментарием рассмотрим возникновение дифференциации по доходам. Как отмечал еще Маркс, возникновение капитализма сопровождается расслоением общества на два класса: буржуазию и пролетариат.

Используем представление о хозяйственном цикле, в котором весь полученный доход тратится на поддержание производства. Подобное представление крайне удобно для построения простейшей модели динамики капиталистической экономики. Рассмотрим как выглядит зависимость доходов от затрат в условиях капитализма (Рисунок 1). Это S-образная кривая, участок быстрого роста соответствует экономии от масштабов. На этом участке происходит резкое увеличение производительности труда, до него затраты не окупаются, после происходит уменьшение угла наклона, вследствие насыщения рынка. Теперь вспомним, что мы предположили, что весь сегодняшний доход становится завтрашними затратами. Этого достаточно, чтобы возникла простейшая модель экономической динамики (Рисунок 1), необходимо лишь провести биссектрису, обозначив точки в которых доходы и расходы совпадают.

Как видим, в этой модели два устойчивых состояния. Одно совпадает с началом координат (с нулём), второе отличается от нуля. Неустойчивое равновесие служит порогом, преодолев который можно самому располагать средствами, достаточными для поддержания производства. Наличие этого порога и является причиной имущественного расслоения и появления классов.

Модель подобного состояния Шумпетер называет статической [2]. В действительности же это уже динамическая модель, но позволяющая только исследовать динамику движения к равновесию. В.И. Арнольд относил модели, подобные предлагаемой, к «мягким» [3], то есть не стремящимся к точному количественному совпадению, но не теряющими актуальность при количественном изменении параметров.

Стабилизация неустойчивого равновесия.

Перейдем к динамике доходов. Обратим внимание на неустойчивое равновесное состояние, именно оно будет интересовать нас в дальнейшем. Неустойчивое равновесие обладает удивительным свойством—в окрестностях его можно оставаться долго при минимальных затратах на управление.

Теперь одно важное замечание: для возникновения стабилизации, воздействие может быть малым по абсолютной величине, но должно быть значительным по первой производной. Т.е. величина воздействия должна меняться в окрестности неустойчивого равновесия как минимум пропорционально квадрату изменения координаты (доходов). Это необходимое условие для появления двух новых корней в характеристическом уравнении.

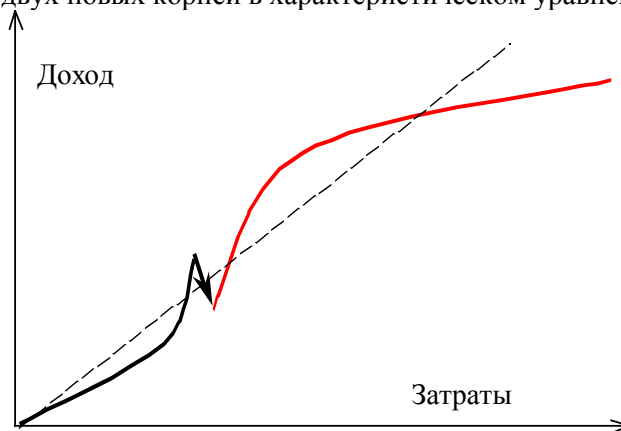


Рис. 2. Стабилизация неустойчивой равновесной точки при помощи кредита.

Как может осуществляться стабилизация в реальной жизни? Рассмотрения случаев стабилизации справа от существующей неустойчивой равновесной точки. Для такой стабилизации важно, чтобы функция $F(X)$ испытала резкий скачек вниз. Если это происходит рядом с неустойчивой равновесной точкой, то новая функция, назовем её, например, $F1(X)$ будет выглядеть так, как показано на рисунке 2.

Чем можно вызвать такую стабилизацию? Есть как минимум три причины:

1. Налоги, точнее прогрессивное налогообложение, например, экспоненциальный рост налогов с некоторого уровня доходов.
2. Кооперативные эффекты в обществе. Необходимая нелинейность может достигаться за счет взаимодействия схожих субъектов. В физике это рассматривается как фазовый переход. В экономике это может быть община, занятая «справедливым» распределением доходов, или профсоюз, способный массово отреагировать на отдельные случаи уменьшения доходов.
3. Стабилизация через кредит. Кредит ведет к снижению функции $F(X)$. Если с некоторого порога доходов обязательно давать кредит, то это равносильно прогрессивному налогообложению.

Стабилизация доходов вблизи пороговой точки означает существование среднего класса. В языке очень точно отражено то, что не отражено в экономической науке—«средний класс» отличается от тех, кто выше и ниже их в распределении по доходам. Средний класс — это не следствие Гаусовского нормального распределения по доходам.

Можно ввести такое определение: **СРЕДНИЙ КЛАСС — ЭТО ПОТРЕБИТЕЛИ, ЧЬИ ДОХОДЫ СТАБИЛИЗИРОВАННЫ ВБЛИЗИ НЕУСТОЙЧИВОЙ РАВНОВЕСНОЙ ТОЧКИ БАЛАНСА ДОХОДОВ И РАСХОДОВ.** То есть, для анализа динамического поведения среднего класса необходимо учитывать механизм стабилизирующего воздействия, удерживающий систему вблизи пороговой точки.

Авторы многочисленных исследований, посвященных среднему классу, сходятся во

мнении, что единого, общепринятого определения понятия СРЕДНИЙ КЛАСС пока не существует [4-10]. Предлагаемое нами определение позволяет совершенно по-новому взглянуть на те понятия, через которые обычно определяют средний класс. Иногда к среднему классу относят тех, чьи доходы близки к медианному доходу [6, 7]. При сравнительном исследовании доходов в разных странах к среднему классу относят людей с определенным доходом (например, 10-100\$ в день на человека) [8-9]. Иногда авторы делают акцент на стремлении представителей среднего класса получить хорошее образование и потреблять товары высокого качества [10]. Встречаются попытки определить средний класс через основной вид деятельности его представителей [11]. Такие определения, однако, подходит далеко не всем представителям среднего класса. Все перечисленные формы определения понятия СРЕДНИЙ КЛАСС не позволяют понять причины его существования.

Предлагаемое нами определение позволяет объяснить механизм поддержания среднего класса. Также это определение объясняет существование многих признаков среднего класса.

Преимущества существования «среднего класса».

1. Неустойчивая равновесная точка находится на участке, где доходы активно растут при росте затрат. Именно тут усилия приводят к самым заметным результатам. Представители среднего класса получают заметную обратную связь между своими усилиями и экономическими результатами.

2. Уменьшение количества «выпавших» из экономической жизни граждан. Как следствие больше потребителей (что признаётся, хотя бы прессой).

3. Эволюционное возникновение стабилизации. Это тоже несомненное преимущество. Нет революций при переходе к обществу со «средним классом» от капитализма по Марксу. При этом сама эволюция идет не по чьей-то воле, это спонтанный процесс, приводящий к закономерному усложнению системы. С точки зрения биологии это «прогрессивная эволюция».

4. Близость доходов среднего класса к тому порогу, с которого возможно поддержание успешного производства делает возможным возникновение новых производств. Вероятность появления нового производства без среднего класса гораздо ниже. Можно говорить об «инновационном потенциале» среднего класса.

Список литературы

1. Arnold V.I. Ordinary Differential Equations. / V. I. Arnold, R. Cooke. – Springer, 1992 –354p.
2. Schumpeter J. A. Capitalism, Socialism and Democracy. / J. A. Schumpeter –Harper&Brothers, 1942—431p.
3. Арнольд В.И. «Жесткие и «мягкие» математические модели. / В.И. Арнольд—М.: МЦНМО, 2008. - 32 с. 2-е издание.
4. Ravallion M. The developing world's bulging (but vulnerable) middle class. / M. Ravallion // World Development –2010—38 (4), pp.445–454.
5. Ravallion M., Why don't we see poverty convergence? / M. Ravallion // American Economic Review—2012—102 (1), pp.504–523.
6. Easterly W. The middle class consensus and economic development. / W. Easterly // In Work Bank policy research working paper –2346. Washington, DC: World Bank.—2000.
7. Birdsall N. Stuck in tunnel: Is globalization muddling the middle? / N. Birdsall, C. Graham, & S. Pettinato. // In Brookings Institution working paper 14. Washington, DC: Brookings Institution. – 2000.
8. Banerjee A. What is middle class about middle classes around the world? / A. Banerjee, E. Duflo. // In MIT Department of Economics working paper 07-29. Cambridge, MA: Massachusetts Institute of Technology.—2007.
9. Bhalla S. The middle class Kingdoms of India and China. / S. Bhalla // Washington, DC: Peterson Institute for International Economics.—2009
10. W. A. Kamakura. Socioeconomic status and consumption in an emerging economy. / W. A. Kamakura, J. A. Mazzon // International Journal of Research in Marketing—2012—30 pp. 4–18.
11. Cavusgil T. Reflections on international marketing: Destructive regeneration and multinational firms. Journal of the Academy of Marketing Science. / T. Cavusgil, E. Cavusgil.—2012—40, pp. 202–217.

ВЕДУЩИЕ ФАКТОРЫ РАВНОВЕСНОСТИ

LEADING FACTORS OF EQUILIBRIUM

В.П.Сизиков¹, В.И. Разумов²

¹Омский государственный университет путей сообщения, v_p_sizikov@mail.ru

²Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, razumovvi@omsu.ru

1. Введение. Решение вопроса о равновесности процесса является, по сути, умением по данным наблюдения процесса спрогнозировать качество его целостного устойчивого развертывания в дальнейшем, без признаков распада и обречения. Важно знать, на каких факторах для этого следует сосредоточивать внимание. В данной работе представлены два таких фактора с их обоснованием в рамках ДИС-технологии на примере графиков процесса информационного функционирования (ПИФ) динамических информационных систем (ДИС), которые уже не раз приводились в работах данного семинара [1, 2].

Во-первых, периодичность процесса, сколь бы сложным ни было его поведение в течение периода, часто служит аргументом для признания такого процесса равновесным. Если имеет место возвращение к исходному состоянию, значит, в процесс заложен некий фактор равновесия. Однако указанные аргументы могут служить основой лишь в случаях с достаточно коротким и хорошо отслеживаемым периодом. В противных случаях практически постоянно придется иметь дело либо с хаотическим поведением процесса, в котором трудно будет усмотреть какие-либо закономерности и явные свидетельства равновесности, либо с тенденциями, которые не могут продолжаться вечно, и, значит, тоже оставляют неопределенным будущее процесса, включая и проблему равновесности. Так выходим на варианты, которые могут быть отнесены к темпоральной неравновесности, зависящей, по сути, от выбора характерного промежутка времени контакта с протекающим процессом.

Во-вторых, мало того, что условие периодичности сильно ограничивает многообразие процессов, но возможны еще и такие варианты, когда данное условие, четко проявляющееся на некоем весьма продолжительном этапе, на деле оказывается не устойчивым, а сам процесс в итоге приходит к обречению. К чему же следует присматриваться, чтобы избежать ошибки в решении вопроса о равновесности процесса? Оказывается, ведущую роль в этом вопросе играет заложенный в процессе фактор работы с пассивом, которого традиция, как правило, даже не предполагает.

Итак, уделим особое внимание вариантам темпоральной неравновесности и учету фактора работы с пассивом на примере ПИФ ДИС. Это может послужить базой для адекватного подхода к решению вопроса о равновесности процессов, включая и такие, что отличны от ПИФ ДИС, тем более что есть тесные связи между ДИС и нейросетями [2], в том числе и на уровне функционирования.

2. Варианты темпоральной неравновесности на примере функционирования триады. Не будем здесь приводить определения ДИС и графика ее ПИФ, а также подходы к их организации. Желаящие могут найти это в многочисленных работах авторов, в том числе и в тех, что представлялись на данный семинар. Кроме того, ограничимся примерами графиков ПИФ, когда ДИС является просто триадой D с вершинами v_0, v_1, v_2 и ресурс в ее ПИФ перераспределяется по циклу $v_0 \rightarrow v_1 \rightarrow v_2 \rightarrow v_0$.

На рис. 1 приведен один из возможных примеров графика ПИФ триады, в котором время контакта с ПИФ составляет 2000 компонентов. График включает три полосы, отведенные соответственно под вершины v_0, v_1, v_2 , а в каждой полосе имеется по две линии, та, что с номером 1, изображает перемены количества актива, а та, что с

номером 2 – пассива в ПИФ на месте соответствующей вершины триады.

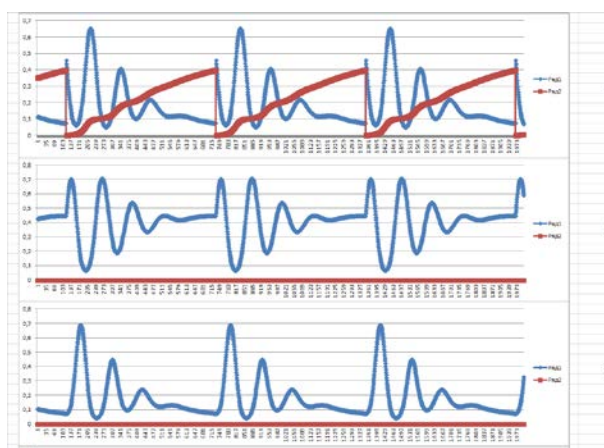


Рис. 1.

На данном рисунке четко прослеживается периодический характер графика с характерным периодом около 620 компонентов, и это заставляет думать о равновесности ПИФ. Такой вывод напрашивается, несмотря на перемены значений ординат у линий от весьма больших до ничтожно малых. Однако ясности с равновесностью не станет (рис. 2), если ограничиться временем контакта с ПИФ в 100 компонентов, взяв, к примеру, начало с рис. 1.

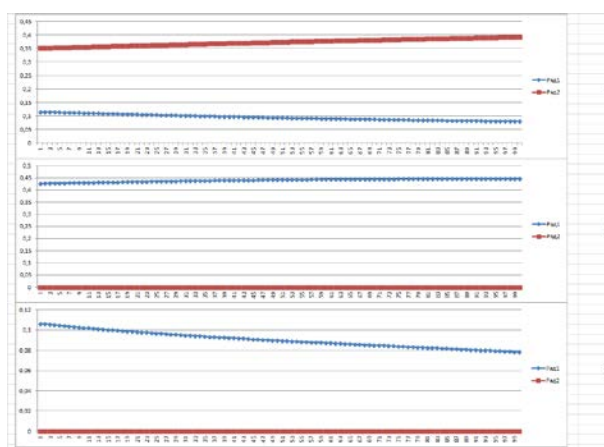


Рис. 2.

Хотя линии на рис. 2 выглядят ровными, почти прямолинейными, ясно, что такая тенденция скоро должна нарушиться, но как и к чему все это приведет, в том числе, выступит ли ПИФ в ранге равновесного, остается, наоборот, совершенно неясно. Неясности прибавится, если поведение этих линий будет хаотичным, тем более с переменами значений их ординат от весьма больших до ничтожно малых уже на относительно коротком интервале времени.

Однако есть еще один вариант как пример темпоральной неравновесности. В предыдущих двух случаях график выдавался после предварительной прогонки ПИФ на протяжении 30000 компонентов. За такое время может успеть сложиться вполне закономерный режим ПИФ, что, кстати, и получилось в приведенном случае. А вот поведение ПИФ на первых шагах прогонки, как правило, тоже содержит много неясностей. Как-никак, но исходное состояние ПИФ почти никогда не повторяет тех, что складываются позднее в закономерном режиме ПИФ, это же, конечно, относится и к достаточно продолжительному началу графика ПИФ. На рис. 3 приведен график того

же ПИФ, но без предварительной прогонки.

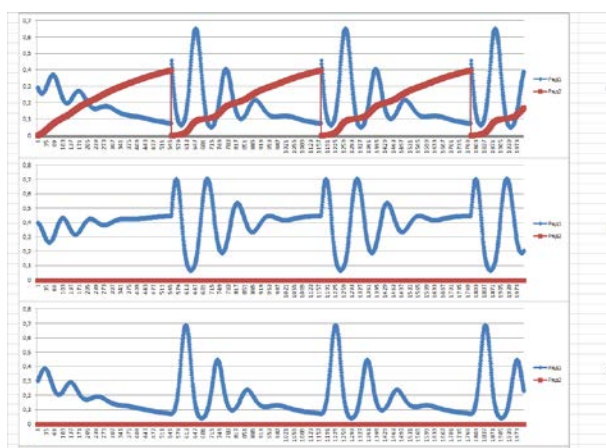


Рис. 3.

Как видно из графика ПИФ на рис. 3, периодический его характер начинает четко прослеживаться после прогонки 2000 компонентов. Надежды, но не гарантии, на это появляются после прогонки свыше 1200 компонентов, а при прогонке менее 500 компонентов нет надежных оснований даже для заключений о равновесности. Приведенные цифры ассоциируют с величинами соответственно в 3, 2 и 1 характерный период графика ПИФ.

Конечно, ситуации с выходом графика ПИФ на периодический режим существенно упрощают работу с выяснением и оценками равновесности, с преодолением явлений темпоральной неравновесности. Однако часто бывает, когда величина периода практически недостижима для отражения ее на покомпонентном графике ПИФ. Правда, в таких случаях можно позаботиться о выдаче графика из состояний, приходящихся на заранее фиксированную последовательность компонент. Но, во-первых, не факт, что эта последовательность все еще не окажется громоздкой и практически недостижимой для выдачи, и, во-вторых, рискует быть утерянной ценная информация о переходных явлениях в ПИФ, приходящихся на особые компоненты, а вслед за этим и качество периодичности графика ПИФ. Так что важно уметь ориентироваться и в таких ситуациях, когда периодического режима у графика ПИФ не складывается.

Приведенные два варианта с темпоральной неравновесностью, по-прежнему, остаются актуальными, по сути, из-за относительно малого времени наблюдения за ПИФ и отсутствия надежной прогнозируемости его поведения в дальнейшем. А при достаточно продолжительном времени наблюдения главным моментом в решении проблемы равновесности ПИФ не обязательно выступает повторяемость его состояний, главное, чтобы нашлись основания объяснить либо отсутствие тенденций к обреченности ПИФ, либо, наоборот, неизбежность обреченности. Проблема отсутствия обреченности ПИФ является, по сути, эквивалентом проблемы его равновесности.

3. Работа пассива как актуализатор темы равновесности. Представленные идеи по теме темпоральной неравновесности в рамках ПИФ ДИС могут быть приняты за основу и при работе с другими процессами, отличными от ПИФ ДИС. Однако проблема выяснения равновесности процесса при этом существенно усугубляется.

Как-никак, но в случаях с ПИФ ДИС отследить и объяснить отсутствие или, наоборот, неизбежность обреченности процесса относительно несложно за счет наличия в нем работы на уровне пассива. Ведь объем пассива не допускает убывания, кроме случаев полной локальной трансформации пассива в актив лишь по достижению

установленной в соответствующем месте предельной нормы. Так что в случаях полной связности ДИС по перераспределению ресурса наличие в ее ПИФ тенденции к заботе о накоплении пассива и регулярному свершению трансформаций его в актив в каждой вершине ДИС явно свидетельствует о равновесности этого ПИФ. Более точно, в указанных случаях обречение ПИФ ДИС может наступать лишь в ранге тенденции к полному исчезновению в ПИФ актива, сосредоточению всего ресурса в пассиве. Это характеризуется как наступление режима вакуума, и для его реализации необходимо, чтобы сумма всех уровней трансформации пассива в актив в вершинах ДИС была больше общего объема ресурса в ней, что вполне можно отслеживать и брать во внимание при анализе ПИФ.

Иное дело, когда в ДИС есть такие вершины, у которых нет заботы о накоплении у себя пассива. Правда, если заранее известно, что все такие вершины в ДИС получают актив через стационарно настроенные связи, то никаких новых проблем с равновесностью ПИФ ДИС они не породят, вопрос останется за выяснением возможности наступления режима вакуума под влиянием остальных вершин. В противных же случаях вершины, не заботящиеся о накоплении у себя пассива, рискуют оказаться выброшенными из ПИФ ДИС в ранге тенденции полного исчезновения у них и актива. Причем обреченным может оказаться ПИФ не только в таких вершинах, но и на всей ДИС. На рис. 4 специально приведен вариант обреченного ПИФ триады, который по начальным данным отличается от предыдущих лишь повышением уровня трансформации пассива в актив в вершине v_0 до величины 0,6 вместо 0,4. В этом варианте до трансформации пассива в актив в вершине v_0 дело никогда не дойдет, ПИФ «замрет» на состоянии, в котором вершина v_2 останется без ресурса, а вершины v_0 и v_1 поделят весь ресурс примерно поровну между собой в ранге пассива и актива соответственно.

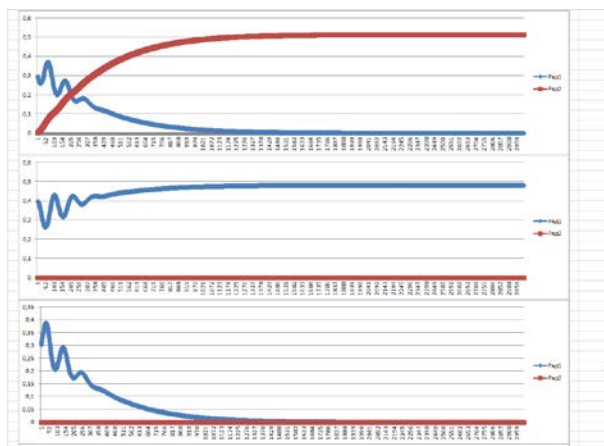


Рис. 4.

Последний результат кажется невероятным, но на деле имеющим место. Причем решающее значение для убеждения в этом играет вновь внимание к поведению пассива, к тому, что в данном случае его накопление в вершине v_0 до трансформации в актив недостижимо. При желании можно позаботиться о выдаче графика данного ПИФ после предварительной прогонки его на протяжении достаточно большого числа компонентов, возможно, даже 10^6 .

В случаях, когда в ПИФ ДИС вообще нет работы с пассивом, выделяются два качественно разных варианта. В одном варианте, как уже замечалось выше, все связи в ДИС предполагаются настроенными стационарно, и тогда режим ПИФ через достаточно большое число компонентов тоже становится стационарным,

стабилизированным на некоем фиксированном состоянии. Здесь в принципе теряет смысл феномен неравновесности. В другом варианте, когда, наоборот, все связи в ДИС настроены на взаимодействие, поначалу через достаточно большое число компонентов у ПИФ, как правило, складывается периодический, посменный характер режима, который вполне смотрится как равновесный. Однако в последующем все более заметной становится тенденция к растягиванию графика ПИФ, при которой происходит не только нарастание величины «периода», но и все более прямоугольная форма поведения линий графика. Начиная с некоего момента, график ПИФ и вовсе обретает вид как у стационарного режима, однако ресурс при этом будет иметься только на части никак не связанных между собой вершин ДИС, само перераспределение ресурса прекратится, ПИФ, по сути, станет обреченным, заслуживающим считаться неравновесным. Процесс, который поначалу долгое время представлялся периодическим и вполне равновесным, вдруг без вмешательства каких-либо внешних причин становится обреченным, т.е. на деле оказывается неравновесным.

Последний момент заставляет думать об актуальности работы пассива в процессах при решении вопроса их равновесности. При отсутствии работы пассива и внимания к нему решение вопроса о равновесности процесса теряет надежность.

4. Заключение. Несмотря на наличие строгих определений равновесия в физике и в математике, многообразие реальных систем требует поиска определений равновесности/неравновесности уже не на основе вещественно-энергетической, а информационно-полевой парадигме, рассматриваемой в ТДИС [3]. Данный подход предусматривает два важных момента. Первый касается темпоральности наблюдения и предусматривает учет длительности периода процесса в отнесении к продолжительности наблюдения. Второй указывает на онтологию ПИФ и его итераций, где принципиально важно учитывать пассив ресурса системы. Для проверки данных положений, и на базе ДИС-технологии были проведены вычислительные эксперименты, графики которых представлены в работе.

Результатом можно считать онтологическую и физическую осмысленность для понятия «реальное время системы». Кроме того, предложенный подход открывает перспективы для повышения качества прогнозирования поведения систем. Это достигается установлением связи между режимами функционирования ПИФ ДИС и состояниями равновесности/неравновесности для конкретных систем. На настоящее время проблема заключается в поиске адекватных физических интерпретаций для аналитических моделей, полученных от применения ДИС-технологии.

Список литературы

1. Сизиков В.П. Объяснение поведения систем на базе ДИС-технологии / В.П. Сизиков, В.И. Разумов // Моделирование неравновесных систем: Материалы XXI Всероссийского семинара / Под ред. М.Г. Садовского; отв. за вып. М.Ю. Сенашова. – Красноярск: Институт вычислительного моделирования СО РАН, 2018. С. 88–94.
2. Разумов В.И. Согласование нейросетей и ДИС в развитии моделирования / В.И. Разумов, В.П. Сизиков, Л.Г. Сизикова // Нейроинформатика и ее приложения: Тезисы докладов VII Всероссийского семинара. – Красноярск: КГТУ, 1999. С. 117–119.
3. Разумов В.И. К новой парадигме закона / В.И. Разумов, В.П. Сизиков // Вестн. Ом. ун-та. 2012. № 2. С. 213-219.

ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЙ МЕХАНИЗМ НЕОБРАТИМОСТИ В РАЗВИТИИ ФИЗИЧЕСКОЙ КАРТИНЫ МИРА

В.М. Сомсиков^{1,2}, С.Н. Азаренко³

¹Институт ионосферы, Алматы, 050020, Казахстан;

²Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, Алматы, Казахстан,
vmsoms@rambler.ru

³Алма-Атинская академия МВД РК им.М.Есбулатова, sveta.azarenko@gmail.com

Введение.

Построение физической картины мира – главная задача не только физики, но и философии [1-3]. Серьезным препятствием на пути ее построения до недавнего времени являлась проблема причинности в физике. Дело в том, что принцип причинности, который лежит в основе эволюционной картины мира, не входит в число принципов физики, представляющей собой законы природы [3]. Связано это с тем, что фундаментальные законы физики инвариантны относительно обращения времени, а природные процессы обладают «стрелой времени». Это, в частности, привело к тому, что не только физическая картина мира не согласуется с принципом ее единства, но и сама физика представляет собой совокупность слабо связанных между собой отдельных областей знаний таких, например, как механика, термодинамика, квантовая механика. Без принципа причинности законы физики объясняют как устроен мир, но не способны отвечать на вопросы, как он эволюционирует, в каком направлении идут процессы эволюции и чем они определяются [3,4]. Таким образом, отсутствие объяснения **детерминированного механизма необратимости** (ДМН) в рамках законов фундаментальной физики в значительной степени тормозило создание и развитие эволюционной картины мира [4].

В процессе решения проблемы необратимости, начатом еще Больцманом, вначале был найден ее вероятностный механизм [5]. В его основу положена гипотеза о неизбежности случайного внешнего влияния, которое приводит к необратимости системы. В соответствии с этим механизмом, как необратимость, так и эволюция имеют случайную природу. Но тогда и природа эволюции не поддается изучению и описанию в рамках детерминированных законов физики. Следовательно, не ясно, как построить физическую картину мира, опираясь на законы физики, как понять возникновение сложных структур материи из хаоса. Следовательно, проблема принципа причинности при таком механизме необратимости остается открытой. Однако существование вероятностного механизма необратимости не исключает ДМН. И такой механизм был относительно недавно предложен [6, 7]. Он найден в результате учета *структурности частиц* и взаимосвязи симметрий тела и окружающего его пространства. В качестве структурированной частицы использовалась гомогенная, хаотическая система потенциально взаимодействующих **материальных точек** (МТ). Структурированная частица, поглощая энергию движения тела, преобразуя ее в энергию хаотического движения его элементов, обуславливает «стрелу времени».

ДМН не только устранил проблемы, связанные с вероятностным объяснением необратимости. Он, в соответствии с принципами единства картины мира и универсальности законов природы, привел к возможности объединения различных направлений науки и, в конечном счете, к возможности построения *физики эволюции*,

задачей которой является создание эволюционной картины мира на основе фундаментальных законов физики [7]. Обоснованию этих утверждений и изучению роли ДМН в развитии физической картины мира посвящена данная работа.

Здесь рассмотрены идеи, позволившие найти ДМН. Изучено, как эти идеи связаны с фундаментальными понятиями картины мира. Рассмотрены роль ДМН в понимании закона «перехода количества в качество» и его влияние на детерминизм в науке. Показана взаимосвязь законов эволюции природных систем с законами физики. Обсуждается, почему базовым элементом материи должна быть **открытая неравновесная динамическая система** (ОНДС). Рассмотрены принципы построения законов систем на основе законов динамики их элементов и показано, как эти принципы открывают возможность построения картины мира, в виде иерархии ОНДС. Предложены пути обоснования термодинамики, статистической физики, квантовой механики в рамках механики структурированных частиц. Все это приближает нас к основной цели, определяющей главную задачу: *по состоянию изучаемого объекта в настоящий момент, определить его состояние в последующие моменты времени.*

О развитии ключевых понятий картины мира.

Чтобы пояснить роль ДМН в развитии физической картины мира, кратко рассмотрим возникновение ее основных понятий, как они изменялись в процессе развития физических знаний [8, 9].

Ключевые понятия картины мира возникли в глубокой древности. При этом одно из первых фундаментальных понятий было связано с вопросом, *из чего все состоит?* Один из ответов на этот вопрос заключался в том, что материя состоит из элементарных «кирпичиков». Наиболее известным идеологом этого представления о материи был Демокрит [9]. Он утверждал, что материя построена из конечного набора элементов - атомов. Впоследствии возникли современные представления о структуре материи, ее фрактальности и самоподобии [9,10]. Сегодня мы наблюдаем открытие все более мелких составных элементов материи, вследствие чего стал актуальным вопрос о пределе такого деления материи и форме ее первичного элемента.

Затем было замечено, что миропонимание не может быть полным без учета движения материи [9, 11]. Как утверждал Гераклит, «все течет, все изменяется». *Движение – способ существования материи.* В результате работ Галилея, Ньютона, Лейбница, были найдены фундаментальные законы движения, позволившие связать понятия энергии, ускорения, массы и силы, характеризующие материю в ее динамике [9, 11, 12]. Через движение геометрия входит в физику.

Материю невозможно описать без использования понятий пространства и времени. Как оказалось, взаимосвязь материи, динамики, пространства и времени устанавливается с помощью понятия *симметрии* [13]. Понятие симметрии появилось еще у Платона. Он считал корнем явлений даже не саму материю, а ее математическую форму, симметрию. Элементарные частицы, из которых состоит материя, имеют, по Платону «математически прекраснейшую» форму. То есть, по Платону в основе мира лежит не материя, как утверждал Демокрит, а математический закон, симметрия. Соответствие формы и структуры материи имеет сложный характер и является современной проблемой. Эта проблема особенно стала актуальной в связи с открытием Планком теплового излучения материи [14]. Остро встал вопрос, как возникают качественно новые свойства целого, если оно не есть сумма составных частей [15].

В процессе развития физической картины мира, сегодня выделяют три вехи [8, 9,16]:

- учение Аристотеля;
- работы Галилея, Декарта и Ньютона;
- идеи Эйнштейна и научные разработки вплоть до последнего времени.

Первые основные законы логического мышления, фундаментальные понятия об окружающем нас мире, такие как вещество, сила, движение, пространство и время, находим у Аристотеля. Он считал, что мир един, а законы его развития универсальны. В частности, Аристотель утверждал, что *скорость тела пропорциональна силе и обратно пропорциональна трению*. Отсюда Аристотель сделал вывод о том, что при наличии любой силы, когда трение равно нулю, скорость тела будет бесконечной. Такое представления о законах динамики существовало довольно долго. Лишь спустя тысячелетие были введены такие понятия, как ускорение и энергия, открыты законы классической механики, определяющие движение тел [12, 16]. Благодаря работам Галилея, Декарта, Ньютона, было найдено, что *не скорость тела пропорциональна силе, как утверждал Аристотель, а ее изменение, то есть, ускорение* [9, 16]. Рассмотрим это противоречие подробнее, так как ответ на него связан с ДМН.

Ускорение тела обращается в ноль, когда в результате увеличения скорости действующая на него сила сравнивается с силой трения. То есть, когда вся работа внешних сил идет на увеличение внутренней энергии хаотического движения элементов тела [9, 16].

Аристотель не владел понятием ускорения и не рассматривал период установления максимальной скорости движения тела. Ньютон же, наоборот, стремился выявить суть закона движения тела безотносительно к многообразным его свойствам. Это ему удалось сделать, благодаря использованию модели тела в виде МТ. Он нашел, что не скорость, а ускорение МТ прямо пропорционально силе. Но это верно, если пренебречь изменением внутренней энергии. Возникает вопрос, кто из них прав? Оказалось, что если учесть структуру тела, использовать законы Ньютона для описания движения его элементов, учесть роль симметрий тела и пространства в его динамике, то уравнение движения тела в виде структурированной частицы будет иметь вид [6, 7]:

$$M_N \dot{V}_N = -F_N^0 - \mu V_N, \quad (1)$$

где $F_N^0 = -\sum_{i=1}^N F_i^0$; F_i^0 -внешняя сила, действующая на i -ю МТ; $\mu = \dot{E}_N^{\text{int}} / (V_N^{\text{max}})^2$; $\dot{E}_N^{\text{int}} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N v_{ij} (m \dot{v}_{ij} + F_{ij}^0 + N F_{ij})$; F_{ij} -сила взаимодействия; $F_{ij}^0 = F_i^0 - F_j^0$; $v_{ij} = v_i - v_j$; i, j пробегает значения от 1 до N , причем $i \neq j$; $i, j = 1, 2, 3 \dots N$ - номера различных МТ; вектор $V_N = (\sum_{i=1}^N v_i) / N$ определяет положение *центра масс* тела; M_N - масса тела.

В уравнение (1) **коэффициент трения имеет аналитическую форму**. Первый член правой части определяет внешнюю силу, приложенную к центру масс. Работа этой силы меняет скорость тела. Второй член определяет преобразование энергии движения тела во внутреннюю энергию. Он отличен от нуля только при неоднородности поля внешних сил и биссимметричен, так как зависит от микро - и макропеременных. Вид уравнения (1) следует из того, что работа внешних сил делится на работу по перемещению системы, и на работу по изменению ее внутренней энергии.

Из уравнения (1) следует, что если структурностью тела можно пренебречь, то

справедлива механика Ньютона. Но если работа внешних сил идет только на увеличение внутренней энергии, то справедливо утверждение Аристотеля [7, 8]. Интересно, что к аналогичному выводу о взаимосвязи идей Аристотеля и Ньютона, пришли на основе гипотезы о скрытых параметрах [29]. В нашем случае такими скрытыми параметрами являются микропеременные, определяющие зависящие от скорости диссипативные силы. Диссипативные силы возникают из потенциальных сил взаимодействия МТ при условии, что сумма этих сил равна нулю, а их работа тратится только на увеличение относительных скоростей МТ.

Третья веха - создание теории относительности. Она способствовала развитию представлений о материи, пространстве, времени, энергии на основе идеи о конечности скорости света. В результате возникло понимание связи материи и энергии. При этом проблемы структуры материи, ее происхождения вышли на первый план.

В целом, каждый последующий шаг в познании мира уточнял и расширял существующие о нем понятия, выявлял связь этих понятий между собой. Так, сложилось представление, что динамика тел определяется геометрией пространства и материи, а они, в свою очередь, связаны с симметриями [13]. Симметрии описываются на математическом языке. Благодаря динамике, материя принимает многообразие форм, определяемое взаимодействием ее структур в соответствии с симметриями материи, пространства и времени.

Сегодня на пути построения физической картины мира стоят следующие вопросы: как принцип причинности реализуется в рамках физических законов; какова природа нарушения симметрии; какие параметры систем ставятся в соответствие симметриям тел и пространства; как процессы нарушения симметрии приводят к эволюции материи и ее свойств; как из хаоса возникают те или иные структуры; каковы базисные элементы материи; как из простых элементов с заданными свойствами возникают системы, законы, динамики которых качественно отличаются от законов их элементов. Рассмотрим, как ДМН определяет ответы на эти вопросы.

ДМН и иерархичная структура материи.

В 20-м веке стало очевидно, что динамика определяется пространственно-временными симметриями, которым соответствуют инварианты динамики, в частности, энергия, импульс [13]. Так, динамика МТ определяется симметриями пространства. Но динамика и эволюция тел, помимо симметрии пространства, определяются еще и их внутренними симметриями. Это было названо *принципом дуализма симметрии* [6, 7]. Согласно этому принципу, телу ставится в соответствие энергия движения и внутренняя энергия. Инвариантом движения тела является их сумма. Важность принципа дуализма симметрии для эволюции материи значительна. В частности, из него следует природа ДМН. Она связана с тем, что упорядоченная энергия движения тела переходит во внутреннюю энергию хаотического движения его элементов. Эволюция материи, образование ее структур, обусловлены дуализмом энергий «хаоса и порядка», преобразующихся друг в друга. ДМН связан с *нарушением симметрии времени в результате перехода энергии движения тела в энергию движения его элементов относительно центра масс тела*. ДМН следует из того, что *изменение движения тела при движении в неоднородном пространстве определяется не просто суммой изменений движений его элементов, но и тем, какая часть энергии движения переходит в энергию движения элементов тела относительно центра*

масс. Ведь каждый элемент тела вносит вклад, как в энергию его движения, так и во внутреннюю энергию. То, что движение МТ обратимо, а движение тела необратимо, определяет закон перехода *количества в качество*.

ДМН обнаруживается благодаря использованию понятия энергии и того, что сила является производным понятием от энергии, но не наоборот [6]. Так, для МТ, внешние силы определяются через энергию движения эффективностью перехода кинетической энергии в потенциальную. Но для тел внешние силы распадаются на два класса: силы, изменяющие движения тела, и силы, обуславливающие изменение внутренней энергии. Первый тип сил, как и в случае МТ, определяет переход внешней энергии в энергию движения тел. Второй тип сил определяет переход энергии движения во внутреннюю энергию. Это диссипативные силы. Они уменьшают энергию движения тел в результате ее преобразования в энергию хаотического движения элементов относительно центра масс тел.

Из механики СЧ следует бесконечная делимость материи. Она объясняется тем, что без диссипации невозможно возникновение аттракторов [10], которыми являются все природные системы. Диссипация же возможна только для систем [6].

Описание необратимости стало возможным при переходе от классической механики бесструктурной частицы к механике *структурированной частицы* (СЧ). Обозначим этот переход так: **$MT \Rightarrow CЧ$ (a).** Будем исходить из уже устоявшегося представления о том, что в природе все системы являются *неравновесными* [17, 18]. *Неравновесная система* (НС)- третья ступень приближения модели тела к реальности: **$MT \Rightarrow CЧ \Rightarrow НС$ (b).** НС можно представить совокупностью СЧ, а те, в свою очередь, совокупностью МТ. Как из механики бесструктурной частицы возникает механика СЧ, так и из механики СЧ возникает механика НС. Но если модель СЧ приводит к ДМН, то модель НС позволяет обосновать законы термодинамики в рамках законов механики [7]. Видим, что ***приближение модели тел к реальности не только позволяет найти механизм необратимости, но и установить связи между разделами физики!***

Процессы образования новых структур материи возможны лишь при их взаимодействии в результате обмена энергией, импульсами, материей. Отсюда следует, что при описании процессов эволюции *необходим учет открытости систем* [18, 19]. ***Чтобы физическая модель картины мира включала эволюцию, она должна учитывать все перечисленные выше свойства материи: структурность, неравновесность, открытость, динамику, и бесконечную делимость.*** Это означает, что в качестве базового элемента материи следует взять ОНДС. Отсюда следует, что, ***как материя не может существовать без движения, так и ее внутренняя энергия не может равняться нулю.*** Подчеркнем, что раньше это утверждение связывали с законами квантовой механики. Оказывается, что оно также следует и из принципа дуализма симметрии. То есть, все природные системы являются иерархией ОНДС [6,7, 18-20]. Бесструктурных элементов в природе существовать не может. Идея о том, что материя представляет собой иерархию ОНДС, не нова. Она встречается при объяснении процессов самоорганизации, возникновения структур из хаоса [6, 10, 18-22]. Значит, чтобы включить в описание материи процессы эволюции, цепочку (b) следует продлить еще на один шаг: **$MT \Rightarrow CЧ \Rightarrow НС \Rightarrow ОНДС$ (c).**

Рассмотрим характерные для тел закономерности, если они представляют собой иерархию ОНДС. Для этого будем исходить из того, что законы механики МТ, механики структурированных частиц и неравновесных связаны редукционным образом.

В соответствии с редукционизмом законов тел на основе законов их элементов, имеют место следующие условия взаимосвязи законов ОНДС с законами их элементов [6, 20]:

1. Законы верхнего иерархического уровня ОНДС следуют из законов динамики его элементов нижнего иерархического уровня;

2. Модель тела, представляющего собой ОНДС должна включать в себя параметры, входящие в смежные уровни описания (макро-описание и микро-описание);

3. Макро-описание, определяющее поведение верхнего иерархического уровня ОНДС, следует из микро-описания нижнего иерархического уровня ОНДС за исключением особых точек. То есть, макро-описание «вложено» в микро-описание;

4. При переходе к верхнему иерархическому уровню ОНДС, система фундаментальных понятий и определяющих параметров нижнего иерархического уровня дополняется фундаментальными понятиями и параметрами, отображающими свойства верхнего иерархического уровня ОНДС;

5. Энергия, энтропия, сила - основные физические понятия, определяющие эволюцию ОНДС. Силы определяют эффективность трансформации соответствующих типов энергий и энтропий. Потенциальные силы определяют изменение энергии движения систем. Диссипативные силы определяют изменение энтропии;

6. Эволюция ОНДС на каждом иерархическом уровне определяется принципом дуализма симметрии;

7. Описание процессов возникновения и развития верхнего иерархического уровня ОНДС требует учета структурности всех ее нижних иерархических уровней.

Эти условия вытекают из построения механики структурированной частицы [6]. Они свидетельствуют о редукционной природе формирования свойств систем на основе свойств их элементов и согласуются с ДМН, принципами причинности, детерминизмом и с требованием единственности картины мира.

То, что материя состоит из ОНДС, соответствует существованию устойчивой иерархии структур материи: молекулы, атомы, ядра, нуклоны и т.п. Причем иерархия сил выстраивается в соответствии с иерархией материи. Чем больше внешние силы, тем глубже по иерархической лестнице идет перестройка систем. Когда внешние силы много меньше внутренних сил, ролью структурности тела во взаимодействиях можно пренебречь. Тогда движение тела описывается уравнением Ньютона и определяется симметриями пространства. Но и здесь в некоторых случаях, например, при бифуркации, такое упрощение невозможно [6, 10]. Сущность бифуркации заключается в том, что в особых точках фазового пространства происходит изменение топологии системы, наблюдается нарушение симметрии [10]. Для решения бифуркационных задач используют понятие вероятности. Однако, если учесть условие бесконечной делимости материи, то можно увидеть аналитический путь ее решения. Он опирается на то, что при бесконечной делимости материи, точка бифуркации обладает структурой. То есть, *описание системы на микроуровне снимает особенность макро-описания динамики тела в точке бифуркации!* В микропеременных точка бифуркации становится некоторой областью пространства. Действительно, рассмотрим диск на вершине равнобедренного треугольника. Если учесть, что диск и треугольник обладают структурой, то задача по определению, в какую сторону, левую или правую, покатится шарик, сводится к решению уравнений движения микрочастиц диска и треугольника. Следовательно, учет структуры материи приводит к возможности детерминированного микро-описания процессов эволюции в особых точках макро-описания. Аналогичная

ситуация возникает и в случае бафферинга эффекта [10]. Эти примеры свидетельствуют о том, что *вероятностное описание процессов эволюции связано не с его фундаментальностью, а с огрублением микро-описания*. Такой вывод имеет большое значение. Из него видно, что область использования математики для описания тех или иных процессов определяется их физической природой. То есть, возможность использования того или иного математического аппарата для описания физических процессов определяется физикой процесса. Подтверждением этому заключению также может служить и то, что потенциал, определяющий нарушение симметрии времени в механике структурированных частиц, по форме совпадает с эмпирическим потенциалом, используемым Ландау, а затем и при описании бозона Хиггса. Этот потенциал не редко называют «Мексиканской шляпой» [31].

В природе нет материи без движения. Но на практике мы сталкиваемся с их стационарным описанием. Поэтому очень важен вопрос, как реализуются стационарные состояния тел, если ОНДС является базовым элементом.

Прежде всего, отметим, что сущность хаотического движения заключается в движении элементов любой части тела относительно соответствующего ей центра масс при условии, что центр масс покоится. То есть, хаос – состояние покоя равновесной подсистемы тела при условии, что все ее элементы находятся в движении.

Для ОНДС понятие стационарности является относительным. *ОНДС будем считать стационарной, если ее макропараметры сохраняются в течение такого характерного времени, который значительно больше характерных времен ее внутренних процессов*. То есть, во всех физических точках значения ее параметров не меняются в течение этого характерного времени и ОНДС сохраняет иерархическую форму [22, 24, 25]. *Стационарность ОНДС возможна только при наличии внешних ограничений, обеспечивающих баланс входящих и исходящих потоков вещества, энергии, энтропии на всех иерархических уровнях* [10, 17, 19].

Простейшей стационарной ОНДС является конвективная ячейка Бенара. Она возникает и существует при наличии потока тепла, созданного перепадом температуры на границах газа или жидкости [21]. Этот поток, поддерживаемый градиентом температуры, компенсирует диссипативные процессы. Чем выше на иерархической лестнице материи находится ОНДС, тем сложнее должны быть потоки, обеспечивающие ее стационарность. Так, если существование ячейки Бенара обеспечивается только постоянством потока тепла, то для существования более сложной ОНДС, например, живой клетки, требуется баланс потоков различных типов вещества и энергии. При этом поступающее вещество само является совокупностью ОНДС более низких иерархических ступеней. Таким образом, *все элементы материи могут существовать только благодаря взаимодействиям между собой и с внешним миром*. Внешние ограничения, которые поддерживают ОНДС в стационарном состоянии и позволяют им эволюционировать в соответствии с присущими им процессами, удобно назвать *гармоничными ограничениями*. Из принципа дуализма симметрии следует, что гармоничные ограничения определяются симметриями, как тела, так и пространства. *Стационарность ОНДС требует гармонии на всех ее иерархических уровнях*. Нарушение симметрии и эволюция связаны с качественными изменениями структуры ОНДС в результате нарушения условий их существования.

Единство природы следует из условия открытости. Вселенную нельзя разделять на независимые части, что из необходимости делается при математическом описании.

Дирак предположил, что это недостаток математических моделей устраним, если развивать теорию ОНДС [24]. Это подтверждает вывод о структуре материи, как о самосогласованной иерархии эволюционирующих в пространстве ОНДС [25, 26]. Такой вывод находится в согласии с эволюционизмом, с идеей о единстве, взаимосвязи и взаимозависимости всех структур Вселенной [3].

ДМН и физика эволюции.

Чтобы физика смогла описывать процессы эволюции, необходимо выполнение в рамках ее законов принципа причинности. Такое описание было невозможным до тех пор, пока не был установлен ДМН. То есть, установление ДМН открыло возможность построения *физики эволюции* [6]. Поясним, какой смысл вкладывается в понятие физика эволюции. Необходимость такого пояснения диктуется тем, что в различных областях науки, а порой даже в разделах одной ее области, понятие эволюции часто трактуют по-разному.

Возникновение понятия эволюции связано с именем Ч. Дарвина [9]. Он определил эволюцию, как процессы развития биологических видов в результате их адаптации к изменяющимся внешним условиям. Понятие эволюции используется и в физике. Как правило, в физике его связывают со вторым законом термодинамики, который обуславливает существование «стрелы времени» [4]. Но такое определение эволюции сужает возможность его использования до описания процессов возрастания энтропии, и затрудняет его применение для процессов возникновения и существования ОНДС структур. Чтобы снять это ограничение, следует учесть, что процессы рождения систем, их развития и исчезновения также относятся к эволюции. В соответствии с этим, *физикой эволюции назовем ее область, изучающую процессы возникновения, развития и разрушения природных объектов*. Данное определение позволяет его использовать не только для описания процессов в костной материи, но и в живой. Если принять, что все физические объекты являются ОНДС, то *задача физики эволюции состоит в изучении принципов и законов возникновения, развития и разрушения ОНДС на основе фундаментальных физических законов*.

Диссипация до объяснения ДМН входила в физику эмпирическим образом. И лишь в результате установления ДМН, удалось связать ее с фундаментальными законами физики. То есть, **благодаря учету структуры тел в их динамике, появилась возможность детерминированного описания процессов эволюции** [6]. Но если мир развивается в соответствии с детерминированными законами природы, то справедливо утверждение, что *в природе нет ничего, что не возникало бы из более простого* [3, 25].

ДМН следует из принципа дуализма симметрии и структурности материи. Принцип причинности следует ДМН [7, 19]. Поэтому *эволюция является детерминированным процессом, и законы эволюции следуют из фундаментальных законов физики*.

Из принципа дуализма симметрии следует дуализм двух типов энергии: внутренней энергии и энергии движения. Внутренняя энергия – энергия хаоса. Энергия движения – энергия порядка. В физике понятие идеального хаоса связывают с тем, что в любой физической точке тела сумма скоростей движения элементов равна нулю. Отсюда логично заключить о законе единства и борьбы противоположностей хаоса и порядка, благодаря которым происходит эволюция мира.

Ключевым параметром, определяющим эволюцию, является энтропия. Она связана с процессом перехода энергии движения во внутреннюю энергию. С этим также связано нарушение симметрии времени. Ее нарушение определяется частью энергии движения тела, которая переходит в хаотическую энергию ее элементов. Эта часть энергии движения характеризуется Д-энтропией. Д-энтропия определяется, как отношение величины изменения внутренней энергии к ее полной величине [6, 7]. Она играет роль меры упорядоченной энергии движения тел, переходящей в энергию хаоса. Также можно предложить эволюционное понятие времени, как меру эффективности преобразования энергии порядка в энергию хаоса, определяемой Д-энтропией.

Изучение Д-энтропии для систем с различным числом элементов, движущихся в поле сил, показало, что при числе элементов системы $N < 100$ изменение Д-энтропии бывает положительным и отрицательным. При $N > 100$ Д-энтропия только положительна. Это число характеризует переход системы к новому качеству, в котором применимы законы статистики. При $N > 1000$, рост Д-энтропии перестает зависеть от числа элементов. Это число определяет область применимости термодинамики. *Это позволяет утверждать, что область использования эмпирических законов определяется фундаментальными законами физики [21, 23, 30].*

Примем, что материя представляет собой иерархию ОНДС и процессы возникновения и эволюции обладают универсальностью. Исходим из возможности построения законов эволюции иерархических структур материи на основе законов их элементов. То есть, законы поведения верхних ступеней материи, следуют из законов нижних ступеней. *Это означает возможность построения эволюционной картины мира в рамках детерминированных законов, поднимаясь по ступеням иерархической лестницы материи от базовых ОНДС до самой Вселенной.* Причем такая возможность относится и к живой материи с ее сложнейшими обратными взаимосвязями с окружающим миром. Если встать на позицию Маркса, согласно которой сознание понимается, как свойство материи отражать саму себя, а не как отдельная, самостоятельная сущность, то, в принципе, можем развить физику сознания.

Без диссипативных сил невозможно возникновение аттракторов, которыми, по своей сути, являются все природные системы. Это означает, что МТ в природе не существует. Ведь для них невозможна диссипация, без которой невозможно возникновение систем материи [17, 21]. Следовательно, определяющая диссипацию *структурность материи – необходимый атрибут эволюции, обуславливающий возникновение и эволюцию природных систем.* Аналогичное заключение следует и из статистического анализа ОНДС, согласно которому при изучении процессов эволюции необходим учет структуры тел уже на первых шагах описания процессов [19].

В соответствии с законами механики, возможно построение физики эволюции. Доказывает ли это возможность ее построения в микромире, где справедливы законы квантовой механики? Здесь создание физики эволюции упирается в объяснение принципа неопределенности Гейзенберга, согласно которому нельзя одновременно определить положение и импульс микрочастицы [25, 27]. Это нарушает принцип причинности в микромире и практически исключает возможность построения физики эволюции. Но, как оказалось, учет структуры тел открывает принципиальную возможность преодолеть это затруднение. Оказывается, что если строить квантовую механику с учетом принципа дуализма симметрии, то принцип неопределенности можно связать с тем, что он обусловлен ролью структуры «элементарных» частиц в их

динамике. Действительно, принцип неопределенности появился в квантовой механике из-за ее построения на основе уравнения Шредингера, которое, как и уравнения движения МТ, не учитывает роль структуры частиц в их движении. Это неизбежно ведет к погрешностям расчетов, связанных с тем, что внутренняя энергия частицы не может быть равной нулю [28]. То есть, принцип неопределенности может быть обусловлен методами описания квантовых систем, а не природой микромира.

В целом, актуальность физики эволюции сегодня особенно остро связана с экологическими проблемами, проблемами изменения климата, описания техногенных и природных катастрофических явлений.

Заключение.

Эволюция - основная задача физики. Построение физики эволюции стало возможным в результате построения механики структурированных частиц. Согласно этой механике в природе могут существовать только структурированные тела. Их динамика определяется принципом дуализма симметрии, согласно которому энергия тела представляет собой инвариантную вдоль траектории тела сумму внутренней энергии и энергии движения в пространстве. И лишь тогда, когда внутренняя энергия не меняется, механика структурированных тел сводится к механике Ньютона.

Из механики СЧ вытекают следующие выводы: все природные системы представляют собой ОНДС; ДМН обусловлен переходом упорядоченного движения взаимодействующих систем в хаотическое движение их элементов; материя делима до бесконечности и представляет собой иерархию ОНДС; существуют универсальные принципы перехода между смежными иерархическими ступенями структуры ОНДС; свойства систем детерминированным образом следуют из свойств их элементов; переход между иерархическими звеньями материи определяется фундаментальными законами физики и подчиняется принципу причинности, что позволяет строить картину мира по принципу «от простого к сложному».

Существование ДМН является доказательством возможности описания процессов эволюции в рамках законов физики, а значит, будущее следует из настоящего детерминированным образом. *Использование статистических законов можно рассматривать, как огрубление моделей природных явлений для решения конкретных задач, либо как допустимое упрощение в физических задачах при отсутствии достаточной информации о начальных и граничных условиях.* Как утверждал Эйнштейн; «бог не играет в кости». Следовательно, существующие границы познания мира связаны, как с ограниченностью наших знаний о нем, так и с ограниченностью моделей, но не с тем, что эти ограничения лежат в самой природе эволюции материи.

Процесс эволюции идет в соответствии с законом единства и борьбы противоположностей – порядка и хаоса. Порядок следует связывать с упорядоченным движением тел, а хаос с внутренней энергией движения его элементов. Хаос и порядок в природе не бывают абсолютными. Энтропия не достигает максимума, а внутренняя энергия любого природного объекта не может быть равной нулю.

Основной путь построения физических знаний связан с выявлением законов природы в результате наблюдений и экспериментов. Практически вся физическая теория была построена на этом пути. Но ДМН был обнаружен в результате приближения модели тел к реальности путем замены модели тела в виде материальной точки на структурированные частицы. Это дало возможность описания процессов

эволюции и показало, что физические знания можно развивать, если развивать существующие теории путем приближения используемых в них моделей к реальности.

ДМН вводит принцип причинности в рамки фундаментальных законов физики и подтверждает принцип общих оснований, согласно которому все материальные объекты имеют общие истоки и корни [3, 4]. Тем самым ДМН открывает новые возможности построения физической картины мира по пути универсального эволюционизма в рамках законов физики.

В результате расширения механики, возникающего из-за учета влияния структурности тел на его динамику, появляются новые подходы к решению многих актуальных вопросов и задач физики. Сюда можно отнести вопрос об общности потенциала классической механики, определяющего нарушение симметрии времени из-за эволюционной нелинейности. В пользу его общности говорит теорема Нетер о существовании инвариантов для динамических групп симметрии. Не исключено, что нарушение симметрий связано с эволюционной нелинейностью, обеспечивающей зацепление переменных различных групп симметрии. Это говорит о возможности аналитического описания спонтанного нарушения симметрии и наталкивает на идею о необходимости построения формализма для описания различных типов бифуркации.

Другая задача связана с появлением принципа неопределенности в механике. Этот принцип связан с неопределенностью траектории тела из-за пренебрежения ролью поглощения им энергии движения. Поскольку квантовая механика строится на основе канонических формализмов классической механики, то вполне естественно, что неопределенность Гейзенберга может проистекать из-за неопределенности, обусловленной наличием структур у квантовых частиц.

Важнейшим является вопрос - к чему приведет учет бесконечной делимости материи, а также существование принципов перехода между ее иерархическими звеньями, позволяющих строить законы верхнего иерархического уровня материи, если знать законы нижнего иерархического уровня. Говорит ли это о полевой природе материи, вернет ли это идеи эфира в какой-либо новой форме, пока не известно.

Если учет структуры тела в виде совокупности материальных точек привел к физике эволюции и к установлению единства разделов физики в рамках ее фундаментальных законов, то не исключено, что учет бесконечной делимости материи приведет к новому этапу развития физики. В любом случае, очевидно, что решение этих и других задач, связанных с учетом структуры тел в их динамике и эволюции, окажет глубокое влияние на развитие физики.

Список литературы

1. Степин В.С. Теоретическое знание: Структура, историческая эволюция. – М.: Прогресс-Традиция, 2000. – С. 185–192.
2. Мостепаненко М.В. Философия и методы научного познания. – Л.: Лениздат, 1972. – С. 170.
3. Callaway H.G. Fundamental Physics, Partial Models and Time's Arrow. E-print: <https://www.researchgate.net/publication/296327588>.
4. Пригожин И. От существующего к возникающему. – М.: Наука, 1980. – 342 с.
5. Заславский Г.М. Стохастичность динамических систем. – М.: Наука. 1984. – 273 с.
6. Сомских В.М. К основам физики эволюции. – Алматы: Наука, 2016. – 306 с.

7. Somsikov V.M. Deterministic mechanism of irreversibility // Journal of Advances in Physics V. 14. (2018). Is. 3. 5708-5733p. DOI: 10.24297/jap.v14i3.7759 ISSN: 2347-3487.
8. Асмус В.Ф. Античная философия. – М.: ВШ. 1976. – 455 с.
9. Анри В. Современное научное мировоззрение // УФН. Вып. 1. 1929. С.3-13
10. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику. –М.: Наука, 1990. – 272 с.
11. Newton I. The Principia: Mathematical Principles of Natural Philosophy. – Cambridge: University of California Press, 1999. – 974 p.
12. Ланцош К. Вариационные принципы механики. – М.: Мир, 1962. – 408 с.
13. Вигнер Е. Симметрия и законы сохранения // УФН. Вып. 4. 1964. —С. 729-740.
14. Гейзенберг В. Открытие Планка и основные философские проблемы атомной теории// УФН. вып. 2. 1968. — С.163-175.
15. Anderson P. W. More Is Different //Sci. New Series, V.177. No. 4047. 1972 — P. 393-396.
16. Крылов А.Н. Очерки истории установления основных начал механики// УФН. Вып. 2. 1921—С.143-161.
17. Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш. Термодинамика, статистическая физика и кинематика. – М.: Наука, 1977. – 532 с.
18. Климонтович Ю.Л. Стат. теория открытых систем. – М.: Янус, 1995.– 292 с.
19. Somsikov V.M. Deterministic irreversibility and the matter structure // Journal of Advances in Physics. V. 16. 2019. – ISSN: 2347-3487
20. Сомсиков В.М. Открытые неравновесные динамические системы // ПЭОС. 19(2). 2017. — С.33-47.
21. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. – М., 1976. – 583 с.
22. Somsikov V. M. Transition from the mechanics of material points to the mechanics of structured particles // Modern Physics Letter B. Issue 4. – 2016. – P.1-11.
23. Сомсиков В.М., Андреев А.Б. О критериях перехода к термодинамическому описанию динамики систем // Изв. Вузов. Серия Физика. – 7. 2015.– С. 30-39.
24. Dirac P.F.V. The relation between metaphysics and physics // Proceedings of the Royal Society. Edinburg A V. 59 1938. – P. 122-129.
25. Гейзенберг В. Физика и философия. Часть и целое: М.: Наука. ФМЛ. – 400 с.
26. Somsikov V.M. Problems of Evolution of Open Systems //PEOS. 9(2) — 2007.— P.5-16.
27. Werner R. F., Farrelly T. Uncertainty from Heisenberg to Today. arXiv:1904.06139v1 [physics.hist-ph] 12 Apr 2019.
28. Somsikov V.M. Extension of the Schrodinger equation. ISHEPP.XXIII. Dubna, — 2017. — P.1-7.
29. Колесников А.А. От системного синтеза – к началам системной физики // Изв. ЮФО. Технические науки. Вып.6. –119. –2011. – С.6-19.
30. Somsikov V. M.& Azarenko S. N. Determinism in Physics and Cognoscibility of a Picture of the World // Open Journal of Philosophy. 9. 2019. 265-280. <https://doi.org/10.4236/ojpp.2019.93018> .
31. Сомсиков В.М. Детерминированная необратимость в природе хаоса и порядка // ПЭОС. Вып. 21. Т. 1. 2019. с. 21-37.

ВЛИЯНИЕ НЕМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ НА ДИНАМИКУ МАГНИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ В ОДНОМЕРНОМ ИЗИНГОВСКОМ МАГНЕТИКЕ⁵

Д.В.Спирин, Ж.В.Дзюба, В.Н.Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова,
dvspirin@mail.ru, dudareva82@gmail.com, udodov@khsu.ru

Введение

В последние годы синтезировано много органических магнитных соединений с сильной одноосной анизотропией и слабым межмолекулярным взаимодействием [1-2]. Это открывает возможность детального исследования магнитных свойств изолированных низкоразмерных элементов, включая одномерные изинговские цепочки [4]. На сегодняшний день синтезировано несколько десятков веществ [5, 6] состоящих из одномерных ферромагнитных цепочек. В работе рассмотрены перколяционные эффекты в одномерном магнетике. Показано, что наличие немагнитных узлов приводит к ослаблению корреляции внутри цепочки спинов и магнетик разбивается на несколько независимых частей. Доля магнитных атомов, при которой магнетик разбивается на две некоррелирующие части, является аналогом порога протекания. Радиус протекания соответствующий самому дальнему ненулевому взаимодействию

1. Особенности модели одномерного изинговского наномангнетика с немагнитными примесями

В настоящей работе учитывается ближнее взаимодействие (j_1), взаимодействие вторых (j_2) и третьих соседей (j_3), а также четырехчастичное взаимодействие (j_4). Таким образом, учитываются все возможные взаимодействия в пределах четырех узлов и гамильтониан магнетика имеет вид [7]

$$\varepsilon = -h \sum_{i=1}^N s_i - j_1 \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - j_2 \sum_{i=1}^{N-2} s_i s_{i+2} - j_3 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+3} - j_4 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+1} s_{i+2} s_{i+3}, \quad (1)$$

где N – количество узлов в одномерном магнетике; i – номер узла; s_i – проекция безразмерного вектора спинового магнитного момента i -го узла на ось z , вдоль которой направлена напряженность внешнего магнитного поля; h – энергия взаимодействия узла с внешним магнитным полем.

Удобно выразить гамильтониан через энергию взаимодействия ближайших соседей $E = \varepsilon / |j_1|$, тогда

$$E = -H \sum_{i=1}^N s_i \pm \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} s_i s_{i+2} - J_3 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+3} - J_4 \sum_{i=1}^{N-3} s_i s_{i+1} s_{i+2} s_{i+3}. \quad (2)$$

Если энергия взаимодействия ближайших соседей положительна, то перед вторым слагаемым в гамильтониане ставится знак «–», если отрицательна, то знак «+».

В модели магнетика с переменной локализацией немагнитной примеси (нефиксированной примеси) в алгоритм Метрополиса заложена возможность перемещения немагнитных узлов вдоль цепочки. Если случайно выбранный i -й узел является немагнитным, то с вероятностью 0,5 он перемещается влево ($i - 1$) или вправо ($i + 1$) по цепочке. Крайние немагнитные узлы перемещаются только внутрь магнетика.

В модели с фиксированным положением немагнитной примеси при формировании конфигураций для параллельных реализаций алгоритма Метрополиса немагнитные примеси принимают случайные равновероятные позиции. После этого в

⁵Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 19-41-190003.

течение всего процесса положение примесей не меняется, что соответствует низким температурам.

Для определения возможности перехода ферромагнетик – антиферромагнетик в модели наномангнетика с примесью, а также для определения начальных конфигураций в алгоритме Метрополиса были построены диаграммы основных состояний [8, 9]. Из них следует, что такой переход возможен при любом числе немагнитных узлов до $N - 2$.

2. Влияние фиксированных немагнитных примесей на время релаксации перехода ферромагнетик – антиферромагнетик

Учет только ближайшего взаимодействия соответствует единичному радиусу протекания [10]. Порог протекания, выраженный через количество немагнитных узлов равен единице $X_c^{N_a} = 1$. На рисунке 1 представлены графики зависимости времени релаксации от количества немагнитных узлов для различных размеров магнетика и температур. При увеличении числа немагнитных узлов время релаксации убывает. На пороге протекания имеется небольшой излом кривой времени релаксации τ . При увеличении температуры Θ (рис. 1б) излом становится менее заметным.

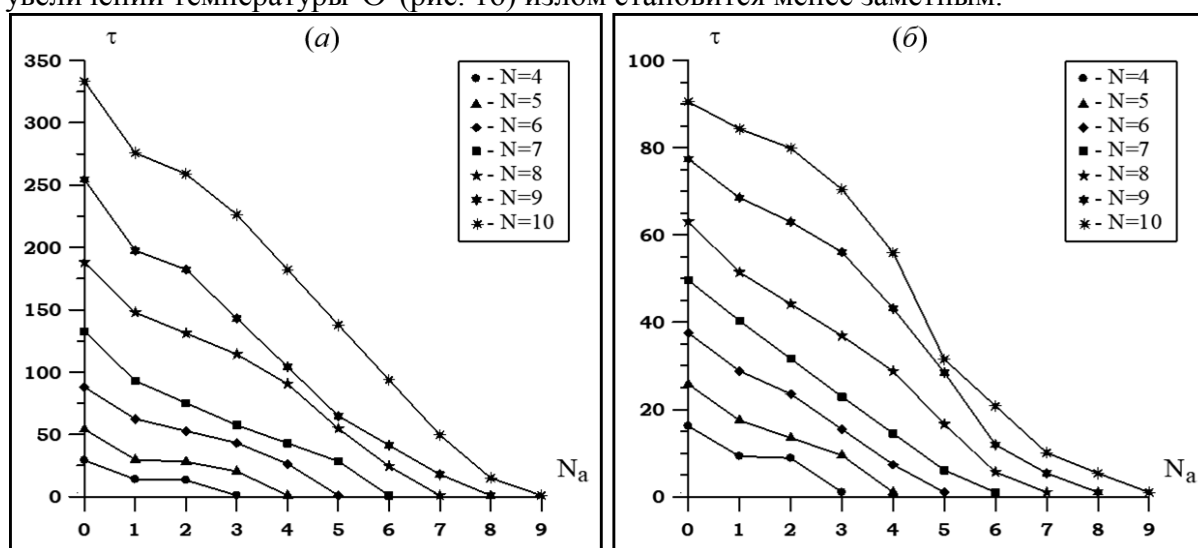


Рис. 1. Зависимость времени релаксации τ от количества немагнитных атомов N_a . а) Температура $\Theta = 0,5$, б) $\Theta = 1,0$; $H = 0$, $j_1 < 0$, $J_2 = J_3 = J_4 = 0$.

Ненулевая энергия взаимодействия вторых соседей J_2 соответствует радиусу протекания равному двум. Значения порога $X_c^{N_a}$, соответствующего такому радиусу протекания, представлены в таблице 1 [10].

Таблица 1

N	4	5	6	7	8	9	10
$X_c^{N_a}$	2,5	2,7	2,867	3,029	3,179	3,321	3,457

Из рисунка 2 следует, что до порога протекания время релаксации медленно растет (после $N_a = 1$), а после порога быстро убывает, причем на пороге наблюдается отрицательный скачок значений времени релаксации. Так как взаимодействие ближайших соседей не нулевое, то имеется скачок времени релаксации и на пороге протекания для радиуса, равного единице.

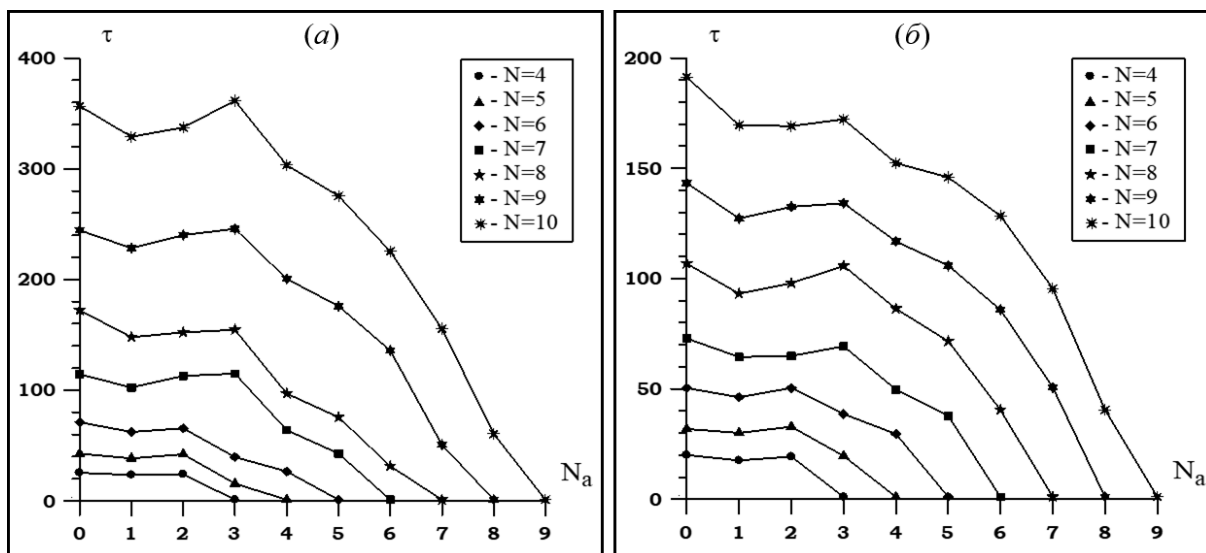


Рис. 2. Зависимость времени релаксации τ от количества немагнитных атомов N_a . а) $\Theta = 0,5$, б) $\Theta = 1,0$; $H = 0$, $j_1 < 0$, $J_2 = +0,5$, $J_3 = J_4 = 0$.

Учет взаимодействия третьих соседей и многочастичного взаимодействия соответствует радиусу протекания, равному трем. Соответствующие значения порога представлены в таблице 2 [10].

Таблица 2

N	4	5	6	7	8	9	10
X_c^{Na}	3,5	3,9	4,2	4,543	4,857	5,155	5,448

В обоих случаях поведение времени релаксации аналогично учету взаимодействия вторых соседей – до порога протекания время релаксации медленно растет (после $N_a = 1$), а после порога быстро убывает (рис. 3). Для четырехчастичного взаимодействия рост времени релаксации до порога выражен слабо. Также имеется скачок времени релаксации и на пороге протекания для радиуса, равного единице, так как $j_1 < 0$.

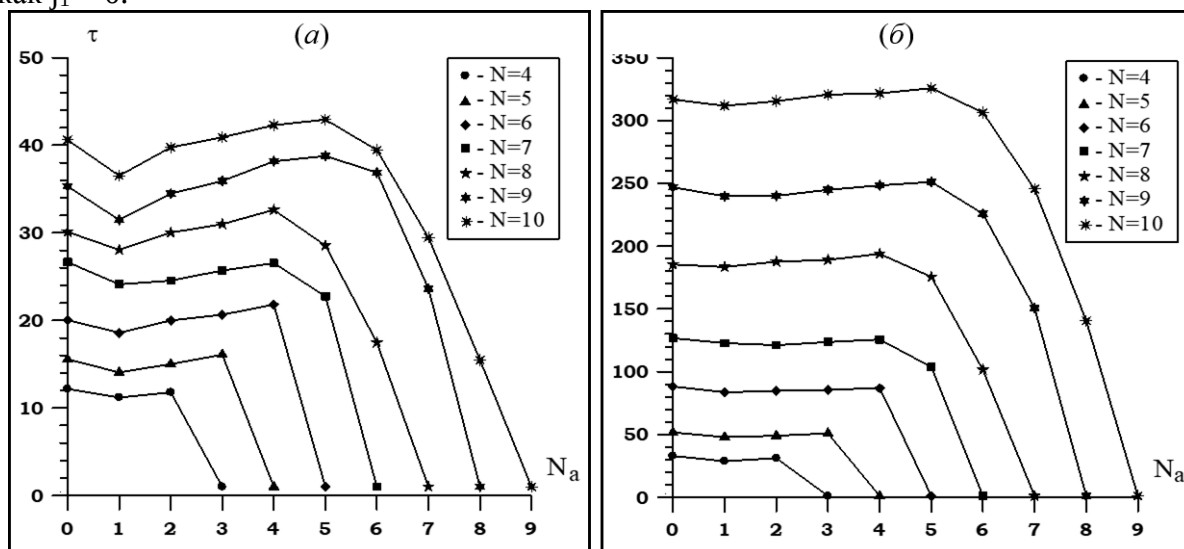


Рис. 3 Зависимость времени релаксации τ от количества немагнитных атомов N_a . а) $\Theta = 0,5$, б) $\Theta = 1,0$; $H = 0$, $j_1 < 0$, $J_3 = +0,3$, $J_2 = J_4 = 0$.

3. Влияние нефиксированных немагнитных примесей на время релаксации перехода ферромагнетик – антиферромагнетик

При исследовании зависимости времени релаксации от количества

нефиксированных немагнитных узлов выяснилось, что при учете только ближнего взаимодействия, а также и при учёте взаимодействия вторых соседей J_2 кривые времени релаксации имеют максимум. Но точного соответствия между положением максимума и порогом протекания не наблюдается.

Подобные слабые перколяционные эффекты наблюдаются при учете энергии взаимодействия третьих соседей и многочастичного взаимодействия.

4. Выводы

При фиксированном положении примесного атома, что соответствует низким температурам (замороженные примеси), в одномерном изинговском наномангнетике наблюдаются перколяционные эффекты. При всех рассмотренных взаимодействиях время релаксации до порога протекания растёт (начиная с $N_a = 1$, N_a - число немагнитных атомов), а после порога убывает.

В модели одномерного изинговского наномангнетика с перемещающейся немагнитной примесью перколяционные эффекты при значительном влиянии примесей на время релаксации и динамический критический индекс z проявляются слабо и неоднозначно.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 19-41-190003.

Список литературы

1. Bogani L. Single chain magnets: where to from here? / L.Bogani, A.Vindigni, R.Sessoli, D.Gatteschi // *Journal of Materials Chemistry*. — 2008. — V.18. — P.4750.
2. Coulon C. Effect of an applied magnetic field on the relaxation time of single-chain magnets./ C.Coulon, R.Cl'eric, W.Wernsdorfer, T.Colin, A.Saitoh, N.Motokawa, H.Miyasaka // *Physical review B*. — 2007. — V.76. — P. 214422(15).
3. Liu T.F. An azide-bridged homospin single-chain magnet: $[\text{Co}(2,2'\text{-bithiazoline})(\text{N}_3)_2]_n$ / T.F.Liu, D.Fu, S.Gao, Y.Z.Zhang, H.L.Sun, G.Su, Y.J.Liu // *J. Am. Chem. Soc.* — 2003. — V.125. — P.13976.
4. Tanaka H. Synthesis, Structure, and Magnetic Properties of a New Fe(II)-Fe(III) Alternating Single-Chain magnet Constructed With a Methyl-Substituted bpca Ligand / H.Tanaka, T.Kajiwara, Y.Kaneko, S.Takaishi, M.Yamashita// *Polyhedron*. — 2007. — V.26. - P. 2105–2109.
5. Greeney R.E. Specific-heat measurements of a one- dimensional Ising ferromagnet FeTAC / R.E.Greeney, C.P.Landee, J.H.Zhang, and W.M.Reiff // *Phys. Rev. B* 39, 12200 (1989).
6. Гулд Х. Компьютерное моделирование в физике. Ч. 1. / Х.Гулд, Я.Тобочник. — М: Мир, 1990.
7. Биндер К. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике / К.Биндер, Д.В.Хеерман. — М.: Наука. Физматлит, — 1995. - 144 с.
8. Удодов В.Н. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах / В.Н.Удодов, А.И.Потекаев, А.А.Попов и др. — Изд. ХГУ им. Н.Ф. Катанова. Абакан, 2008. — 135 с.
9. Спирин Д.В. Диаграммы основных состояний малого изинговского магнетика / Д.В.Спирин // «Физика и химия высокоэнергетических систем». — Материалы III Всероссийской конференция молодых ученых. — Томск: ТМЛ-Пресс, 2007. — С. 215–218.
10. Шпигальская Е.О. Зависимость от размеров системы критических индексов в теории одномерного протекания / Е.О.Шпигальская, Д.В.Спирин // *Физика и химия высокоэнергетических систем*. — Томск: ТМЛ-Пресс, 2007. — С. 246–249.

НАРУШЕНИЕ РАВЕНСТВА ЭССАМА-ФИШЕРА И НЕРАВЕНСТВА РАШБРУКА ДЛЯ СВЕРХТЕКУЧЕГО

ПЕРЕХОДА В ${}^4\text{He}$

В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова, udodov@khsu.ru

За последние десятилетия появились точные экспериментальные и численные модельные данные по критическим индексам для сверхтекучего перехода в ${}^4\text{He}$. Это дает возможность проверить выполнение равенства Эссама и Фишера и неравенства Рашбрука. Показано, что эти соотношения для сверхтекучего перехода в ${}^4\text{He}$ нарушаются и предложено феноменологическое объяснение этого нарушения, согласующееся с обобщенной гипотезой подобия.

1. Введение

Критические индексы (показатели) и гипотеза подобия (скейлинга) лежат в основе современной теории критических явлений и фазовых переходов [1-13]. В сверхтекучем гелии ${}^4\text{He}$ некоторые статические критические индексы измерены (и вычислены) наиболее точно с небольшой погрешностью (в том числе в космическом эксперименте) [1] (используем одно значение этого и других индексов, которые считаются наиболее правдоподобными авторами [1])

$$\nu = 0.6700 \pm 0.0006, \quad (1)$$

где ν – критический индекс корреляционной длины [2, 3, 6]. Индекс теплоемкости измерен еще более точно [1]

$$\alpha = -0.0127 \pm 0.0003. \quad (2)$$

В [1] сказано, что новые значения индексов согласуются со скейлинговым соотношением [1-3]

$$d\nu + \alpha = 2. \quad (3)$$

Однако подстановка значений индексов дает небольшое нарушение равенства

$$d\nu + \alpha = (1.9973 \pm 0.0021) < 2. \quad (4)$$

Таким образом, равенство (3) выполняется с точностью примерно до 0.003. В самом неблагоприятном случае по данным [1] это равенство нарушается почти на 0.01. Необходимо иметь ввиду, что ни в реальном, ни в численном эксперименте невозможно достичь критической температуры в точности. Это возможно только в строго математическом исследовании, которое для сверхтекучего перехода в гелии не представляется возможным.

Далее показано, что неравенство Рашбрука и равенство Эссама-Фишера [2] нарушаются более существенно для сверхтекучего перехода в ${}^4\text{He}$ при учете новых значений критических индексов и дано феноменологическое объяснение этого нарушения в согласии со статической гипотезой скейлинга [2, 3, 6-11].

2. Равенство Эссама и Фишера

Для проверки неравенства Рашбрука [2] и равенства Эссама-Фишера [2, 3, 7, 9-11] для сверхтекучего перехода в гелии-4 в статье [1] не хватает индекса параметра порядка β [2, 3]. Чтобы его найти используем следующие рассуждения. В [13] приведено выражение для модуля параметра порядка сверхтекучей фазы гелия-4 (это волновая функция конденсата)

$$(n_0)^{1/2} \propto \tau^\beta, \tau = T_\lambda - T, \quad (5)$$

где n_0 – плотность конденсата Эйнштейна атомов гелия. Далее, плотность

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 19-41-190003.

сверхтекучей компоненты гелия пропорциональна [13]

$$\rho_s \propto \tau^{2-\alpha-2\nu}, \tau \rightarrow 0. \quad (6)$$

Однако согласно (3) с точностью до 0.003 (в оптимальном случае, по мнению [1]) $d\nu \approx 2 - \alpha \approx 3\nu$ и (6) примет вид

$$\rho_s \propto \tau^\nu \propto \tau^\zeta, \quad (7)$$

что совпадает с формулами [1]. Однако в сноске [13] и в [4] сказано, что квадрат параметра порядка сверхтекучей фазы пропорционален плотности сверхтекучей компоненты (вблизи точки перехода)

$$\eta^2 \propto n_0 \propto \rho_s \propto \tau^\nu \propto \tau^{2\beta}, \tau \rightarrow 0, \quad (8)$$

следовательно,

$$2\beta \approx \nu, \quad (9)$$

с точностью около 0.003 (в оптимальном случае). Точнее, необходимо вместо индекса корреляционной длины ν использовать обозначение ν' (индекс для упорядоченной фазы), однако такое обозначение используют авторы [1], кроме того, в рамках гипотезы подобия $\nu = \nu'$ [2-3].

Теперь проверим выполнение равенства Эссама-Фишера и неравенства Рашбрука (из гипотезы подобия следует, что штрихованные индексы равны нештрихованным [2])

$$\alpha + 2\beta + \gamma = \alpha + \nu + \gamma \cong 1.9745 < 2. \quad (10)$$

Здесь в оптимальном случае погрешность равна 0.0047 $\approx$ 0.005 (с учетом погрешности равенства (3)). Значения всех критических индексов и погрешности взяты из [1]. Таким образом, равенство Эссама и Фишера [2, 3]

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (11)$$

для сверхтекучего перехода в ^4He нарушается примерно на 1.3% (более, чем на 0.025 для среднего значения), как и неравенство Рашбрука [2] (см. ниже). Если использовать другие значения критических индексов из [1], то полученные результаты принципиально не изменятся. В самом крайнем случае, по данным [1] сумма индексов равна 1,9791, т.е. нарушение равенства все равно составляет более 1%. Причем это нарушение в «неправильную» сторону с точки зрения неравенства Рашбрука [2, 9] (см. ниже). Далее предложено феноменологическое объяснение этого нарушения классических соотношений, согласующееся с обобщенной гипотезой статического скейлинга.

3. Обобщенная гипотеза статического скейлинга

В [11] предложено обобщение гипотезы статического скейлинга на случай возможности равенства критической температуры нулю. Обобщенное равенство Эссама и Фишера имеет вид [11]

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 1 + S_I, \quad (12)$$

однако для S -функции необходимо использовать более сложное выражение, чем в [11]. Это выражение таково [14]

$$S_I = (1 - A_1 |t|^m) \left(\frac{T_C}{T} \right)^n, \quad (13)$$

где $t = T - T_C$, m и n – положительные константы. Вид S -функции диктуется двумя требованиями, вытекающими из гипотезы статического скейлинга. 1. При

$T_c > 0, T \rightarrow T_c, t \rightarrow 0$ S -функция должна стремиться к единице, тогда получится классическое равенство Эссама и Фишера (11) [2, 3]. 2. При $T_c = 0$ и $T \rightarrow T_c = 0, t \rightarrow 0$ S -функция должна равняться нулю [11]. (13) удовлетворяет этим условиям, Разумеется, это выражение одно из многих возможных.. Для сверхтекучего перехода в ^4He постоянная A_1 положительна, это объясняет нарушение равенства Эссама-Фишера (11) и неравенства Рашбрука [14].

Обобщенное неравенство Рашбрука (верно для устойчивых состояний) имеет вид [9]

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq (1 + S_l) \quad . \quad (14)$$

Штрихованные индексы относятся к низкотемпературной сверхтекучей фазе. (12)-(14) являются интерполяционными формулами и имеют общий характер.

Для оценки положим $m = n = 1/2, t = 10^{-6} \text{ K}$, тогда для выполнения (10) достаточно, чтобы (см. (13)) [14]

$$A_1 = 25.5 / K^m \quad . \quad (15)$$

Если $m = 1/4, n = 1/2$, (или $n = 1; 2$), $t = 10^{-8} \text{ K}$, то $A_1 \approx 2.6 / K^m$. Чтобы оценить значения параметров m, n и A_1 из экспериментальных данных нужны очень детальные прецизионные сведения по критическим индексам (для состояния полного термодинамического равновесия), которых пока нет [14].

Интерполяционные формулы (12)-(14) справедливы для любых равновесных фазовых переходов, в том числе при $T_c = 0$ или при $T_c \rightarrow 0$ (абсолютная температура при этом положительна). Выражения (12) и (13) косвенно подтверждаются модельными данными А. Муртазаева [12], где левая часть равенства Эссама-Фишера по расчетным данным существенно меньше 2 (около 1.5).

4. Заключение

Таким образом, на основе расчетных и экспериментальных данных показано, что классическое равенство Эссама и Фишера и классическое неравенство Рашбрука для сверхтекучего перехода в гелии-4 нарушаются более, чем на 1%. Предложено феноменологическое объяснение этого нарушения, согласующееся с обобщенной гипотезой статического скейлинга. Предложены обобщенное интерполяционное равенство Эссама и Фишера (12), (13) и обобщенное неравенство Рашбрука (14), которые верны и для случая критической температуры, равной нулю. Обобщенные интерполяционные формулы в предельных случаях (1: при $T_c > 0, T \rightarrow T_c, t \rightarrow 0$; 2: при $T_c = 0$ и $T \rightarrow 0 = T_c$) согласуются с гипотезой статического скейлинга [11]. Обобщенные формулы, по-видимому, верны (хотя бы качественно) также и для случая, когда критическая температура является переменной и может стремиться к нулю, как для квантовых фазовых переходов [5, 6, 7], в частности, это возможно для переходов в сверхпроводящее состояние [6]. Возможно, что равновесные формулы (12)-(14) будут нарушаться при низких температурах из-за квантовых флуктуаций, кроме того при приближении к абсолютному нулю время релаксации стремится к бесконечности, что затрудняет экспериментальную проверку. Для выяснения этих вопросов нужны дополнительные исследования как экспериментальные, так и теоретические, а также численные исследования в рамках известных и новых компьютерных моделей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 19-41-190003.

Список литературы

1. Погорелов А.А. О критических индексах для λ -перехода в жидком гелии / А.А.Погорелов, И.М.Суслов // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — **86**, Вып.1. С. 41 – 47. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0021364007130097>.
2. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления / Г.Стенли. — М. Мир, 1973. — 425 с.
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. Гинзбург В.Л. Сверхпроводимость и сверхтекучесть (что удалось и чего не удалось сделать) / В.Л. Гинзбург // УФН. — 1997. — **167**, №4. С.429 – 454. DOI: 10.3367/UFNr.0167.199704f.0429
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. — New Haven, USA, Yale University, 1999. — 488 p.
7. Абрикосов А.А. Основы теории металлов / А.А.Абрикосов. — М., ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 598 с.
8. Cano A. On Low-Temperature Structural Phase Transitions / A.Cano, A.P.Levanyuk // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2006. — V. 19. — № 3–5. P. 417–426.
9. Udodov V. Violating of the Essam-Fisher and Rushbrooke Relationships at Low Temperatures / V.Udodov // World Journal of Condensed Matter Physics. — 2015. — V.5, №2. — P.55-59. DOI: 10.4236/wjcmp.2015.52008
10. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. — М., Наука, 1982. — 382 с.
11. Удодов В.Н. Новые следствия гипотезы статического подобия при низких температурах / В.Н.Удодов // Физика твердого тела. — 2015. — Т. 57. — Вып.10. С. 2018-2022. DOI 10.1134/S1063783415100340.
12. Муртазаев А.К. Критические свойства фрустрированных спиновых систем на слоистой треугольной решетке / А.К.Муртазаев // УФН. — 2008. — Т. 178. — №9. — С. 1001-1006.
13. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 9. Статистическая физика. Ч. 2 / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М., Наука, 1978. — 448 с.
14. Удодов В.Н. Новая модельная классификация равновесных фазовых переходов / В.Н.Удодов // Южно-сибирский научный вестник. — 2019. — №1(25). — С. 131-136.

О КЛАССИФИКАЦИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ¹

В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет имени Н.Ф. Катанова, Инженерно-технологический институт, кафедра производственных технологий и техносферной безопасности, Россия, Хакасия, г. Абакан, пр. Ленина, д. 90, 655017 udodov@khsu.ru

Предложена новая термодинамическая классификация фазовых переходов (ФП) при изменении температуры или поля, обобщающая подход Р. Бэкстера. На основе формулы Бэкстера развита классификация равновесных ФП. Род ФП рассмотрен как нормальная физическая величина, которая связана с критическим индексом теплоемкости α или с индексом δ . Индекс α определяет температурную зависимость теплоемкости при приближении к точке ФП в нулевом поле и может быть измерен экспериментально, рассчитан теоретически или методами компьютерного моделирования. При таком подходе род ФП для данной фазы не зависит от состояния другой фазы и род ФП может быть разным по разные стороны от точки ФП в отличие от подхода Пауля Эренфеста.

В эксперименте и при численном компьютерном моделировании критический индекс теплоемкости может быть различным выше и ниже точки ФП, тогда согласно предлагаемой классификации род ФП выше и ниже точки ФП по температуре будет различным. Методом компьютерного моделирования впервые показано, что для кластеров из десятков узлов род ФП может быть отрицательным или равным нулю и выяснен физический смысл этого.

Подход Эренфеста неприменим также, если критическая температура равна нулю, что имеет место для квантовых ФП, например, для перехода в сверхпроводящее состояние. Предложенная классификация применима и в этом случае, если при постоянных параметрах уменьшать температуру.

Предложена новая формула для рода ФП при изменении внешнего поля (при критической температуре), куда входит критический индекс δ . Впервые определен диапазон изменения рода равновесных ФП как при изменении температуры, так и при изменении поля.

1. Введение

Фазовые переходы (ФП) изучаются уже более 150 лет в физике, астрофизике, химии, геологии, биологии, математической физике, различных разделах техники (металлургия, материаловедение, информатика и др.) [1-18]. В такой ситуации создание классификации ФП актуально и является непростой задачей, во всяком случае, общепринятой классификации как равновесных, так и неравновесных ФП не существует. Широко известна классификация равновесных ФП Эренфеста, согласно которой бывают ФП 1-го и 2-го рода [1-3, 6, 9].

При обычном подходе род ФП не является нормальной физической величиной: он не может быть измерен и вопрос о том, с какой точностью данный ФП есть, например, ФП 1-го рода не ставится [1-3, 6, 9].

Цель работы: рассмотреть классификацию равновесных ФП, связанную с критическим индексом теплоемкости, следуя подходу Р. Бэкстера [2]. При таком подходе род ФП является нормальной физической величиной: он может быть измерен экспериментально или рассчитан теоретически и может быть оценена ошибка в определении этой величины.

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 19-41-190003.

2. Классификация фазовых переходов

Рассмотрим известную классификацию равновесных ФП Эренфеста П. [1-3, 6, 9]. Обычно рассматривают ФП первого и второго рода. При ФП 1-го рода при изменении температуры или давления энтропия испытывает конечный скачок, который связан с теплотой ФП [1-3]. То есть, при ФП 1-го рода обязательно или

выделяется или поглощается некоторое количество тепла, которое может быть измерено или рассчитано. При ФП 1-го рода (и только при них) наблюдаются двухфазные (или многофазные) состояния, то есть в точке ФП 1-го рода находятся в равновесии, по крайней мере, две различные фазы вещества, которые разделены поверхностью раздела фаз. Это говорит о том, что фазы в точке ФП 1-го рода существенно отличаются какими-то свойствами, например, плотностью. Термин «ФП 1-го рода» связан с тем, что при ФП испытывают конечный скачок первые производные от термодинамического потенциала (обычно, свободной энергии F или энергии Гиббса G) – это энтропия и объем [1-3]

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V, \quad V = \left(\frac{\partial G}{\partial P}\right)_T. \quad (1)$$

Примеры ФП 1-го рода – это большинство переходов между кристаллическими модификациями (структурные ФП), плавление или испарение, переход в сверхпроводящее состояние в магнитном поле [2, 3, 6] и ряд других ФП.

При ФП 2-го рода скачок энтропии при ФП равен нулю, равны нулю и скачки всех функций состояния, в этом смысле ФП 2-го рода является непрерывным, так как скачок состояния равен нулю, в отличие от ФП 1 рода. При ФП 2 рода теплота ФП равна нулю и двухфазных состояний нет [1-3, 6, 9]. В точке ФП 2-го рода состояние однофазно и при приближении к точке ФП 2 рода различие между фазами стремится к нулю. Однако Эренфест (1933 г.) предполагал, что при ФП 2-го рода конечные скачки испытывают вторые производные от потенциалов по температуре и давлению (напряженности внешнего поля) [1-3]. Через вторые производные выражаются теплоемкости C_p , C_v , сжимаемость k_T , восприимчивость χ [1-3, 6, 9]

$$C_p = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_P, \quad C_v = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V, \quad (2)$$

$$k_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 G}{\partial P^2} \right)_T, \quad \chi = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_T, \quad (3)$$

где T – абсолютная температура, V – объем, P – давление, H – напряженность магнитного поля. Все эти величины измеряются экспериментально или могут быть рассчитаны, в том числе методами компьютерного моделирования [16].

Примеры ФП 2-го рода: переход металлов и сплавов в сверхпроводящее состояние в нулевом магнитном поле [1, 3, 6], ФП в сверхтекучее состояние в жидком гелии-4 [1, 3, 6] (хотя скачок теплоемкости при этом ФП равен нулю (см. ниже), то есть это ФП 2-го рода не по Эренфесту), ФП ферромагнетик-парамагнетик в рамках модели Изинга в нулевом магнитном поле [1, 6, 9] (при этом теплоемкость обращается в бесконечность, то есть это также ФП 2-го рода не по Эренфесту (см. ниже)), некоторые другие ФП.

Вскоре выяснилось, что классификация Эренфеста не всегда справедлива. Оказалось, что во многих случаях как в теории, так и, насколько можно судить, в эксперименте теплоемкости, сжимаемость и восприимчивость обращаются в

бесконечность в точке ФП [1-3, 6, 9]. Речь идет о ФП 2-го рода. Дело в том, что при ФП 1-го рода, например, при кипении при атмосферном давлении теплоемкость C_P равна бесконечности [14], однако здесь нет никакой физической загадки, эта бесконечность связана с существованием двухфазного состояния. В точке равновесного ФП 2-го рода имеется существенная особенность (связана с флуктуациями), характер которой был, в основном, выяснен до 1990 г. [1-3, 6, 9].

Кроме того, с 60-х годов 20 века большое внимание стали привлекать критические индексы, которые не учитываются в классификации Эренфеста [1-18].

Было замечено, что в нулевом поле для равновесных состояний сингулярная часть свободной энергии при приближении к точке ФП имеет следующий вид [2, 3]

$$F_s \propto \varepsilon^{2-\alpha} = \varepsilon^r, \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (4)$$

$$\varepsilon = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (5)$$

где [2]

$$r = 2 - \alpha, \quad (6)$$

r – род ФП. (6) будем называть формулой Бэкстера. Формулы (4) и (6) верны для высокотемпературной фазы, которая обычно является неупорядоченной [3]. Для упорядоченной фазы формула Бэкстера имеет вид [18]

$$r' = 2 - \alpha', \quad (7)$$

где r' – род ФП для упорядоченной фазы, α' – критический индекс теплоемкости для упорядоченной фазы (α без штриха – критический индекс теплоемкости для неупорядоченной (обычно высокотемпературной) фазы). Индексы теплоемкости определяются следующим образом [1, 2]

$$C \propto \varepsilon^{-\alpha}, \quad \varepsilon \rightarrow +0 (\varepsilon > 0), \quad (8)$$

$$C \propto (-\varepsilon)^{-\alpha'}, \quad \varepsilon \rightarrow -0 (\varepsilon < 0), \quad (8')$$

Поясним, почему величину r можно считать родом ФП. Для простоты проведем рассуждения для высокотемпературной фазы (и пусть $T_c = 1$). Сначала найдем энтропию (см. (4))

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_v \propto (2 - \alpha)\varepsilon^{1-\alpha} \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} = (2 - \alpha)\varepsilon^{1-\alpha}. \quad (9)$$

Теплоемкость равна [1-3]

$$C = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right) \propto T_c \frac{\partial}{\partial T} (2 - \alpha)\varepsilon^{1-\alpha} \quad (10)$$

или

$$C \propto (2 - \alpha)(1 - \alpha)\varepsilon^{-\alpha} \propto \varepsilon^{-\alpha}, \quad (11)$$

что совпадает с определением критического индекса теплоемкости [1-3].

С другой стороны, пусть род ФП равен, например, двойке. Найдем энтропию (см. (4))

$$S \propto \frac{\partial}{\partial T} \varepsilon^r \propto \frac{\partial}{\partial T} \varepsilon^2 = 2\varepsilon^1, \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (12)$$

Используем теорию ФП Ландау [1, 3], тогда (12) – энтропия упорядоченной фазы, так как для неупорядоченной фазы в теории Ландау все термодинамические характеристики равны тождественно нулю (в состоянии равновесия) [3]. Но в точке ФП ($\varepsilon = 0$) энтропия упорядоченной фазы (12) равна нулю, что совпадает с энтропией неупорядоченной фазы (в теории ФП Ландау), отсюда следует, что скачок энтропии

при ФП равен нулю (и теплота ФП также равна нулю), это означает, что данный ФП ($r = 2$) не является ФП 1-го рода [18].

Теперь найдем теплоемкость упорядоченной фазы (УФ) [18]

$$C_{\text{УФ}} = T \frac{\partial S}{\partial T} \propto T_c \frac{\partial}{\partial T} \varepsilon^1 \propto T_c = 1 > 0, \quad (13)$$

которая оказывается конечной в точке ФП. Вспоминая, что теплоемкость неупорядоченной фазы в теории ФП Ландау равна нулю [1, 3], найдем, что в точке ФП теплоемкость испытывает конечный скачок. Это означает, что наблюдается типичный ФП 2-го по Эренфесту [1, 2] в согласии с тем, что род ФП $r = 2 - \alpha = 2$. Отсюда также следует, что для обычного ФП 2-го рода по Эренфесту критический индекс теплоемкости всегда равен нулю. Оказывается это верно, если критическая температура положительна [14].

Будем считать, что род ФП при $T_c > 0$ в предлагаемой классификации определяется по формулам (6) и (7) при любом значении критических индексов теплоемкости. Поскольку индекс теплоемкости измеряется экспериментально, вычисляется теоретически или методами компьютерного моделирования, то при таком подходе род ФП становится нормальной измеримой и вычисляемой физической величиной.

Так как индекс теплоемкости часто является дробным (в эксперименте – всегда, если учесть ошибку эксперимента), то мы приходим к понятию ФП дробного рода [14]. Например, для трехмерной традиционной модели Изинга [1]

$$\alpha = \alpha' = 0.125, \quad (14)$$

следовательно, род ФП

$$r = r' = 2 - \alpha = 1.875. \quad (15)$$

Это значит, что теплоемкость в точке ФП обращается в бесконечность по степенному закону. Для изотропных магнетиков индекс теплоемкости равен [9]

$$\alpha = -0.12, \quad (16)$$

в этом случае род ФП принимает значение

$$r = 2 - \alpha = 2.12 \quad (17)$$

и теплоемкость, связанная с ФП, стремится к нулю в точке ФП, при этом скачок теплоемкости при ФП равен нулю (теплоемкость является непрерывной функцией температуры), в отличие от обычных ФП 2-го рода по Эренфесту. Аналогичная ситуация с нулевым скачком теплоемкости будет и для сверхтекучего перехода в гелии-4 [10], хотя в [10] на это не обращено внимания.

Для квантовых ФП критическая температура равна нулю [5, 7, 8, 12] и классификация ФП Эренфеста не применима, если рассматривать ФП при понижении температуры (экспериментально не доступна низкотемпературная фаза). Более того, формула Бэкстера (6) в этом случае меняет свой вид [12]. Переменной ε в (5) пользоваться нельзя, вместо нее перейдем к

$$t = T - T_c = T. \quad (18)$$

Для этого случая формула Бэкстера имеет вид [12]

$$r = 1 - \alpha, \quad T_c = 0, \quad (19)$$

а сингулярная часть свободной энергии зависит от температуры следующим образом

$$F_s \propto t^{1-\alpha} = t^r, \quad t = T \rightarrow T_c = 0, \quad (20)$$

в этом случае предложенный подход работает, как и при положительной критической

температуре. Квантовый ФП происходит так: параметры (внешнее поле, давление, концентрации и др.) постоянны, а температура уменьшается. Таким образом, предложенная классификация фазовых переходов является более универсальной, чем классификация П. Эренфеста и связана с критическим индексом теплоемкости.

Общая формула для рода ФП при изменении температуры имеет вид [12]

$$r = 1 + S_I - \alpha, \quad T_C \geq 0, \quad (21)$$

где S-функция равна [18]

$$S_I = (1 + A_1 |t|^m) \left(\frac{T_C}{T} \right)^n, \quad T_C \geq 0, \quad (22)$$

где $t = T - T_C$, $T_C \geq 0$, A_1 – константа любого знака; m, n – положительные константы. Константы A_1, m, n, T_C можно найти при компьютерной обработке точных экспериментальных данных для определенного ФП или методами компьютерного моделирования (на основе экспериментальных данных), однако это пока не сделано. Можно показать, основываясь на данных в [10], что, например, для сверхтекучего перехода в обычном изотопе гелия-4 константа $A_1 < 0$. Формулы (21) и (22) в двух предельных случаях согласуются с гипотезой статического подобия [12]: 1) если $T_C > 0, T \rightarrow T_C$, тогда получим классическую формулу Бэкстера [2]; 2) если $T_C = 0, T > 0$, получим формулу (19).

В рамках гипотезы статического подобия индексы выше и ниже точки ФП одинаковы [1-3, 6, 9], следовательно

$$\alpha = \alpha', \quad r = r', \quad (23)$$

тогда нет необходимости вводить штрихованные индексы [3] и род ФП одинаков по обе стороны ФП. Также из гипотезы статического скейлинга следует [1-3, 6]

$$d\nu = 2 - \alpha = r = r', \quad (24)$$

так что род ФП можно найти еще одним способом: как произведение размерности пространства и критического индекса корреляционной длины $r = d\nu$. Это дает следующие результаты (индекс ν берем из [9]): для жидкостей $r = d\nu = 1.9$, для сверхтекучего ^4He род ФП $r = d\nu \approx 2.1$, для изотропных магнетиков род ФП $r = d\nu = 2.17$. Последний результат с учетом погрешности почти совпадает с (17). Новое выражение для рода ФП

$$r = d\nu, \quad (25)$$

как можно показать, верно, как для положительной критической температуры, так и для $T_C = 0$ (но только при выполнении гипотезы скейлинга).

Интересные результаты получаются в теории протекания (ТП) [15, 16], для которой рассчитан критический индекс корреляционной длины ν (и некоторые другие индексы). Индекс ν для двумерного пространства в ТП равен 1.34 [15], это дает следующее значение рода ФП

$$r = d\nu = 2\nu = 2.68, \quad (26)$$

для трехмерного пространства (с большей погрешностью)

$$r = d\nu = 3\nu = 2.6, \quad (27)$$

причем с учетом погрешности по некоторым данным [15] род ФП в ТП приближается к тройке, что подтверждается в теории ФП Ландау.

Действительно, роль параметра порядка в ТП играет вероятность протекания, которая является неотрицательной [15]. В этом случае в разложении свободной энергии по параметру порядка должно быть кубическое слагаемое [15], которое отсутствует в обычной теории ФП Ландау 2-го рода [3, 6, 9]. Разложение свободной энергии в простейшем случае принимает вид

$$F_s = F = AP^2 + BP^3, \quad (28)$$

где $P \geq 0$ – параметр порядка (вероятность протекания [15]), величина B в простейшем варианте является положительной константой. Роль температуры в ТП играет доля целых узлов x , точке ФП соответствует порог протекания x_c (подробности см. в [15, 16]). Коэффициент A зависит от x следующим образом

$$A = a(x - x_c), \quad a = \text{const} < 0, \quad (29)$$

что соответствует обычной теории ФП Ландау [3, 6, 9]. В состоянии устойчивого равновесия свободная энергия имеет наименьшее возможное значение [1-3], когда первая производная по независимой переменной равна нулю

$$F'_P = P(2A + 3BP) = 0, \quad (30)$$

уравнение равновесия (30) имеет два решения

$$P \equiv 0, \quad (31)$$

что соответствует неупорядоченной фазе и

$$P = -\frac{2A}{3B}, \quad (32)$$

соответствующее упорядоченной фазе. Учитывая (29) найдем для упорядоченной фазы

$$P \propto (x - x_c) = (x - x_c)^\beta, \quad (33)$$

откуда следует, что критический индекс параметра порядка β в ТП в рамках теории ФП Ландау равен [15]

$$\beta = 1. \quad (34)$$

Теперь найдем свободную энергию упорядоченной фазы (УФ), для чего (32) подставим в (28)

$$F_{y\phi} = \frac{4A^3}{27B^2}. \quad (35)$$

Учитывая (29), найдем

$$F_{y\phi} \propto (x - x_c)^3 = (x - x_c)^r = (x - x_c)^{2-\alpha'}. \quad (36)$$

Это означает, что в ТП в рамках теории ФП Ландау род ФП со стороны упорядоченной равен 3, а критический индекс теплоемкости α' равен минус единице. Эти результаты развивают выводы [15].

Иногда (23) не верно. Простейшие примеры дают обобщения теории ФП Ландау [3]. Для неупорядоченной фазы в этой теории индекс теплоемкости α всегда равен нулю (теплоемкость неупорядоченной фазы в модели Ландау не зависит от температуры и равна нулю) [3]. Для упорядоченной фазы, как показано в предыдущем абзаце, индекс теплоемкости (в ТП) равен $\alpha' = -1$, то есть

$$\alpha' = -1 \neq 0 = \alpha, \quad (37)$$

это означает, что со стороны неупорядоченной фазы наблюдается ФП 2-го рода, а со

стороны упорядоченной фазы наблюдается ФП 3-го рода.

Рассмотрим теперь критическую точку ФП 2-го рода в рамках теории ФП Ландау [3]. Эта критическая точка на фазовой диаграмме разделяет ФП 1-го и 2-го рода. Для упорядоченной (несимметричной) фазы теплоемкость при приближении к критической точке стремится к бесконечности с критическим индексом [3]

$$\alpha' = 0.5 , \quad (38)$$

для неупорядоченной (симметричной) фазы $\alpha = 0$, следовательно

$$\alpha' = 0.5 \neq 0 = \alpha . \quad (39)$$

(38) означает, что род ФП по формуле Бэкстера равен 1,5, что логично, так как критическая точка разделяет ФП 1-го и 2-го рода. Отсюда вытекает, что ФП 1,5 рода относится к непрерывным ФП.

Предложенный подход применим и к системам конечного размера (кластерам). Компьютерное моделирование в рамках одномерной задачи связей ТП дает следующее [16]. Для цепочек длиной 40 узлов критический индекс теплоемкости ниже порога перколяции x_c слабо зависит от радиуса протекания и примерно равен 1.6, что означает род ФП 0.4. Для тех же цепочек выше порога x_c индекс теплоемкости сильно зависит от радиуса протекания и равен 2.35 (радиус протекания равен 5). Такой индекс приводит к роду ФП $r' = -0.35$, то есть род ФП для кластеров может быть отрицательным, а также может приближаться к нулю. Это связано с необычными значениями индекса теплоемкости при компьютерном моделировании конечных систем в ТП [16]. Для систем бесконечного размера в состоянии равновесия индекс теплоемкости ограничен неравенством $\alpha(\alpha') \leq 1$ [2, 3], однако для конечных кластеров это неравенство может нарушаться. Необходимо отметить, что формулы (4), (8), (8') и (19)-(22) для систем конечного размера не могут быть справедливы во всей области изменения температуры: они верны только в определенном интервале при приближении к критической точке. Дело в том, что критическая точка для систем конечного размера размывается.

Проведем рассуждения, аналогичные выводу формулы Бэкстера [2] для переходов при изменении внешнего поля. При температуре, равной критической температуре, и внешнем поле, стремящемся к нулю, верна формула для намагниченности (параметр порядка для ферромагнетика) [1-3]

$$M = -\frac{\partial G}{\partial H} \propto H^{\frac{1}{\delta}}, \quad H \rightarrow 0 , \quad (40)$$

где δ – положительный критический индекс (определяет уравнение критической изотермы). Из (40) следует, что энергия Гиббса имеет вид

$$G \propto H^{\frac{1}{\delta}+1} = H^r, \quad H \rightarrow 0, T = T_c , \quad (41)$$

где род ФП в рассматриваемой модели равен

$$r = 1 + \frac{1}{\delta}, \quad H \rightarrow 0, T = T_c . \quad (42)$$

Формулы (40)-(42) носят общий характер. Отсюда следует, что при приближении к точке ФП при критической температуре намагниченность упорядоченной фазы стремится к нулю, что характерно для непрерывных ФП (типа 2-го рода).

Восприимчивость равна [1-3, 9]

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} \propto H^{\frac{1}{\delta}-1}, H \rightarrow 0, T = T_c. \quad (43)$$

Поскольку $\delta \geq 3$ [1-3], то показатель степени в (43) отрицателен, это значит, что при приближении к точке ФП восприимчивость стремится к бесконечности, это характерно для непрерывных ФП. Индекс δ может быть вычислен методами компьютерного моделирования или оценен экспериментально [1-3, 9]. В теории ФП 2-го рода Ландау $\delta = 3$ [1, 3], следовательно, при изменении поля по формуле (42) род ФП равен 4/3. Отсюда следует, что в классической теории Ландау при изменении температуры происходит ФП 2-го рода (в нулевом поле), а при изменении поля (при критической температуре) происходит ФП (4/3) рода [18].

Оказывается, для систем бесконечного размера при изменении температуры (в нулевом поле) род ФП заключен в интервале от 1 до $+\infty$. Род ФП равен ∞ для одномерной модели Изинга [14]. Как показано выше, для конечных кластеров род ФП может быть отрицательным. При критической температуре при изменении поля род ФП заключен в интервале от 1 до 4/3 (см. (42)), этот интервал существенно уже.

3. Заключение

Предложена классификация равновесных ФП, обобщающая подход Бэкстера. Классификация основана на формулах Р. Бэкстера для рода ФП $r = 2 - \alpha$, $r' = 2 - \alpha'$, (α, α' – критические индексы теплоемкости для неупорядоченной и упорядоченной фаз). Эти формулы верны только при положительной критической температуре. Если $T_c = 0$, что выполняется для квантовых ФП, то формула имеет вид $r = 1 - \alpha$ (в этом случае индекс теплоемкости неположителен [14]). Предложены также общие формулы для рода ФП при изменении температуры, справедливые как при $T_c > 0$, так и при $T_c = 0$.

Методом компьютерного моделирования показано, что для кластеров из десятков узлов в рамках ТП род ФП может быть отрицательным или стремиться к нулю. Если род ФП положителен, то сингулярная часть термодинамического потенциала (4), (19) при приближении к точке ФП обращается в ноль, если же род ФП отрицателен, то сингулярная часть потенциала при приближении к критической области аномально возрастает также, как и теплоемкость.

Предложена новая формула для рода равновесного ФП при изменении внешнего поля при температуре ФП, содержащая критический индекс δ . Впервые определен диапазон изменения рода ФП при изменении температуры и поля.

Новая классификация равновесных ФП является более общей, чем известная классификация П. Эренфеста [1-3].

Список литературы

1. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления / Г.Стенли. — М. Мир, 1973. — 425 с.
2. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Р.Бэкстер. — М.: Мир, 1985. — 488 с.
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. 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.
 5. Sachdev S. Quantum phase transitions / S.Sachdev. — New Haven, USA, Yale University, 1999. — 488 p.
 6. Абрикосов А.А. Основы теории металлов / А.А.Абрикосов. — М., ФИЗМАТЛИТ, 2009. — 598 с.
 7. Cano A. On Low-Temperature Structural Phase Transitions / A.Cano, A.P.Levanyuk // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. — 2006. — V. 19. — № 3–5. P. 417–426.
 8. Udodov V. Violating of the Essam-Fisher and Rushbrooke Relationships at Low Temperatures / V.Udodov // World Journal of Condensed Matter Physics. — 2015. — V.5, №2. — P.55-59. DOI: 10.4236 / wjcmp.2015.52008
 9. Паташинский А.З. Флуктуационная теория фазовых переходов. / А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. — М., Наука, 1982. — 382 с.
 10. Погорелов А.А. О критических индексах для λ -перехода в жидком гелии / А.А.Погорелов, И.М.Суслов // Письма в ЖЭТФ. — 2007. — **86**, Вып.1. С. 41 – 47. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0021364007130097>.
 11. Халатников И.М. Теория сверхтекучести / И.М.Халатников. — М., Наука, 1971. — 320 с.
 12. Удодов В.Н. Новые следствия гипотезы статического подобия при низких температурах / В.Н.Удодов // Физика твердого тела. — 2015. — Т. 57. — Вып.10. С. 2018-2022. DOI 10.1134/S1063783415100340.
 13. Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 9. Статистическая физика. Ч. 2 / Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. — М., Наука, 1978. — 448 с.
 14. Удодов В.Н. Одномерная модель Изинга и скейлинг. Курс лекций / В.Н.Удодов. — Saarbrücken, Германия: Palmarium Academic Publishing, 2017. — 116 с.
 15. Шкловский Б.И. Электронные свойства легированных полупроводников / Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос. — М.: Наука, 1979. — 416 с.
 16. Буреева М.А. Моделирование задачи связей одномерной теории перколяции на неориентированном графе / М.А.Буреева, В.Н.Удодов // Матем. моделирование. — 2012. — Т. 24, №11, С. 72–82.
 17. Муртазаев А.К. Критические свойства фрустрированных спиновых систем на слоистой треугольной решетке / А.К.Муртазаев // УФН. — 2008. — Т. 178. — №9. — С. 1001-1006.
 18. Удодов В.Н. Новая модельная классификация равновесных фазовых переходов / В.Н.Удодов // Южно-сибирский научный вестник. — 2019. — №1(25). — С. 131-136.

МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФЕРРОМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА В МИКРО И НАНОТРУБКАХ⁶

В.А. Фельк¹, С. В. Комогорцев²

¹ Сибирский государственный университет науки и технологий
им. М.Ф. Решетнева, vlaf@sibsau.ru

² Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, komogor@iph.krasn.ru

Низкоразмерные микро и наноструктуры такие как кольца, доты, трубки и проволоки являются объектами интенсивного исследования в связи с их потенциальными приложениями. Одномерные (1D) проволоки и трубки представляют собой важные классы наноматериалов, которые содержат топологические дефекты намагниченности, реализующие их основное (равновесное) состояние [1]. В этой связи возникает проблема расчета элементарных возбуждений на фоне основного состояния с топологическими дефектами. В рамках микромагнитной феноменологии, динамика магнитной подсистемы таких объектов описывается нелинейным и нелокальным дифференциальным уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта (LLG). Одной из проблем, затрудняющих моделирование динамики в ферромагнетиках является корректный учет дальнедействующего диполь-дипольного взаимодействия. Доказано, что в образцах эллипсоидальной формы этот учет можно выполнить аналитически простым введением, так называемого размагничивающего поля. Для образцов в форме цилиндров и кубоидов, с некоторыми поправками на неоднородность, такое поле также может быть рассчитано. Ферромагнитный образец в форме трубки либо кольца относится к иному топологическому классу. В этом случае аналитический учет размагничивающего поля оказывается невозможным. В последнее время разработаны методы позволяющие получать магнитные микро и нанотрубки. Появляются первые данные по динамике намагниченности таких трубок [1]. В частности оказывается, что спектр поглощения СВЧ этих элементов носит непростой многомодовый характер. Оказалось, что в связи с упомянутыми трудностями точные аналитические решения для ферромагнитного резонанса здесь отсутствуют.

В связи с нетривиальностью такой задачи, только численный эксперимент позволяет сделать предсказания, проверяемые в экспериментах с реальными материалами. Существуют различные подходы к моделированию ФМР [2]. В данной работе реализован подход, направленный на получение интегрального резонансного отклика системы.

В цилиндрической геометрии реализуется суперпозиция ряда гармоник. Кроме того, такие системы обладают естественно заданными периодически граничными условиями вдоль одной координаты. В данной работе представлены результаты микромагнитного моделирования ферромагнитного резонанса (ФМР) для бесконечных, продольно и поперечно намагниченных, нанотрубок. Моделирование было выполнено с помощью свободно распространяемого программного кода OOMMF на конечных разностях [3]. Уравнение LLG интегрировалось на решетке с размером ячейки 10 нм. Гамильтониан системы включал в себя энергию однородного обменного взаимодействия, магнито-дипольную энергию и энергию взаимодействий с

⁶ Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта №18-42-240006 «Наноматериалы с магнитными свойствами, определяемыми топологическими особенностями наноструктуры».

постоянным внешним полем (энергия Зеемана). Длина трубки составляла 30 нм с периодическими граничными условиями. Выбор такого значения обусловлен выходом системы на стационарный колебательный режим за разумное время.

Зависимость резонансного поля H_r от β (отношение внешнего диаметра трубки к внутреннему) проявляет ряд особенностей. Во первых, H_r линейно возрастает с увеличением β , что является нетривиальным фактом. Во-вторых, интерполяция к $\beta=1$ дает величину H_r близкую к его значению для бесконечной пленки, рассчитанной по формуле Киттеля (Рис.1А). Таким образом, в этом пределе трубку можно рассматривать как тонкопленочный элемент. В третьих, в пределе $\beta=0$ (проволока) резонансный пик расщепляется на две моды, симметричные относительно резонансного поля, рассчитанного по формуле Киттеля для проволоки. В области $\beta=0.3$ происходит переход между этими двумя режимами (Рис.3Б). Последнее связано с тем, что при таких β динамика начинает «чувствовать» включение дополнительного измерения.

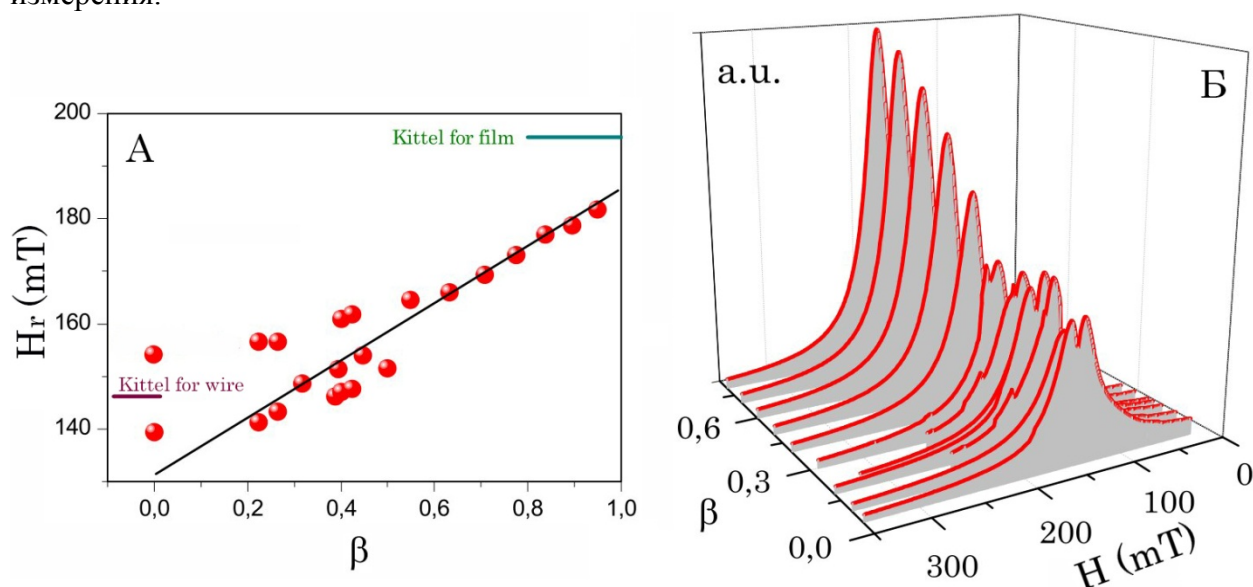


Рис. 1. А). Резонансное поле в зависимости от β для продольно намагниченной нанотрубки. Б). ФМР продольно намагниченной нанотрубки для различных β .

Для поперечно намагниченной трубки в спектре ФМР можно выделить несколько ветвей. Характер динамики в каждой ветви сильно зависит от β . В общем случае реализуется суперпозиция радиальных, азимутальных и бризерных (пространственно локализованных) мод. Критерием достоверности полученных результатов, является согласованность численных данных с аналитической формулой Киттеля для простейших геометрий.

Список литературы

1. Wang Z.K. Spin Waves in Nickel Nanorings of Large Aspect Ratio / Z.K. Wang, H.S. Lim, Y. Liu // Physical Review Letters. — 2005. — Vol.94. — p.137208.
2. Baker A. Proposal of a micromagnetic standard problem for ferromagnetic resonance simulations / A. Baker, M. Beg et al. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2017. — Vol.421. — p.428.
3. Donahue M.J. 1999 OOMMF User's Guide, Version 1.0 / M.J. Donahue, D.G. Porter. — Interagency Report, NISTIR, 2004. — 6376 p.

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО ОБЛАСТИ ЗНАНИЯ "ХИМИЯ И НАУКИ О МАТЕРИАЛАХ", ПОДДЕРЖАННЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Р.А. Чиженкова

Институт биофизика клетки РАН, *chizhenkova@mail.ru*

Введение

В середине XX-ого века сформировалось новое понимание роли фундаментальной науки в развитии отдельных государств и сохранении биосферы в целом [3, 6, 9, 12, 16, 18]. Успехи прикладных наук дают относительно быстрые эффекты в благосостоянии общества. Однако надо заметить, что сами прикладные науки существуют на основе фундаментальных разработок.

Результаты фундаментальных исследований, приводящие к познанию мира, в принципе не могут быть непосредственно использованы в практической деятельности и, следовательно, обладать "самоокупаемостью". В связи с этим в 50-х годах прошлого века возникла идея создания специальных фондов для поддержки научных коллективов и отдельных ученых [8, 10], что связано с именем американского физика В. Буша.

Российский Фонд Фундаментальных Исследований (РФФИ) был создан в 1992 г. [1, 2]. Несомненно, лидирующим видом конкурса РФФИ является конкурс инициативный проектов для финансовой поддержки проведения исследований [13, 16, 17]. Помимо осуществления самих исследований существует также необходимость публикации их результатов. Поэтому дополнительно был создан конкурс издательских проектов. Конкурс издательских проектов, как и инициативных, касался 8 областей знания [14, 16, 18].

Суммарные материалы относительно конкурсов издательских научных проектов по всем областям знания уже были опубликованы в наших работах [14 - 16]. Настоящие исследования посвящены детальному библиометрическому анализу издательских проектов по области знания "Химия и науки о материалах", поддержанных РФФИ в течение 20-летнего периода.

Материалы и методы

Представленные здесь сведения основываются на данных, опубликованных в Информационных бюллетенях (ИБ) РФФИ, выходящих раз в год и освещающих итоги прошедшего конкурса, что позволяет рассмотреть количественные данные его результатов по разным областям знания.

Для каждого года выделялись количественные сведения относительно конкурсов издательских проектов по всем областям знания, в том числе и по области "Химия и науки о материалах", в виде чисел выделенных грантов и поданных заявок. На основе этого вычислялась процентная вероятность поддержки проектов. Проводили объединение результатов по анализируемым рубрикам за весь временной период и вычисляли статистическую значимость различия величин, составляющих совокупности. Для статистического анализа использовали сравнение двух выборочных долей вариантов. Кроме того, применяли корреляционный анализ.

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. Поскольку было необходимо подробное рассмотрение отдельных научных направлений издательских проектов, пришлось временной период материала ограничить 1995-2012 .

Число поддержанных РФФИ издательских проектов по области знания "Химия и науки о материалах" за 18 лет составляло 305, что представляло 6.75% от общего числа по всем издательским проектам - 4521. Динамика чисел грантов по области знания "Химия и науки о материалах" за рассматриваемый период отражена в табл. 1.

Таблица 1

Динамика числа поддержанных издательских научных проектов по области знания "Химия и науки о материалах" в течение 18-летнего периода

Годы	Издательские проекты			
	Химия	% от суммы	Все области знания	% от областей знания
1993				
1994				
1995	20	6,56	304	6,58
1996	18	8,90	273	6,59
1997	15	4,92	246	6,10
1998	19	6,23	323	5,88
1999	14	4,59	179	7,82
2000	11	3,61	224	4,91
2001	13	4,26	240	5,42
2002	23	7,54	265	8,68
2003	16	5,25	232	6,90
2004	12	3,93	214	5,61
2005	14	4,59	232	6,03
2006	17	5,57	237	7,17
2007	18	5,90	255	7,06
2008	24	7,87	296	8,11
2009	29	9,51	393	7,38
2010	22	7,21	255	8,63
2011	13	4,26	199	6,53
2012	7	2,30	154	4,54
Сумма	305	100	4521	6,75
Среднее	16,94	5,56	251,17	6,75

Выделенных грантов приходилось на один год от 7 до 29 и в среднем равнялось 16.94. Из рис. 1 следует, что имели место весьма резкие колебания чисел поддержанных проектов. Пиковые их значения отмечались в 2002, 2008 - 2010 гг. Наименьшие числа были в 2000 и 2012 гг

Числа полученных заявок по издательским проектам в ИБ указаны только за годы 2002-2012. За эти годы было получено 305 заявок относительно проектов по области знания "Химия и науки о материалах", что составляет 5.29% от их общего числа по всем областям знания - 5768. Динамика чисел поданных заявок по области знания "Химия и науки о материалах" за исследуемый период представлена в табл. 2.

Таблица 2

Динамика чисел поданных заявок по издательских проектам в области знания "Химия и науки о материалах" в течение рассматриваемого периода.

Годы	Издательские проекты			
	Химия	% от суммы	Все области знания	% от областей знания
1993				
1994				
1995				
1996				
1997				
1998				
1999				
2000				
2001				
2002	27	8,85	484	5,58
2003	30	9,84	524	5,73
2004	27	8,85	435	6,21
2005	26	8,52	463	5,62
2006	24	7,87	491	4,89
2007	22	7,21	456	4,82
2008	36	11,80	526	6,84
2009	38	12,46	711	5,34
2010	32	10,49	681	4,70
2011	29	9,51	594	4,89
2012	14	4,59	403	3,47
Сумма	305	100	5768	5,29
Среднее	27,73	9,09	524,36	5,29

Количество поданных заявок за один год колебалось от 14 до 38 при среднем значении 27.73. Табл. 2 показывает, что в течение анализируемого периода отмечались выраженные колебания чисел подаваемых заявок. Как наиболее высокие, так и наиболее низкие их величины были присущи последним годам анализируемого периода. Максимум их наблюдался в 2008-2009 гг., минимум - в 2012 г.

Описанные здесь количественные характеристики выделенных грантов и представленных заявок позволили определить вероятность поддержки посылаемых материалов. В течение 11 лет, по которым в ИБ приведены числа заявок, из 350 заявок по области знания "Химия и науки о материалах" было поддержано 195 проектов, что составило 63.93%. Динамика процентных чисел проектов по годам продемонстрирована на табл. 3.

Таблица 3

Динамика процентных чисел поддержанных издательских научных по области знания "Химия и науки о материалах" в течение рассматриваемого периода.

Годы	Издательские проекты. Химия.		
	Гранты	Заявки	% под- держанных
1993			
1994			
1995			
1996			
1997			
1998			
1999			
2000			
2001			
2002	23	27	85,19
2003	16	30	53,33
2004	12	27	44,44
2005	14	26	53,85
2006	17	24	70,83
2007	18	22	81,82
2008	24	36	66,67
2009	29	38	76,32
2010	22	32	68,75
2011	12	29	44,83
2012	7	14	50
Сумма	195	305	63,93
Среднее	17,73	27,73	63,93

Годовые значения процентных чисел поддержанных проектов по области знания "Химия и науки о материалах" за данный период составляли от 44.44 до 85.19 при средней величине 63.93. Как видно из рис. 3, пиковое значения процентное число поддержанных проектов наблюдалось в 2002 г. Наименьшие процентные числа поддержанных проектов отмечались в 2004 и 2011 гг.

Таким образом, за 20 лет своей деятельности РФФИ оказал значительную поддержку публикации материалов по области знания "Химия и науки о материалах", которая в настоящее время представляет одну из наиболее значимых областей естественно-научных дисциплин [5, 7]. Данная область знания имеет тесную связь с иными областями, и охватывает широкий спектр направлений деятельности (нефтехимия, радиохимия, фармацевтическая химия и т.д.). В связи с этим, исследования в области знания "Химия и науки о материалах" крайне необходимы в XXI веке.

Процентное число поддержанных проектов по области знания "Химия и науки о материалах" равнялось 63.93, что превышало соответствующее процентное число в

суммарных данных по всем областям знания издательских проектов - 47.36 [14, 16] при $p < 0.01$ ($U > 5.72$). Последнее подчеркивает высокий уровень значения данной области знания в XXI веке.

Имели место выраженные колебания по годам величин исследуемых показателей. Отмечалось некоторое сходство их динамик. При этом колебания чисел грантов были в 4.14 раза, сделанных заявок - 2.71 раз и процентов поддержанных проектов - в 1.97 раз.

Корреляционный анализ позволил выявить факт наличия некоторого параллелизма величин чисел выделенных грантов и чисел подаваемых заявок и ($r = 0.79$; $p < 0.01$), что свидетельствует о значительной роли общего состояния внутренней возможности РФФИ в поддержке научных проектов. Положительная корреляционная взаимосвязь была установлена у чисел выделенных грантов, чисел подаваемых заявок, а также процентных чисел поддержанных проектов по области знания "Химия и науки о материалах" с соответствующими величинами суммарных данных по всем областям знания в конкурсе издательских проектов ($r = 0.87$; $p < 0.01$; $r = 0.77$; $p < 0.01$; $r = 0.63$; $p < 0.05$).

Следует отметить некоторые отличия результатов конкурса издательских научных проектов по области знания "Химия и науки о материалах" от соответствующего конкурса инициативных проектов [15]. Числа выделенных грантов по данной области знания среди издательских проектов были значительно ниже, чем среди инициативных проектов. Среднее число поддержанных издательских проектов в год составляло 16.94, а инициативных 407.25, их различие в 24.04 раза. Существенно ниже у издательских проектов отмечались и количественные показатели заявок. Среднее число заявок по издательским проектам в год равнялось 27.73, а инициативных 1360.25, их различие в 29.66 раз. Тем не менее, процентное число поддержанных издательских проектов данной области знания (63.93) было значительно выше такового у инициативных проектов (29.66) в 3.16 раз.

Заключение

Организация РФФИ для поддержки работы научных коллективов и отдельных ученых явилась одним из первых нововведений молодой РФ по опыту других развитых государств. За два десятилетия деятельности РФФИ была оказана существенная поддержка публикации результатов фундаментальных исследований, в том числе и по области знания "Химия и науки о материалах". При этом процентное число поддержанных издательских проектов по указанной области знания значительно превышало усредненные показатели по всем областям знания. Для повышения возможности поддержки научных проектов весьма желательно увеличение финансового наполнения Фонда. Предполагается, что российское правительство в ближайшее время может увеличить ресурсное наполнение Фонда. Об этом было сказано во время выступления В.В. Путиным на Общем собрании Российской академии наук в 2012 г., где он дал высокую оценку работе Фонда [11].

Список литературы

1. Алфимов М.В. Российский фонд фундаментальных исследований: десять лет служения российской науке // Вестник РФФИ. - 2002. - № 1(27). - С. 5-39.
2. Алфимов М.В., Минин В.А., Либкинд А.Н. Страна наука - РФФИ // Вестник РФФИ. - 2000. - № 2(20). - С. 5-29.

3. Арутюнов В.С. Наука как один из важнейших институтов современного государства //В: Наука России. От настоящего к будущему / Ред В.С. Арутюнов, Г.В. Лисичкин, Г.Г. Малинецкий. - М.: Книжный дом ""ЛИБРОКОМ", 2009. - С. 9-29.
4. Вестник РФФИ 20 лет: Специальный выпуск. - 2012.
5. Девятова С.В., Купцов В.И. Феномен научной революции XVII века // Вопросы философии. - 2013. - № 12. - С. 59-67.
6. Ефремов Ю.Н. Зачем нужна наука миру и России // Вестник РФФИ. - 2000. - № 1(19). - С. 40-43.
7. Золотов Ю.А. О химическом анализе и о том, что вокруг него. - М.: Наука, 2004. - 477 с.
8. Коннов В.И. Самоуправление на "передовой": становление национального научного фонда США // Вестник РФФИ. - 2007. - №4(54). - С. 10-15.
9. Лебедев С.А. Праксиология науки // Вопросы философии. - 2012. - №4. - С. 52-63.
10. 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.
11. 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.
12. Чиженкова Р.А. Динамика нейрофизиологических исследований действия неионизирующей радиации во второй половине XX-ого века. - М.: Издат. дом Акад. Естествознания, 2012. - 88 с.
13. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ научных проектов, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет: виды конкурсов // Успехи современного естествознания. - 2014. - №5(часть 2) - С. 145-150.
14. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ издательских научных проектов по разным областям знания, поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. - 2014. - №8. - С. 150-155.
15. Чиженкова Р.А. Библиометрический анализ инициативных научных проектов по области знания "Химия и науки о материалах", поддержанных Российским Фондом Фундаментальных Исследований за 20 лет // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. - 2015. - №9(часть 4) - С. 698-702.
16. Чиженкова Р.А. Российский фонд фундаментальных исследований. Библиометрический анализ поддержки научных проектов. - Germany: Palmarium Academic Publishing, 2015. - 88 с.
17. Чиженкова Р.А. Российский фонд фундаментальных исследований. Библиометрический анализ поддержки инициативных научных проектов. - М.: Изд. Дом Акад. Естествознания, 2016. - 82 с.
18. Чиженкова Р.А. Российский фонд фундаментальных исследований. Библиометрический анализ поддержки издательских научных проектов. - Тамбов .ООО "Консалтинговая компания Юком", 2017. - 86 с.

ВОЗДЕЙСТВИЕ ИСТОЧНИКОВ ИМПУЛЬСА И ЭНЕРГИИ НА ТЕЧЕНИЕ ЖИДКОСТИ С РЕЛАКСИРУЮЩИМИ ВЯЗКИМИ НАПРЯЖЕНИЯМИ

О. Н. Шабловский, Д. Г. Кроль

Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого», shablovsky-on@yandex.ru

Введение. Изучение воздействия массовых сил и источников энергии на течение несжимаемой жидкости – актуальная задача гидродинамики. Прикладные аспекты этой проблемы связаны с природными и технологическими процессами, в которых пространственно-периодическая неоднородность гидродинамических и тепловых полей приводит к интенсификации переноса импульса и энергии. Обсудим этот вопрос. Весьма распространенный является ситуация, когда в потоке жидкости наблюдается взаимодействие двух конкурирующих друг с другом массовых сил, а результатом конкуренции является формирование периодических структур. В данной работе мы рассматриваем эту задачу с учетом следующих физических явлений: нелинейные свойства силы сопротивления; неизотермичность течения; вязкоупругость жидкости. Плоское двумерное стационарное течение несжимаемой сплошной среды определяется уравнениями [1]:

$$\rho v_k \frac{\partial v_i}{\partial x_k} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} + \rho F_i, \quad \frac{\partial v_k}{\partial x_k} = 0, \quad (1)$$

$$\rho c_p v_k \frac{\partial T}{\partial x_k} = -\frac{\partial q_k}{\partial x_k} + \Phi + q_v, \quad q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (2)$$

$$\Phi = \tau_{11} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} + \tau_{22} \frac{\partial v_2}{\partial x_2} + \tau_{12} \left(\frac{\partial v_2}{\partial x_1} + \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \right), \quad v = \mu / \rho \quad i, k = 1, 2; \quad \rho, c_p, \lambda, \mu = \text{const}.$$

Реологическое уравнение состояния вязкоупругой жидкости Максвелла [2] возьмем в следующей форме записи:

$$\tau_{ij} + \gamma \left[v_k \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} + m(\tau_{ik} \omega_{kj} - \omega_{ik} \tau_{kj}) \right] = 2\mu e_{ij}, \quad 2e_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}, \quad 2\omega_{ij} = \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad (3).$$

Здесь $x_1 = x$, $x_2 = y$ – декартовы прямоугольные координаты; $\mathbf{v}(v_1, v_2)$ – вектор скорости; ρ – плотность; p – давление; $\mathbf{F}(F_1, F_2)$ – вектор массовой силы; T – температура; $\mathbf{q}(q_1, q_2)$ – вектор удельного теплового потока; c_p – удельная теплоемкость; λ – коэффициент теплопроводности; q_v – объемная мощность внутренних источников энергии; τ_{ij} – компоненты девиатора тензора напряжений; e_{ij} – компоненты тензора скоростей деформации; μ – коэффициент динамической вязкости; γ – время релаксации вязких напряжений; Φ – диссипативная функция. Дважды повторяющийся индекс k означает суммирование. Дифференциальный оператор в (3) при $m=1$ есть конвективная производная Яуманна, при $m=0$ – обычная субстанциональная производная. При $\gamma=0$ формула (3) описывает свойства вязкой ньютоновской жидкости.

Объемный источник энергии $q_v(\mathbf{v}^2, T)$ моделирует воздействие внутренних источников тепла и теплообмен жидкости с внешней средой. Для представленной здесь задачи вид функции источника детерминирован структурой применяемого аналитического решения.

Для диссипативной функции Φ принимаем оценку $\Phi \ll |q_v|$, т.е. рассматриваем процессы, для которых можно пренебречь выделением тепла за счет вязкой диссипации энергии.

Сила трения Рэлея $\mathbf{F} = \mathbf{F}^R = -\zeta \mathbf{v}$ дает возможность моделировать широкий круг термогидродинамических явлений, представляющих практический интерес: периодические течения в тонких слоях жидкости [3], вихревые структуры в задачах промышленной экологии и прикладной геофизики [4]. Кроме того, такой подход позволяет учитывать наличие кластерных образований в полупроводниковых расплавах [5]. В работах [4, 5] применялся 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. Далее полагаем, что коэффициент сопротивления зависит от температуры T , монотонно растет при увеличении $|\mathbf{v}|$ и является четной функцией скорости: $\zeta = \zeta(v^2, T)$, $\partial \zeta / \partial (v^2) > 0$. Здесь мы рассматриваем случай, когда в потоке жидкости присутствует источник импульса, конкурирующий с внешней силой трения Рэлея. Данная работа продолжает исследования [6-7] и имеет следующие цели: 1) проанализировать закономерности формирования периодических полей скорости и температуры в условиях конкурентного взаимодействия источника и стока импульса; 2) сравнить друг с другом свойства течений вязкоупругой и ньютоновской жидкостей.

Периодическое течение. Будем изучать течение вида

$$v_1 \equiv u = u(y), \quad v_2 \equiv 0, \quad p = p(y), \quad T = T(y). \quad (4)$$

Вихрь скорости $\boldsymbol{\omega} = (1/2) \text{rot } \mathbf{v}$ имеет одну нетривиальную составляющую $\omega_z \equiv \omega = (-1/2)(du/dy)$, направленную перпендикулярно плоскости (x, y) . Обозначим $\tau = (c_1/u_1)(T - T_0)$, $T_0 \equiv \text{const}$. Здесь T_0 – отсчетное значение температуры; c_1 – произвольная положительная постоянная, имеющая размерность удельной теплоемкости, Дж/(кг.град); y_1 , u_1 – положительные константы, имеющие размерности длины и скорости соответственно; линейный масштаб релаксации равен $L_1 = \gamma u_1$. Безразмерные величины будем отмечать чертой сверху. Для коэффициента сопротивления и для объемного источника энергии возьмем следующие физически содержательные зависимости:

$$\bar{\zeta} \equiv \zeta y_1^2 / \nu = D_1 D_2, \quad \bar{q}_v \equiv q_v c_1 y_1^2 / (\lambda u_1^2) = 2\bar{\tau}(\bar{\tau}^2 - 3\bar{u}^2 - 1) \quad (5)$$

$$D_1 = (1 - 4\Gamma)/(1 + 4\Gamma)^2, \quad \Gamma = (\bar{\gamma} m \bar{\omega})^2, \quad D_2 = 2(1 - 3\bar{\tau}^2 + \bar{u}^2),$$

$$\bar{\gamma} = \gamma u_1 / y_1, \quad \bar{\omega} = \omega y_1 / u_1, \quad d\bar{u} / d\bar{y} = -2\bar{\omega}.$$

Функция $\Gamma(\bar{y})$ характеризует неравновесные свойства вихревого поля. В классе движений (4) - (5) уравнения (1)-(3) имеют, согласно [7], точное решение

$$\bar{u} \equiv u / u_1 = 2\varepsilon[\sin(2\bar{y})]/\delta, \quad \bar{\tau} \equiv \tau / u_1 = (1 - \varepsilon^2)/\delta, \quad (6)$$

$$\delta = 1 + \varepsilon^2 + 2\varepsilon \cos(2\bar{y}), \quad \bar{y} = y / y_1, \quad y_1 > 0, \quad u_1 > 0.$$

$$d\bar{u} / d\bar{y} = -2\bar{\omega} = 2\bar{\tau}(\bar{\tau}_1 - \bar{\tau}), \quad \bar{v} = v / (u_1 y_1), \quad \bar{p} = -\bar{\gamma} \bar{\tau}_{12} d\bar{u} / d\bar{y}, \quad \bar{\tau}_{12} = \bar{v}(d\bar{u} / d\bar{y}) \left[1 + (\bar{\gamma} d\bar{u} / d\bar{y})^2 \right]^{-1},$$

$$\bar{q}_v = 4\bar{\tau}(-3\bar{\tau}_1 \bar{\tau} + 2\bar{\tau}^2 + 1), \quad \bar{\tau}_1 = (1 + \varepsilon^2)/(1 - \varepsilon^2).$$

Тепловой поток подсчитывается по формуле: $q = -\lambda dT / dy$, $\bar{q} \equiv q c_1 y_1 / (\lambda u_1^2) = -2\bar{u} \bar{\tau}$.

Температурное поле характеризуется следующими индикаторными функциями:

$$\Phi_1 = \bar{y} \frac{d\bar{\tau}}{dy}, \quad \Phi_2 = \frac{\bar{y}}{\bar{\tau}} \frac{d\bar{\tau}}{dy}.$$

Ясно, что $\delta > 0$ при $\varepsilon^2 \neq 1$; ε – параметр решения. Если $\varepsilon^2 < 1$, то $\tau > 0$, течение происходит в горячей области, $T > T_0$. Если $\varepsilon^2 > 1$, то $\tau < 0$, имеем холодную область, $0 < T < T_0$. Решение (6) определяет течение вязкоупругой жидкости с объемным источником энергии (5) и с двумя конкурирующими источниками импульса:

$$\bar{F}_{11} = -\bar{u}\bar{\zeta}_r, \quad \bar{\zeta}_r = 2D_1(1 + \bar{u}^2), \quad \bar{F}_{12} = 6D_1\bar{\tau}^2\bar{u}. \quad (7)$$

Здесь $\bar{\zeta}_r$ – коэффициент сопротивления, $\bar{F}_{11}$ – внешняя сила трения (сток импульса), $\bar{F}_{12}$ – источник импульса, конкурирующий с силой сопротивления. Оба эти источника мультипликативным образом зависят от $D_1 = D_1(\Gamma)$; результирующая массовая сила $\bar{F}_1 = \bar{F}_{11} + \bar{F}_{12}$ действует в продольном (вдоль оси OX) направлении. Условие $\zeta_r \geq 0$ выполнено при $\Gamma(\bar{y}) \leq 1/4$, а это приводит к неравенству $\bar{\gamma}^2 m^2 \bar{\omega}_{\max}^2 \leq 1/4$, которое справедливо при подходящем выборе γ . В случае (7) наблюдается периодическое течение при $y \in (-\infty, \infty)$, $\varepsilon^2 \neq 1$.

Результаты расчетов. На рисунке 1 представлены зависимости суммарного источника импульсов и источника энергии от безразмерной координаты $\bar{y}/\pi$. Графики зависимостей индикаторных функций Φ_1 и Φ_2 демонстрируют отличие температурного профиля от степенного ($\Phi_1 = \text{const}$) и логарифмического ($\Phi_2 = \text{const}$) вариантов.

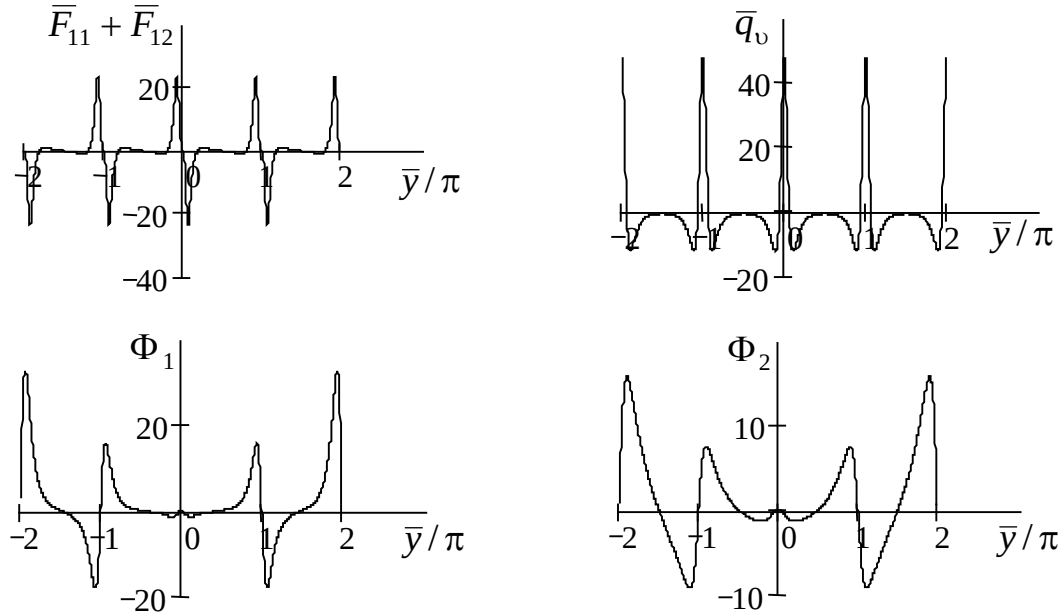


Рис. 1. Источник энергии и результирующая массовая сила: горячая область.

Входные параметры: $\varepsilon = -0.5$; $\bar{\gamma} = 0.12$; $m = 1$; $\bar{\nu} = 1$; $u_{11} = 0.5$; $\bar{y} \in [-2\pi; 2\pi]$

Сравнение свойств вязкоупругого и ньютоновского течений дано на рисунке 2 (горячая область). Различия между горячей и холодной областями при $\bar{\gamma} \geq 0$ имеют количественный характер, а в качественном отношении эти процессы одинаковые. В каждый

из температурных областей качественные различия между течениями ($\bar{\gamma} > 0$) и ($\bar{\gamma} = 0$) обусловлены прежде всего релаксацией вязких напряжений в жидкости Максвелла: на рисунке 2 зависимость $\bar{\tau}_{12}$ от $\bar{\tau}$ обладает отчетливо выраженной немонотонностью, и при этом наблюдаются два экстремума: максимум и минимум. Это обстоятельство оказывает значительное влияние на поведение источника импульса $\bar{F}_{12}$ как функции температуры $\bar{\tau}$. Отметим еще, что в данном случае течение ньютоновской жидкости – изобарическое. Под влиянием конечного времени релаксации $\bar{\gamma} > 0$ давление становится немонотонной функцией температуры. Эти результаты здесь не приводятся.

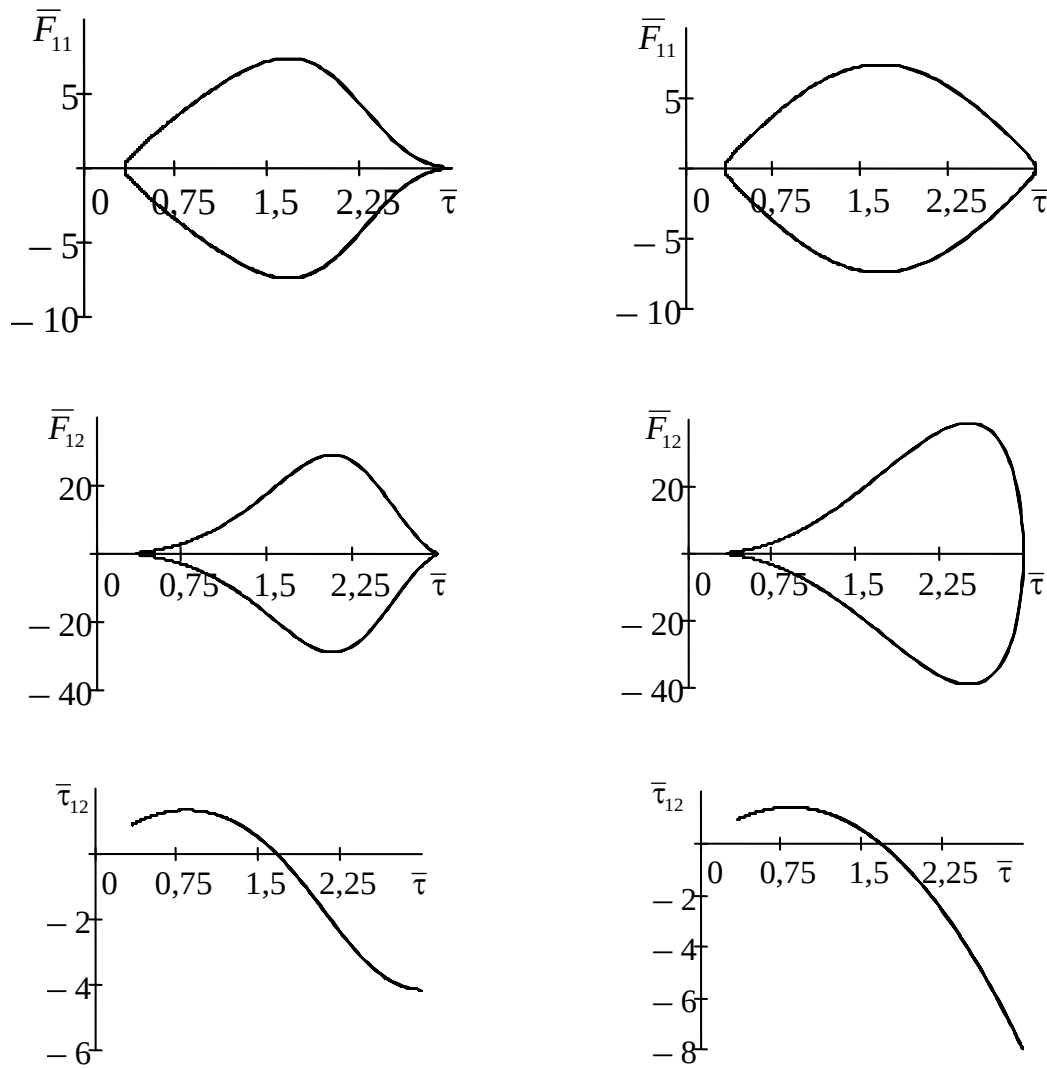


Рис. 2. Конкурирующие источники импульсов и вязкое касательное напряжение.

Левый столбец – вязкоупругая жидкость, $\bar{\gamma} = 0.12$.

Правый столбец – ньютоновская жидкость, $\bar{\gamma} = 0$. Горячая область.

Входные параметры: $\varepsilon = -0.5$; $m = 1$; $\bar{v} = 1$; $u_{11} = 0.5$; $\bar{y} \in [-2\pi; 2\pi]$

Вихрь скорости $\overline{\omega} = \overline{\tau}(\overline{\tau} - \overline{\tau}_1)$ нелинейно зависит от температуры жидкости и существенно влияет на сток и источник импульса посредством D_1 : $\overline{\zeta}_r = 2D_1(2\overline{\tau}_1\overline{\tau} - \overline{\tau}^2)$, $D_1 > 0$, $\partial D_1 / \partial \Gamma < 0$, $\Gamma = \overline{\gamma}^2 m^2 (\overline{\tau}_1\overline{\tau} - \overline{\tau}^2)^2$.

Заключение. Изучен класс неизотермических плоских течений вязкой несжимаемой жидкости при воздействии двух массовых сил и источника энергии. Внешняя сила трения (сток импульса) и источник импульса, нелинейно зависящий от температуры, генерируют пространственно периодическое движение. Рассмотрены две реологические модели жидкости: вязкая ньютоновская и вязкоупругая жидкость Максвелла. Изучены качественные и количественные свойства скорости, температуры, давления, вязких напряжений, вихря скорости и производства энтропии. Определена роль релаксации вязких напряжений в формировании поля давления.

Список литературы

1. Седов, Л.И. Механика сплошной среды / Л.И. Седов. – М.: Наука, 1973, Т.1. – 536 с.
2. Астарита, Дж. Основы гидромеханики неньютоновских жидкостей / Дж Астарита, Дж. Марруччи. – М.: Мир, 1978. – 309 с.
3. Гледзер, Е.Б. Системы гидродинамического типа и их применение / Е.Б. Гледзер, Ф.В. Должанский, А.М. Обухов. – М.:Наука, 1981. – 368 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. Картавых, А.В. Кластерная модель структуры расплавов в погранслое и ее гидродинамическое описание при моделировании процессов кристаллизации полупроводников в космосе/ А.В. Картавых, М.Г. Мильвидский, В.П. Гинкин, М.А. Забудько, О.М. Науменко // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. –2004. –№ 6. –С. 91–98.
6. Шабловский, О. Н. Тригонометрический профиль скорости сдвигового течения вязкой жидкости / О.Н. Шабловский // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». 2011. – Выпуск 5. –№32(249). – С. 77-82.
7. Шабловский, О. Н. Вихрь скорости и производство энтропии в релаксирующем потоке вязкой жидкости с внутренними источниками / О.Н. Шабловский // Энергетика - Изв. высш. учеб. заведений и энерг. объединений СНГ. – 2011. – №5. – С. 55-65.

КРИТИЧЕСКИЙ ИНДЕКС ТЕПЛОЁМКОСТИ В ЗАДАЧИ СВЯЗЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИ ОДНОМЕРНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ⁷

Т.В.Якунина, В.Н.Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова,
Инженерно-технологический институт, tatav19@mail.ru udodov@khsu.ru

Рассмотрим одномерную перколяционную модель в задаче связей. Множество узлов N , которые расположены друг от друга на одном расстоянии, представляет собой горизонтальную цепочку. Из каждого узла выходит одно и то же число связей. Количество связей не зависит от расположения самого узла в решетке, число связей зависит только от радиуса протекания. Вероятность блокировки любой связи одинакова, все связи в модели равноценны. Нумерация связей цепочки осуществляется с левого края.

Связи между узлами могут быть только двух видов: целыми и блокированными (разорванными, по которым ток не течёт). В задаче связей блокируется только одна связь за один шаг, все узлы считаются целыми. Два узла решетки считаются связанными друг с другом, если их соединяет цепочка целых связей. Совокупность связанных друг с другом узлов называется кластером [1, 2]. Если доля целых связей мала, они образуют небольшие отдельные кластеры. С увеличением числа целых связей кластеры растут, объединяются, и возникает пронизывающий всю решетку, так называемый, соединяющий («бесконечный») кластер, по которому осуществляется протекание с одного конца решетки на другой. Средняя максимальная доля целых связей, при которой нет соединяющего кластера – это порог перколяции (протекания) p_{cb} . Он зависит от радиуса перколяции, размерности решетки, ее типа и числа узлов N [1-4].

Таким образом, решетка представляет собой горизонтальную одномерную цепочку, состоящую из N узлов, при радиусе протекания R .

Цель данной работы заключается в том, чтобы разобрать методы решения одномерных задач связей без построения покрывающих решеток, получить новые зависимости для критического индекса теплоёмкости.

Перколяционный порог, разделяет две фазы: в одной фазе существуют только конечные кластеры и бесконечного (соединяющего) кластера нет, в другой фазе соединяющий кластер существует [5]. Поэтому некоторые величины теории протекания аналогичны величинам из теории фазовых переходов второго рода. В теории протекания доля целых связей (в задаче связей) играет ту же роль, что и температура в температурных фазовых переходах. Вероятность того, что узел (связь) принадлежит бесконечному кластеру, аналогична параметру порядка в теории температурных фазовых переходов [5]. Многие важные характеристики кластера (корреляционная длина, среднее число узлов) вблизи перехода описываются степенными функциями с различными критическими показателями [5], например

$$F \propto |p - p_{cb}|^{2-\alpha}, \quad (1)$$

где F – свободная энергия для данной цепочки (точнее, это аналог свободной энергии), p –

⁷ Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Республики Хакасия в рамках научного проекта № 19-41-190003.

доля целых связей в цепочке, p_{cb} – порог протекания в задаче связей, α – критический индекс аналога теплоемкости. Строго говоря, (1) верно для системы бесконечного размера (в термодинамическом пределе) и при приближении к порогу перколяции, однако при моделировании наносистем эту формулу можно использовать в некотором интервале изменения p (не слишком близко к порогу). Формула (1) справедлива также только в нулевом или слабом поле.

В теории протекания роль свободной энергии F играет среднее число кластеров в расчете на один узел [3]

$$F(p) = \sum_s n_s e^{-sh}, \quad (2)$$

где n_s – среднее число кластеров размера s в расчете на один узел решетки; h – параметр, играющий роль безразмерного внешнего поля [3].

Из формулы (1) легко получить формулу для вычисления индекса α

$$\alpha = 2 - \frac{\ln \frac{F(p_1)}{F(p_2)}}{\ln \left| \frac{p_1 - p_{cb}}{p_2 - p_{cb}} \right|}, \quad (3)$$

где p_1 и p_2 – доли целых связей в цепочке длины N .

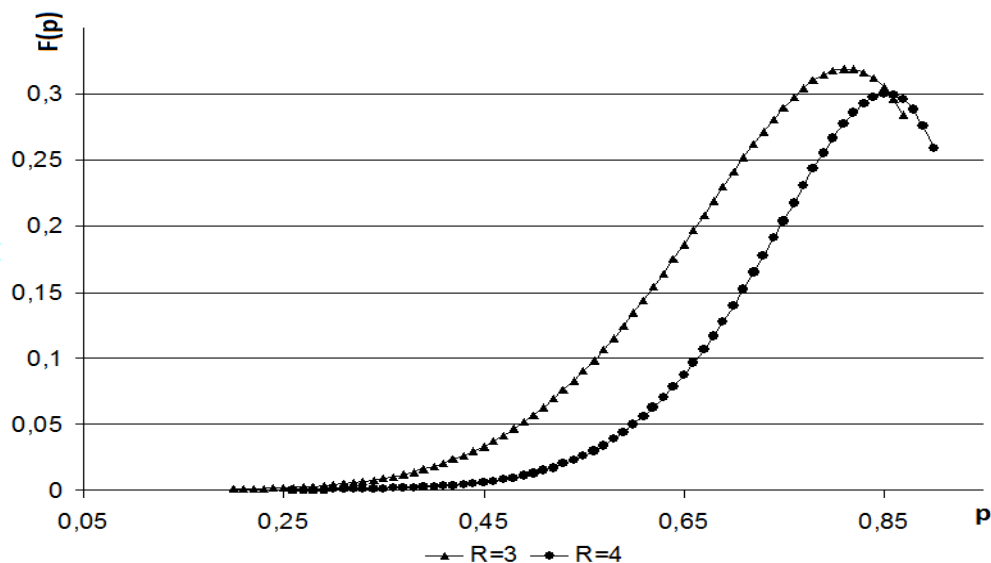


Рис.1. Свободная энергия при радиусах протекания $R = 3$ и $R = 4$ цепочек из 40 узлов в задаче связей при $h = 0$; погрешность вычислений 1,5% - 20%

Изложим метод расчета критического индекса α . Обозначим значение доли p_n вблизи порога за Z_c , где $n = 1, 2$. Z_c это близкое, но не превосходящее порога протекания значение p_n для рассматриваемой решетки (для определенности рассматриваем область ниже порога). Для каждой связи возьмем случайное число в промежутке от нуля до единицы. Если это число не меньше Z_c , то присвоим этой связи единицу. Это означает, что связь целая. В противном случае присвоим нуль и связь считаем заблокированной. Присвоим каждому кластеру порядковый номер. И всем узлам в каждом кластере присвоим значение, равное номеру своего кластера. Считаем количество двухчастичных кластеров (в задаче связей одночастичных

кластеров нет), трехчастичных и так далее до m -частичных, где m – это максимальный размер кластера. Затем находим свободную энергию с соответствующей погрешностью. Свободная энергия вычисляется при использовании двух различных значений Z_c . На основании полученных значений свободной энергии вычисляется значение критического индекса α с соответствующей погрешностью.

На основании данного алгоритма составлена компьютерная программа, позволяющая найти свободную энергию и критический индекс теплоемкости α в задаче связей для модели одномерного протекания с произвольным радиусом протекания [6] (рис.1-3).

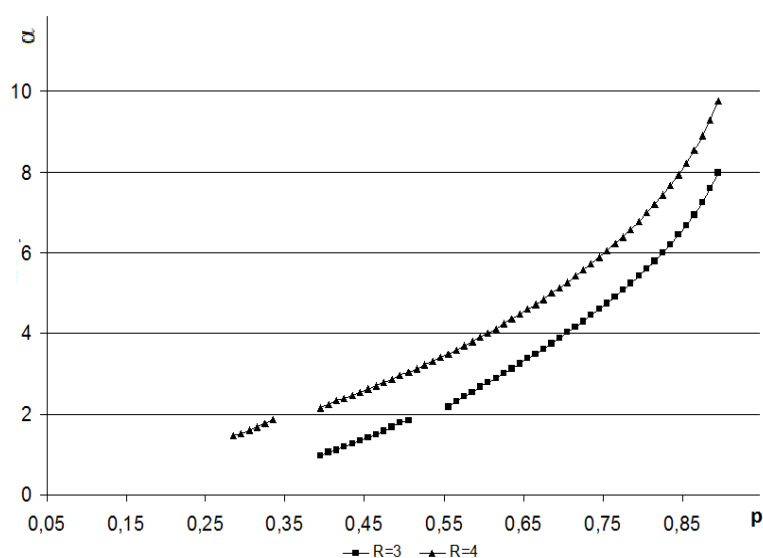


Рис.2. Зависимость критического индекса теплоёмкости ниже и выше перколяционного порога от доли целых связей в решётке при радиусах протекания $R = 3$ и $R = 4$ одномерных цепочек из 40 узлов в задаче связей при нулевом поле $h = 0$; погрешность вычислений 1,3% - 20%

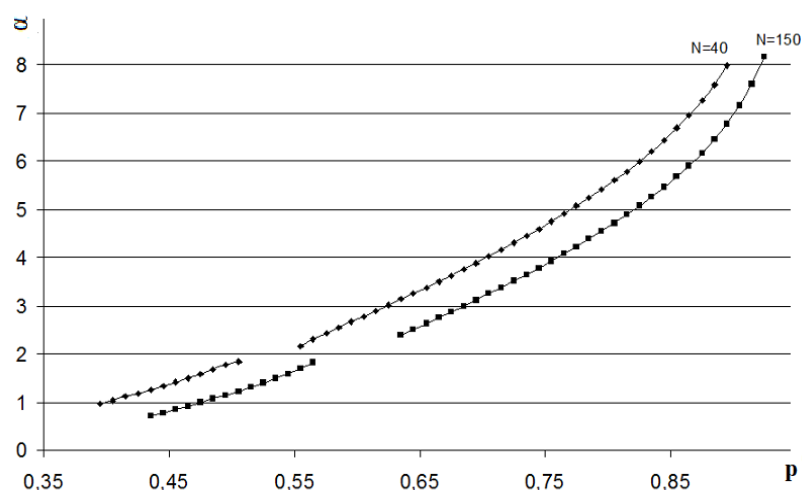


Рис.3. Зависимость критического индекса теплоёмкости ниже и выше перколяционного порога от доли целых связей в решётке при радиусе протекания $R = 3$ одномерных цепочек из 40 и 150 узлов в задаче связей при нулевом поле $h = 0$; погрешность вычислений 1,3% - 20%

Видно, что с увеличением перколяционного радиуса максимум $F(p)$ смещается вправо (рис. 1), а его значение уменьшается, что связано с увеличением порога протекания.

Из рисунка 2 и 3 видно, что при любом радиусе протекания R в задаче связей индекс α растет с увеличением R . Значения критического индекса теплоёмкости вблизи перколяционного порога не рассчитывались, т.к. в критической области этот индекс теряет смысл из-за больших флуктуаций (см. разрывы кривых на рис. 2). В этом проявляется специфика системы конечного размера.

Из рисунка 3 видно, что при различных длине цепочки $N = 40$ и $N = 150$ графики повторяют друг друга (монотонно возрастающая зависимость), нет пересечений. Кроме того, можно предположить для случая больших цепочек, графики зависимостей будут проходить ниже, а значения индекса α численно меньше.

Рассчитаны средние значения перколяционного порога в одномерном случае для цепочек конечного размера, а также предложен метод нахождения аналогов свободной энергии и критического индекса теплоёмкости для одномерной решетки при различных значениях радиуса перколяции, числа узлов решетки и напряженности внешнего поля. В отличие от других авторов [7,8] рассчитана зависимость критического индекса теплоемкости от доли целых узлов при различном радиусе протекания, без построения покрывающей решётки и матрицы смежности. Проведён сравнительный анализ результатов [7, 8] для случая одномерной решётки при радиусе протекания $R = 3$, числе узлов $N = 40$. Значения критического индекса теплоёмкости [7, 8] попадают в полученный нами промежуток значений при доли целых узлов в решётке как выше, так и ниже порога при учете погрешности вычислений. Представленные результаты могут найти применение при моделировании прыжковой проводимости полупроводников при низких температурах, политипных превращений с особенностями в нанометровом диапазоне в плотноупакованных кристаллах [9]. Таким образом, предложенная модель позволяет рассматривать произвольное число узлов в одномерной решетке для задачи связей при произвольных радиусе протекания и поле. Кроме того, предложенный подход позволяет находить критические индексы теплоёмкости при больших (в принципе произвольных) радиусах протекания, что было ранее для одномерной задачи связей невозможно. В рамках предложенного подхода возможно также вычисление и других критических индексов.

Список литературы

1. Тарасевич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс: учеб.пособие для вузов / Ю.Ю.Тарасевич. — Изд. 3-е, испр. — М.: Едиториал УРСС, 2003. — 144 с.
2. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка / А.Л.Эфрос. — М.: Наука, 1982. — 176 с.
3. Шкловский Б.И. Теория протекания и проводимость сильно неоднородных сред / Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос // УФН, 1975. — Т.117. — Вып. 3. С.401 — 435.
4. Волкова Т.В. Зависимость порога протекания от длины цепочки и от радиуса протекания для модели одномерной перколяции / Т.В.Волкова, М.А.Бурева // Физика и химия высокоэнергетических систем: Сборник материалов IV Всероссийской конференции молодых учёных (22-25 апреля 2008 г., г. Томск). — Томск: ТМЛ-Пресс, 2008. — С.182 — 184.
5. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения. Учеб.пособие./ Ю.Ю.Тарасевич. — М.: Книжный дом"ЛИБРОКОМ", 2012. — 112 с.
6. Волкова Т.В. Критический индекс теплоёмкости в одномерной задаче связей, свидетельство о госрегистрации программы для ЭВМ №2014611071; заявка №2013661127; дата поступления 02 декабря 2013 г., зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 23.01.2014 г.

7. Буреева М.А. Моделирование задачи связей одномерной теории перколяции на неориентированном графе / М.А.Буреева, В.Н.Удодов // Математическое моделирование – М., 2012. — Т.24. - №11. С.72-82.

8. Волкова Т.В. Задача связей в одномерной теории перколяции для конечных систем / Т.В.Волкова, М.А.Буреева, В.Н.Удодов, А.И.Потекаев // Известия вузов. Физика. 2010. — №2. С. 33-39.

9. Удодов В.Н. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектах наноструктурах / В.Н.Удодов, А.И.Потекаев, А.А.Попов и др. Ред.В.Н.Удодов. — Абакан: Изд-во ХГУ им. Н.Ф. Катанова. — 2008. — 135 с.

СПИСОК ДОКЛАДОВ

С.С. Анцыферов, К.Н. Фазилова МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЖИМОВ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ КОГНИТИВНЫХ СИСТЕМ	3
Е.Н. Бельская, О.В. Тасейко РАСЧЕТ НОРМАТИВОВ КАЧЕСТВА АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ДЛЯ ВЕЩЕСТВ НЕКАНЦЕРОГЕННОГО ДЕЙСТВИЯ	9
Н.М. Богатов, Л.Р. Григорьян, М.С. Коваленко ОБРАЗОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЕ	13
Н.М. Бодунов РЕШЕНИЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ОРТОТРОПНОЙ ПЛАСТИНЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ	20
Р.Н. Голых, А.В. Шалунов, В.Н. Хмелёв ОБЩИЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СИСТЕМ С ЖИДКОЙ ФАЗОЙ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ	25
R.N.Golykh THEORETICAL STUDY OF ULTRASONIC CAVITATION INFLUENCE ON HETEROGENEOUS CHEMICAL REACTION IN SUSPENSION OF SOLID PARTICLES	31
Л.Р. Григорьян, Е.Г. Ляшко, А.Л. Григорьян МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАБОТКИ ФОНОКАРДИОГРАММЫ В СРЕДЕ MATLAB	37
Г.В. Дружинин, Ф.К. Смородин, Н.М. Бодунов МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГАЗОЛАЗЕРНОЙ РЕЗКИ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ КВАЗИСТАЦИОНАРНОГО ТЕЧЕНИЯ РАСПЛАВА	41
У.С. Иванова, В.В. Москвичев, О.В. Тасейко ОЦЕНКА УРОВНЯ ТЕХНОГЕННОЙ ОПАСНОСТИ ГОРОДСКИХ МУНИЦИПАЛЬНЫХ ОБРАЗОВАНИЙ СИБИРСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ОКРУГА	46
Е.М. Кабаев, А.Н. Мацулев, К.В. Симонов ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ДАННЫХ МЕДИЦИНСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСА CON-TREX	50
Каганович Б.М, Стенников В.А., Зароднюк М.С., Барахтенко Е.А.	

УСЛОВНОЕ ТЕРМОДИНАМИКО-ЦЕПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ	55
Л.С.Калиманова, О.В.Тасейко АНАЛИЗ РИСКОВ ЗДОРОВЬЮ НАСЕЛЕНИЯ Г. КРАСНОЯРСКА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭВОЛЮЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ	59
Е. Д. Каропова, Ю. В. Шанько, В. В. Деревянко, Д. А. Нестеров ПРЕДСКАЗАНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ СТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ БЛОКА РАДИОЭЛЕКТРОННОЙ АППАРАТУРЫ ПО ДАННЫМ НАБЛЮДЕНИЙ ОТ СИСТЕМЫ ВСТРОЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ДАТЧИКОВ	64
Р.А. Козлитин, В.Н. Удодов МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ОДНОМЕРНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ	69
Н.Ф. Овчинникова ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ РЕЛЬЕФА НА ДИНАМИКУ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ И РОСТ ДРЕВОСТОЕВ	73
А.Л. Осипов, В.П. Трушина ПРИНЯТИЕ РЕШЕНИЙ В ХИМИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ	79
Илья I. Ryzhkov, Andrey V. Minakov, M.M. Simunin MATHEMATICAL MODELLING OF ETHANOL PYROLYSIS IN A COMMERCIAL CHEMICAL VAPOR DEPOSITION REACTOR	83
Д.А. Семёнов, М.Ю. Метелева ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДИАГРАММЫ ЛАМЕРЕЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОНЯТИЯ «СРЕДНИЙ КЛАСС» В ЭКОНОМИКЕ	89
В.П.Сизиков, В.И. Разумов ВЕДУЩИЕ ФАКТОРЫ РАВНОВЕСНОСТИ	92
В.М. Сомсиков, С.Н. Азаренко ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЙ МЕХАНИЗМ НЕОБРАТИМОСТИ В РАЗВИТИИ ФИЗИЧЕСКОЙ КАРТИНЫ МИРА	97
Д.В.Спирин, Ж.В.Дзюба, В.Н.Удодов ВЛИЯНИЕ НЕМАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ НА ДИНАМИКУ МАГНИТНЫХ ПЕРЕХОДОВ В ОДНОМЕРНОМ ИЗИНГОВСКОМ МАГНЕТИКЕ	109
В.Н. Удодов НАРУШЕНИЕ РАВЕНСТВА ЭССАМА-ФИШЕРА И НЕРАВЕНСТВА РАШБРУКА ДЛЯ СВЕРХТЕКУЧЕГО ПЕРЕХОДА В ^4He	113

В.Н. Удодов О КЛАССИФИКАЦИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ	117
В.А. Фельк, С. В. Комогорцев МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФЕРРОМАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА В МИКРО И НАНОТРУБКАХ	126
Р.А. Чиженкова БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ИЗДАТЕЛЬСКИХ НАУЧНЫХ ПРОЕКТОВ ПО ОБЛАСТИ ЗНАНИЯ "ХИМИЯ И НАУКИ О МАТЕРИАЛАХ", ПОДДЕРЖАННЫХ РОССИЙСКИМ ФОНДОМ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ	128
О.Н. Шабловский, Д.Г. Кроль ВОЗДЕЙСТВИЕ ИСТОЧНИКОВ ИМПУЛЬСА И ЭНЕРГИИ НА ТЕЧЕНИЕ ЖИДКОСТИ С РЕЛАКСИРУЮЩИМИ ВЯЗКИМИ НАПРЯЖЕНИЯМИ	134
Т.В. Якунина, В.Н. Удодов КРИТИЧЕСКИЙ ИНДЕКС ТЕПЛОЁМКОСТИ В ЗАДАЧИ СВЯЗЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИ ОДНОМЕРНОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ	139

АЛФАВИТНЫЙ СПИСОК УЧАСТНИКОВ СЕМИНАРА

Участник	Адрес	Стр.
Азаренко Светлана Николаевна	Казахстан, Алматы, ул. Утепова, 29, Алма-Атинская академия МВД РК им.М.Есбулатова E-mail: sveta.azarenko@gmail.com	97
Анцыферов Сергей Сергеевич	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт, каф. метрологии и стандартизации E-mail: c_standard@fel.mirea.ru	3
Баракхтенко Евгений Алексеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: barakhtenko@isem.irk.ru	55
Бельская Екатерина Николаевна	660037, г. Красноярск, пр. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный аэрокосмический университет E-mail: ketrin_nii@mail.ru	9
Богатов Николай Маркович	350040, г. Краснодар, ФГБОУ ВПО «Кубанский государственный университет», т. 8(861)2199501*266 E-mail: bogatov@phys.kubsu.ru	13
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	20, 41
Голых Роман Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	25, 31
Григорьян Анастасия Леонтиевна	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	37
Григорьян Леонтий Рустемович	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	13, 37
Деревянко Виктор Валерьевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: ws@icm.krasn.ru	64
Дзюба Жанна Владимировна	655017, Абакан, пр. Ленина, 90, ХГУ им. Н.Ф. Катанова, E-mail: dudareva82@gmail.com	109

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	41
Зароднюк Максим Сергеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А.Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: max@isem.irk.ru	55
Иванова Ульяна Сергеевна	660049, Красноярский край, г. Красноярск, пр. Мира, 53, ИВТ СО РАН E-mail: ulyana-ivanova@inbox.ru	46
Кабаев Евгений Михайлович	660041, Красноярск, Центр восстановительной медицины ФГБУ ФСНКЦ ФМБА России E-mail: kabaevem@mail.ru	50
Каганович Борис Моисеевич	664033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: thermo@isem.irk.ru	55
Калиманова Любовь Сергеевна	660037, г. Красноярск, пр. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный аэрокосмический университет E-mail: kalimanova.l@mail.ru	59
Каропова Евгения Дмитриевна	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: jane@icm.krasn.ru	64
Коваленко Максим Сергеевич	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: m.s.kovalenko@ya.ru	13
Козлитин Роман Анатолевич	655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163 E-mail: kran80@mail.ru	
Комогорцев Сергей Викторович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт физики СО РАН E-mail: komogor@iph.krasn.ru	126
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	134
Ляшко Екатерина Григорьевна	350040, Краснодар, ул. Ставропольская 149, Кубанский государственный университет E-mail: leonmezon@mail.ru	37

Мацулев Александр Николаевич	660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 24, Институт химии и химической технологии СО РАН E-mail: matsulev@icct.ru	50
Метелева Мария Юрьевна	101000, Москва, Мясницкая ул., 20, Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Факультет социальных наук E-mail: mariameteleva@yandex.ru	89
Минаков Андрей Викторович	660074, г. Красноярск, ул. Киренского, 28, СФУ E-mail: tov-andrey@yandex.ru	83
Москвичев Владимир Викторович	660049, Красноярский край, г. Красноярск, пр. Мира, 53, ИВТ СО РАН E-mail: krasn@ict.nsc.ru	46
Нестеров Денис Александрович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: ndanda@icm.krasn.ru	64
Овчинникова Наталья Феликсовна	660036, Красноярск, Институт леса им. В.Н.Сукачева СО РАН, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН» E-mail: nf_2004@mail.ru	73
Осипов Александр Леонидович	630099, Новосибирск, ул. Каменская, 56, Новосибирский государственный университет экономики и управления E-mail: alosip@mail.ru	79
Разумов Владимир Ильич	Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Россия, 644077, Омск, проспект Мира 55-а E-mail: razumov@omsu.ru	92
Рыжков Илья Игоревич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН E-mail: rii@icm.krasn.ru	83
Семёнов Денис Александрович	660036, Красноярск, Академгородок, Институт биофизики СО РАН E-mail: dasem@mail.ru	89
Сизиков Виктор Петрович	Омский государственный университет путей сообщения, 644046, Россия, г. Омск, пр. Маркса, 35. Т./ф.: (3812) 31-42-19. E-mail: v_p_sizikov@mail.ru	92
Симонов Константин Васильевич	660036, Красноярск, Академгородок, Институт вычислительного моделирования СО РАН, т. 89135954902 E-mail: simonovkv@icm.krasn.ru	50

Симунин Михаил Максимович	660025, г. Красноярск, пр. им. газеты «Красноярский рабочий», 95, ИЦМиМ СФУ E-mail: michanel@mail.ru	83
Смородин Федор Кузьмич	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	41
Сомников Вячеслав Михайлович	050020, Республика Казахстан, г. Алматы, Каменское плато, Садоводческое товарищество «Ионосфера» д.117 E-mail: vmsoms@rambler.ru	97
Спирин Дмитрий Владимирович	655000, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова E-mail: udodovv@hotmail.com	109
Стенников Валерий Алексеевич	64033, Иркутск, Лермонтова, 130, Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева (ИСЭМ) СО РАН E-mail: sva@isem.irk.ru	55
Тасейко Ольга Викторовна	660037, г. Красноярск, пр. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный аэрокосмический университет E-mail: taseiko@gmail.ru	9, 46, 59
Трушина Вероника Павловна	630099, Новосибирск, ул. Каменская, 56, Новосибирский государственный университет экономики и управления E-mail: veronika07-92@mail.ru	79
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	109, 113, 117, 139
Фазилова Ксения Наильевна	119454, ЦФО, г. Москва, пр-т Вернадского, д. 78, МИРЭА – Российский технологический университет, Физико-технологический институт E-mail: fazilova@mirea.ru	3
Фельк Владимир Александрович	660000, Красноярск, просп. имени газеты Красноярский Рабочий, 31, Сибирский государственный университет науки и технологий им. М.Ф. Решетнева E-mail: vlaf@sibsau.ru	126
Хмелёв Владимир Николаевич	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: vnh@bti.secna.ru	25
Чиженкова Рогнеда Александровна	Институт биофизики клетки РАН, г. Пущино Московской области, 142290, Тел.: (4967)739-196 E-mail: chizhenkova@mail.ru	128

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	134
Шалунов Андрей Викторович.	659305, г. Бийск, ул. Трофимова, 27, Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ E-mail: romangl90@gmail.com	25
Шанько Юрий Вадимович	Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Красноярск, Академгородок E-mail: shanko@icm.krasn.ru	64
Якунина Татьяна Валерьевна	655017, Абакан, пр. Ленина 90, Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова (ХГУ), т. р.тел. (3902)222-163 E-mail: Tatav19@mail.ru	139

Научное издание

Моделирование неравновесных систем—2019

Материалы XXII Всероссийского семинара 4 – 6 октября 2019 г.

Редактор М.Г. Садовский
Компьютерная верстка: М.Ю. Сенашова

Подписано в печать «6» сентября 2019 г. Формат 60 × 90/8. (А4)
Бумага офсетная. Печать плоская.
Усл. печ. л. 13,56. Уч.-изд. л. 11,81.
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