ISSN 2077-3110

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XVIII Международного семинара

Часть 1

Воронеж 2017

Министерство образования и науки
Российской Федерации
Российская академия наук
Воронежский государственный
технический университет
Институт проблем химической физики РАН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XVIII Международного семинара
(г. Воронеж, 30 июня 2017 г.)

Часть 1

Воронеж 2017

УДК 53.072:519.673

Физико-математическое моделирование систем: материалы XVIII Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2017. Ч. 1. 203 с.

В сборнике представлены работы, посвященные физико-математическому моделированию систем многих частиц, конденсированных сред и технических объектов, а также математическому, программному и методическому обеспечению систем компьютерного моделирования.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

И.Л. Батаронов (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *председатель*
Г. Е. Шунин (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *сопредседатель*
В.В. Пешков (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *ответственный секретарь*
С.А. Кострюков (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *ученый секретарь*
А.А. Долгачев (ВГТУ, г. Воронеж, Россия)
В.Ф. Селиванов (ВГТУ, г. Воронеж, Россия)
И.М. Пашуева (ВГТУ, г. Воронеж, Россия) – *секретарь*

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Ю.А. Бахвалов (ЮРГПУ (НПИ), г. Новочеркасск, Россия), *председатель*
К.В. Боженко (ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Россия), *сопредседатель*
С.Д. Кургалин (ВГУ, г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*
В. Н. Нечаев (ВГТУ, г. Воронеж, Россия), *сопредседатель*
А. С. Сигов (МИРЭА, г. Москва, Россия), *сопредседатель*
Е. Г. Андреева (ОмГТУ, г. Омск, Россия)
И.С. Баткин (университет г. Оттава, Канада)
А.Е. Гехман (ИОНХ РАН, г. Москва, Россия)
В.Н. Глазнев (ВГУ, г. Воронеж, Россия)
В. В. Гречихин (ЮРГПУ(НПИ), г. Новочеркасск, Россия)
Е.Г. Григорьев (НИЯУ МИФИ, г. Москва, Россия)
Дж. Зеббар (Университетский Центр г. Тиссемсильта, Алжир)
А.С. Зюбин (ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Россия)
Т.С. Зюбина (ИПХФ РАН, г. Черноголовка, Россия)
С. Ю. Князев (ДГТУ, г. Ростов-на-Дону, Россия)
С.И. Курганский (ВГУ, г. Воронеж, Россия)
А. М. Мебель, (университет Флориды, г. Майами, США)
А. В. Пашковский (НТИ (филиал) СКФУ, г. Невинномысск, Россия)
Ю.Г. Смирнов (УГТУ, г. Ухта, Россия)
В.А. Шунина (ВГТУ, г. Воронеж, Россия), *ученый секретарь*

Редакционная коллегия

Научные редакторы: И.Л. Батаронов, В.Н. Нечаев, Г.Е. Шунин
Технические редакторы: С.А. Кострюков, В.В. Пешков, В.А. Шунина

© Коллектив авторов, 2017
© ФГБОУ ВО “Воронежский государственный технический университет”, 2017

УДК 539:519.517.3

ПОВЕДЕНИЕ ПОЛЯ ДЕФОРМАЦИИ СВЯЗАННЫХ ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУР С ДЫРАМИ

О.П. Абрамова, С.В. Абрамов

Донецкий национальный университет
oabramova@ua.fm

Исследовано взаимовлияние аттракторов (реальных и мнимых), поля деформации и типов отдельных стохастических процессов в связанных фрактальных структурах с дырами. Поведение поля деформации можно контролировать выбором управляющих параметров (значений полуосей, положений центров тяжести). Возможны эффекты перестройки и движения фрактальных структур относительно друг друга

Ключевые слова: связанные фрактальные структуры, аттракторы, поле деформации, стохастические процессы, дыры

Введение

В последнее время активно исследуются различные нелинейности в периодических структурах и метаматериалах [1]. Дальнейшее развитие получили нанофизика, физика конденсированных сред [2, 3], которые используют в качестве активных объектов нанообъекты. Важнейшей задачей является изучение взаимовлияния, коллективных взаимодействий, динамики таких нанообъектов [4, 5]. При этом возможны эффекты различных топологических фазовых переходов, связанных с формой и размерностью нанообъектов, образованием новых связанных структур (кластеров). Одним из примеров подобного рода могут быть модельные многослойные наносистемы и появляющиеся там объемные фрактальные структуры [5-7]. Актуальность таких исследований подтверждается присуждением Нобелевской премии по физике за 2016 год М. Костерлицу, Д. Таулессу, Д. Холдейну за теоретические открытия топологических фазовых переходов и топологических фаз материи. В данной работе эффекты, связанные с формой объектов, наличием дыр исследуются с помощью аттракторов. Динамика взаимодействий как отдельных, так и связанных структур моделируется организацией отдельных стохастических процессов в связанной системе. При этом многие физические свойства (например, поле деформации [5-7]) в связанных фрактальных структурах отличаются от свойств отдельных фрактальных

объектов. Целью данной работы является исследование взаимовлияния структур и их аттракторов, отдельных стохастических процессов друг на друга в связанной фрактальной структуре.

Связанные фрактальные структуры с дырами

Рассматривается связанная фрактальная структура, состоящая из двух отдельных фрактальных структур ($\mathrm{i}=1,2$). Связанная структура находится в дискретной решетке $N_1 \times N_2 \times N_3$, узлы которой задаются целыми числами n, m, j. Нелинейное уравнение для безразмерной функции смещения u узла решетки такой структуры имеет вид [6]

$$u = \sum_{\mathrm{i}=1}^{2} R_{\mathrm{i}}(1-\alpha)(1-2sn^2(u-u_0,k))/Q_{\mathrm{i}}\ ; \quad p_{0\mathrm{i}} = p'_{0\mathrm{i}} + p'_{1\mathrm{i}} n + p'_{2\mathrm{i}} m + p'_{3\mathrm{i}} j\ ; \quad (1)$$

$$Q_{\mathrm{i}} = p_{0\mathrm{i}} - b_{1\mathrm{i}}(n-n_{0\mathrm{i}})^2 / n_{c\mathrm{i}}^2 - b_{2\mathrm{i}}(m-m_{0\mathrm{i}})^2 / m_{c\mathrm{i}}^2 - b_{3\mathrm{i}}(j-j_{0\mathrm{i}})^2 / j_{c\mathrm{i}}^2 . \quad (2)$$

В выражениях (1), (2) индекс i соответствует номеру отдельной фрактальной структуры, α – фрактальная размерность поля деформации u вдоль оси Oz ($\alpha \in [0,1]$); u_0 – постоянное (критическое) смещение; k – модуль функции эллиптического синуса; параметры $p'_{0\mathrm{i}}$, $p'_{1\mathrm{i}}$, $p'_{2\mathrm{i}}$, $p'_{3\mathrm{i}}$, $b_{1\mathrm{i}}$, $b_{2\mathrm{i}}$, $b_{3\mathrm{i}}$, $n_{0\mathrm{i}}$, $n_{c\mathrm{i}}$, $m_{0\mathrm{i}}$, $m_{c\mathrm{i}}$, $j_{0\mathrm{i}}$, $j_{c\mathrm{i}}$ характеризуют различные фрактальные структуры. Параметры R_{i} определяют ориентацию полей деформации отдельных структур в связанной системе. В общем случае все параметры могут зависеть от индекса слоя j и безразмерного времени t. Функции Q_{i} учитывают взаимодействие узлов, как в плоскости основной прямоугольной дискретной решетки, так и межплоскостные взаимодействия. Особые точки (аттракторы) поля деформации многослойной наносистемы располагаются на поверхности, ядро которой определяется из условия

$$Q_1 \cdot Q_2 = 0 . \quad (3)$$

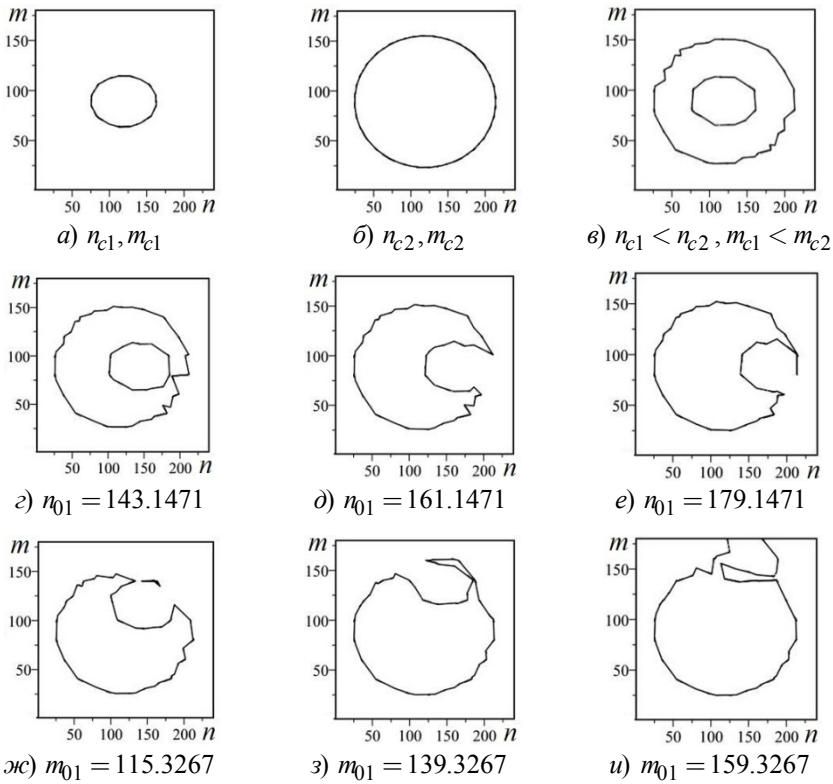
Если поверхность (3) пересечь плоскостью $j = j_k$, то получим уравнение изолиний. Нелинейные уравнения (1), (2) можно решать методом итераций по любому из индексов n, m, j. Если один из этих индексов считать фиксированным, то результатом итерации будет функция смещения, представляющая собой стохастическую поверхность, зависящую от двух других индексов.

Здесь итерационная процедура по индексу n моделирует стохастический процесс на прямоугольной решетке с размерами $N_1 \times N_2$. Отдельные фрактальные объемные структуры (ФОС) выбраны в виде реального фрактального эллиптического цилиндра (ФЭЦ) и мнимого фрактального эллиптического цилиндра, структура которого допускает интерпретацию как фрактальной квантовой точки (ФКТ).

На основе этих отдельных структур образованы связанные системы ФЭЦ1–ФЭЦ2 (рис. 1-3), ФКТ1–ФЭЦ2 и ФЭЦ1–ФКТ2 (рис. 4). Дискретная решетка имеет размеры: $N_1=240$, $N_2=180$. Уравнения поверхностей рассматриваемых структур не зависят от индекса j, поэтому в функциях Q_{i} параметры $b_{3\mathrm{i}}=0$. Основные параметры для ФОС следующие: $\alpha=0.5$; $u_0=29.537$; $k=0.5$. Для первого (ФЭЦ1) и второго (ФЭЦ2) эллиптических цилиндров $p'_{0\mathrm{i}}=1.0123$; для первой (ФКТ1) и второй (ФКТ2) квантовых точек $p'_{0\mathrm{i}}=-1.0123$. Для этих структур параметры $p'_{1\mathrm{i}}=p'_{2\mathrm{i}}=p'_{3\mathrm{i}}=0$, $b_{1\mathrm{i}}=b_{2\mathrm{i}}=1$, $j_{0\mathrm{i}}=31.5279$, $j_{c\mathrm{i}}=11.8247$ одинаковые; параметры для полуосей $n_{c1}=44.4793$, $m_{c1}=25.7295$, $n_{c2}=94.4793$, $m_{c2}=65.7295$ различные. Параметры $(n_{0\mathrm{i}}, m_{0\mathrm{i}})$ определяют положения центров тяжести этих структур.

На рис. 1 приведены аттракторы связанных эллиптических цилиндров с совпадающими ($n_{01}=n_{02}=119.1471$; $m_{01}=m_{02}=89.3267$; рис. 1*в*) и сдвинутыми (рис. 1, *г-и*) центрами тяжести. Для структур ФЭЦ1 (при $R_1=1$, $R_2=0$), ФЭЦ2 (при $R_1=0$, $R_2=1$) аттракторы (рис. 1, *а*, *б*) расположены на кривых эллиптического типа. Для связанной структуры ФЭЦ1–ФЭЦ2 центры тяжести ФЭЦ1 и ФЭЦ2 совпадают, а для полуосей выполняются неравенства ($n_{c1} < n_{c2}$, $m_{c1} < m_{c2}$), поэтому структура аттрактора ФЭЦ1 находится внутри структуры аттрактора ФЭЦ2 (рис. 1*в*). При этом наблюдается влияние аттракторов друг на друга: на кривых эллиптического типа появляются искажения по сравнению с гладкими кривыми из рис. 1, *а*, *б*. Сдвиг центра тяжести у внутренней структуры ФЭЦ1 при неподвижном центре тяжести у внешней структуры ФЭЦ2 приводит к существенной перестройке структуры аттракторов связанной системы (рис. 1, *г-и*). Для рис. 1, *г-е* параметры $m_{0\mathrm{i}}$, n_{02} остаются прежними, а параметр n_{01} изменяется, таким образом ФЭЦ1 пере-

мещается внутри ФЭЦ2 вдоль оси On. Для аттракторов на рис. 1, *ж-и* параметр n_{01}=145.1471 не изменяется, а параметр m_{01} изменяется (ФЭЦ1 перемещается внутри ФЭЦ2 вдоль оси Om). На рис. 2 приведены сечения $u\in[0;1]$ фрактальных эллиптических структур, аттракторы которых приведены на рис. 1. Поля деформации как отдельных (рис. 2, *а*, *б*), так и связанных (рис. 2, *в-и*) структур представляют собой стохастические поверхности с ярко выраженными особенностями поведения вблизи аттракторов из рис. 1. Для отдельной структуры ФЭЦ1 (рис. 2*а*) реализован стохастический процесс при $R_1=1, R_2=0$.

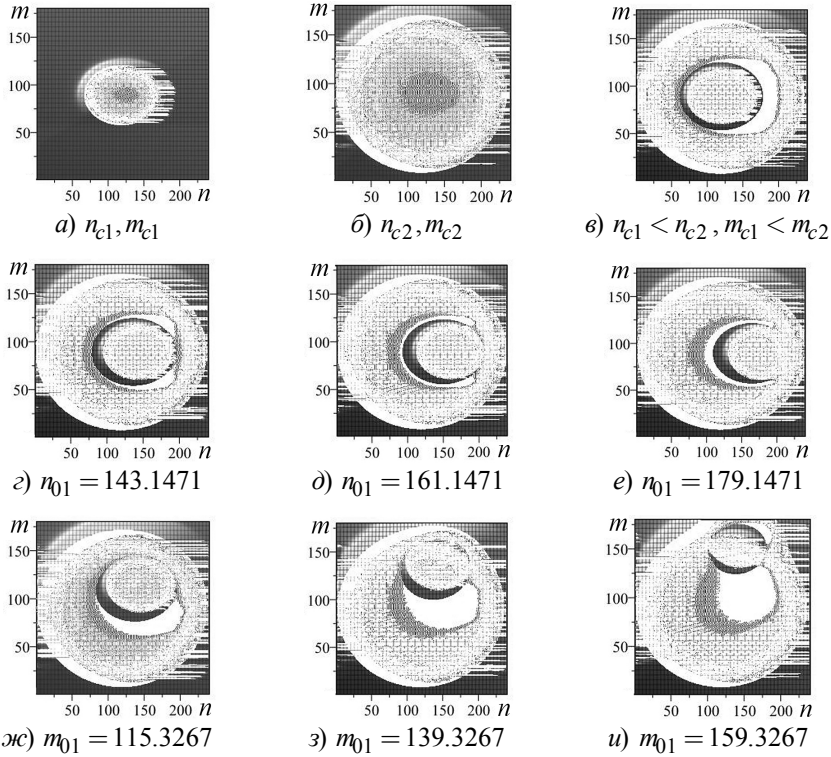


а) n_{c1}, m_{c1} *б*) n_{c2}, m_{c2} *в*) $n_{c1} < n_{c2}, m_{c1} < m_{c2}$

г) $n_{01} = 143.1471$ *д*) $n_{01} = 161.1471$ *е*) $n_{01} = 179.1471$

ж) $m_{01} = 115.3267$ *з*) $m_{01} = 139.3267$ *и*) $m_{01} = 159.3267$

Рис. 1. Аттракторы отдельных ФЭЦ1 (*а*), ФЭЦ2 (*б*) и связанных ФЭЦ1-ФЭЦ2 (*в-и*) структур с совпадающими (*в*) и сдвинутыми (*г-и*) центрами тяжести



а) n_{c1}, m_{c1} *б*) n_{c2}, m_{c2} *в*) $n_{c1} < n_{c2}, m_{c1} < m_{c2}$

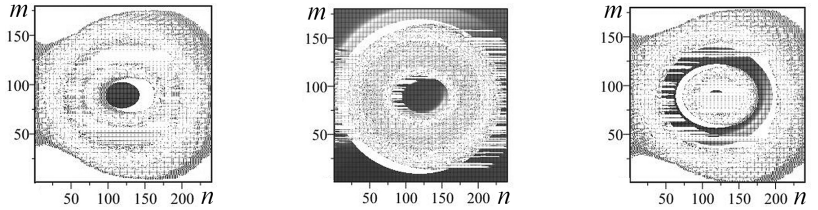
г) $n_{01} = 143.1471$ *д*) $n_{01} = 161.1471$ *е*) $n_{01} = 179.1471$

ж) $m_{01} = 115.3267$ *з*) $m_{01} = 139.3267$ *и*) $m_{01} = 159.3267$

Рис. 2. Сечения $u \in [0;1]$ (вид сверху) отдельных ФЭЦ1 (*а*), ФЭЦ2 (*б*) и связанных ФЭЦ1-ФЭЦ2 (*в-и*) структур с совпадающими (*в*) и сдвинутыми (*г-и*) центрами тяжести для $R_1 = 1,\ R_2 = 1$

Для отдельной структуры ФЭЦ2 (рис. 2*б*) реализован стохастический процесс при $R_1 = 0, R_2 = 1$. Для связанной системы реализованы оба процесса вместе при $R_1 = 1, R_2 = 1$ (рис. 2, *в-и*). Реализация этих процессов определяется выбором значений полуосей n_{ci}, m_{ci} отдельных структур, которые связаны с характерными корреляционными длинами стохастических процессов. Внутри областей эллиптического типа наблюдаются фрактальные дыры с ярко выраженным стохастическим поведением поля деформации (рис. 2, *а*, *б*). Наличие «хвостов» справа от ФЭЦ1 (рис. 2*а*), слева и справа от ФЭЦ2 (рис. 2*б*) обусловлено итерационным процессом по переменной n.

Появление «хвостов» слева от ФЭЦ2 (рис. 2*б*) связано с большей корреляционной длиной второго стохастического процесса ($n_{c2} > n_{c1}$, $m_{c2} > m_{c1}$). При этом для связанных структур (рис. 2, *в-и*) наблюдаются влияние стохастических процессов друг на друга, сдвиг внутреннего ФЭЦ1 относительно внешнего ФЭЦ2. Изменение ориентации поля деформации отдельных структур (знаков у параметров R_1, R_2) для связанной структуры из рис. 2*в* с совпадающими центрами тяжести приводит к существенной перестройке поля деформации связанной структуры (рис. 3). При этом возможно появление внутренней области с регулярным поведением поля деформации (рис. 3, *а*, *б*) внутри фрактальной дыры. При этом поведение аттрактора из рис. 1*в* сохраняется и не зависит от изменения знаков R_1, R_2.

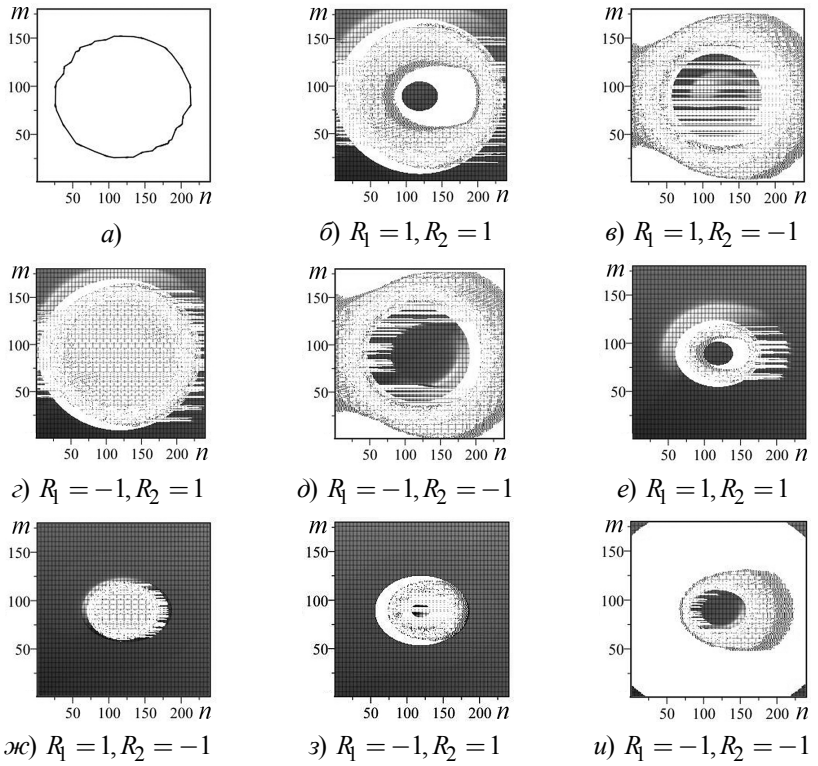


а) $R_1 = 1, R_2 = -1$ *б*) $R_1 = -1, R_2 = 1$ *в*) $R_1 = -1, R_2 = -1$

Рис. 3. Сечения $u \in [0;1]$ (вид сверху) связанных структур ФЭЦ1-ФЭЦ2 с совпадающими центрами тяжести для разных знаков R_1, R_2

Далее рассмотрим структуры ФКТ1-ФЭЦ2, ФЭЦ1-ФКТ2, у которых один из аттракторов является реальным, а другой – мнимым. Примером отдельных структур с мнимым аттрактором являются ФКТ1, ФКТ2, а с реальным аттрактором – ФЭЦ2, ФЭЦ1. Наличие мнимого аттрактора у ФКТ1 влияет на поведение реального аттрактора ФЭЦ2 всей структуры ФКТ1-ФЭЦ2 (рис. 4*а*). Для связанной структуры на кривой эллиптического типа появляются искажения по сравнению с гладкими кривыми (рис. 1, *а*, *б*), внутренняя кривая (рис. 1*в*) исчезает. Сечения поля деформации $u \in [0;1]$ структуры ФКТ1-ФЭЦ2 при разных знаках R_1, R_2 приведены на рис. 4, *б-д*. Наблюдается появление внутренних областей с регулярным (рис. 4, *б*, *д*) и структурированным (рис. 4, *в*, *г*) поведением поля деформации. Сечения поля деформации ФЭЦ1-ФКТ2 при разных знаках R_1, R_2 даны на рис. 4, *е-и*. Основные особенности поведения поля деформации

(наличие внутренних областей с регулярным (рис. 4, *е*, *и*) и структурированным (рис. 4, *ж*, *з*) поведением) сохраняются. Однако появляются внешние области с регулярным поведением (рис. 4, *е*-*и*), появление «наплыва» (искажение регулярного поведения) вблизи структуры ФЭЦ1-ФКТ2 (рис. 4*е*). Это связано с наличием мнимого аттрактора и влиянием стохастического процесса от ФКТ2 на ФЭЦ1.



а) *б*) $R_1 = 1, R_2 = 1$ *в*) $R_1 = 1, R_2 = -1$

г) $R_1 = -1, R_2 = 1$ *д*) $R_1 = -1, R_2 = -1$ *е*) $R_1 = 1, R_2 = 1$

ж) $R_1 = 1, R_2 = -1$ *з*) $R_1 = -1, R_2 = 1$ *и*) $R_1 = -1, R_2 = -1$

Рис. 4. Сечения $u \in [0;1]$ (вид сверху) связанных ФКТ1-ФЭЦ2 (*б*, *в*, *г*, *д*), ФЭЦ1-ФКТ2 (*е*, *ж*, *з*, *и*) структур с совпадающими центрами тяжести для разных R_1, R_2. Аттрактор (*а*) связанной ФКТ1-ФЭЦ2 структуры

Выводы

Показано, что в модельной наносистеме возможно образование связанных структур с дырами на основе отдельных фрактальных структур. Поведение аттракторов (реальных и мнимых), поля деформации,

типа стохастического процесса для отдельной фрактальной структуры можно контролировать выбором управляющих параметров (значений полуосей, положений центров тяжести). В связанной фрактальной структуре дополнительно появляется возможность управления с помощью взаимной ориентации полей деформации отдельных структур. Для связанной структуры показано взаимовлияние аттракторов и отдельных стохастических процессов друг на друга; возможны эффекты перестройки и движения фрактальных структур относительно друг друга.

Литература

1. Нелинейности в периодических структурах и метаматериалах / под ред. Ю.С. Кившаря и Н.Н. Розанова. – М.: Физматлит, 2014. – 384 с.

2. Tosi G., Christmann G. et al. Sculpting oscillators with light within a nonlinear quantum fluid // Nature physics. – 2012. V. 8. No 3. – P. 190-194.

3. Schneider U., Hackermüller L. et al. Fermionic transport and out-of-equilibrium dynamics in a homogeneous Hubbard model with ultracold atoms // Nature physics. – 2012. V. 8. No 3. – P. 213-218.

4. Abramov V.S. Pairs of Vortex-Antivortex and Higgs Boson in a Fractal Quantum System // CMSIM Journal. – 2017. No 1. – P. 3-15.

5. Abramov V.S. Transient Processes in a Model Multilayer Nanosystem with Nonlinear Fractal Oscillator // CMSIM Journal. – 2015. No 1. – P. 3-15.

6. Abramova O.P., Abramov A.V. Attractors and Deformation Field in the Coupled Fractal Multilayer Nanosystem // CMSIM Journal. – 2017. No 1. – P. 16-26.

7. Абрамова О.П. Фрактальные объемные структуры и аттракторы в многослойной наносистеме // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. – 2016. № 2. – С. 55-64.

BEHAVIOR OF THE DEFORMATION FIELD OF COUPLED FRACTAL STRUCTURES WITH HOLES

O.P. Abramova, S.V. Abramov

Donetsk National University

Mutual influence of attractors (real and imaginary), deformation field and types of the separate stochastic processes in the coupled fractal structures with holes is investigated. The behavior of the deformation field can be controlled by the choice of governing parameters (values of semi-axis, positions of the centers of gravity). There are possible effects of alteration and moving of the fractal structures relative to each other

Keywords: coupled fractal structures, attractors, deformation field, stochastic processes, holes

УДК 539.213; 530.1

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ КРУПНОМАСШТАБНЫХ ФРАКТАЛЬНЫХ СТРУКТУР ВСЕЛЕННОЙ

В.С. Абрамов

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина
vsabramov@mail.ru

Моделирование полей деформации реликтового излучения и взрыва сверхновой выполнено на примере полей деформации фрактальной дислокации (совокупности квантовых точек малого радиуса) и квантовой точки (с мнимым аттрактором). Показано, что наличие фрактальной квантовой точки приводит к искривлению ядра фрактальной дислокации. Изменение размеров квантовой точки приводит к ярко выраженной анизотропии поля деформации

Ключевые слова: фрактальная дислокация, фрактальная квантовая точка, стохастические поля деформации, крупномасштабные структуры Вселенной, моделирование

Введение

Развитие техники пространственного сканирования позволило определять скорость расширения Вселенной, космические расстояния до далеких Галактик с большой точностью. Это привело к открытию ускоренного расширения Вселенной [1]. Последние достижения исследования Вселенной обсуждались на STARMUS-2016 [2]. На основе анализа взрыва сверхновых типа 1a определено новое значение постоянной Хаббла H_{01} [3]. В [3] обсуждаются возможные причины ускоренного расширения Вселенной из-за наличия: нулевой энергии и давления вакуума (темной энергии); неизвестного динамического поля (возможно поля Хиггса, [4]). Возможные причины анизотропного расширения Вселенной, природы темной энергии, анизотропии реликтового излучения обсуждались в [5]. Крупномасштабные структуры Вселенной (пустоты и сверхскопления Галактик) образуют «космическую паутину» и влияют на температуру реликтового излучения. При этом реликтовые фотоны, проходящие через пустоты, являются более холодными по сравнению с реликтовыми фотонами, которые проходят через сверхскопления Галактик. Информацию о столкновениях сверхмассивных черных дыр на ран-

них этапах формирования Вселенной может сохранять реликтовое излучение [6]. При этом на карте фонового микроволнового излучения Вселенной возможно появление кольцевых структур. При слиянии двух черных дыр [7] возможно излучение гравитационных волн [8]. Гипотеза иерархического строения Вселенной стала основой для фрактальной космологии. В качестве отдельных элементов крупномасштабных фрактальных структур рассматривают Галактики, скопления и сверхскопления Галактик, наибольшее сверхскопление – Великий Аттрактор, стены, филоменты, войды [9]. Наномасштабные фрактальные структуры (на основе теории дробного исчисления) исследовались в ряде работ [10-14].

В [10, 11] установлены связзи параметров бозона Хиггса и пары вихрь-антивихрь во фрактальной квантовой системе. Квантовые точки, аттракторы и поведение поля деформации связанных фрактальных многослойных наносистем исследованы в [12-14]. При создании фрактальной модели Вселенной указанные модели для фрактальных дислокации, квантовой точки можно использовать как отдельные элементы при моделировании поля деформации реликтового излучения и взрыва сверхновых.

Целью работы является моделирование поля деформации связанной фрактальной системы (дислокация – квантовая точка) как отдельного элемента крупномасштабной фрактальной структуры Вселенной.

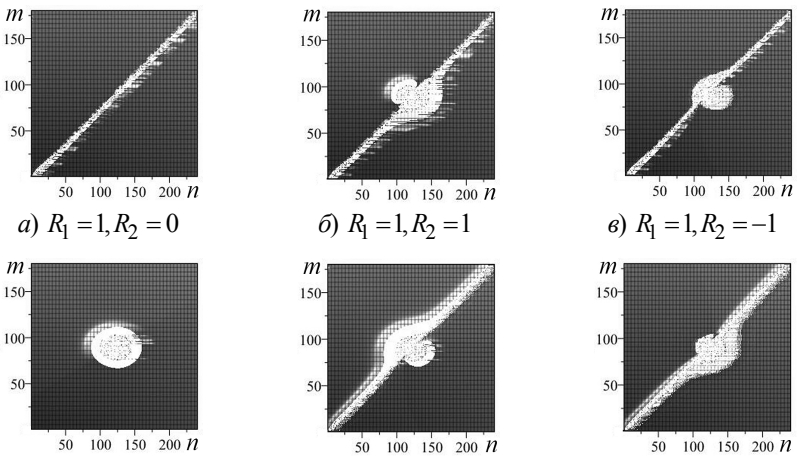
Моделирование поля деформации связанной системы: дислокация – квантовая точка

Функции B_{Gi}, описывающие отдельные элементы крупномасштабных фрактальных структур Вселенной, нелинейным образом связаны с безразмерной функцией смещения поля деформации u связанной системы. Поведение таких полей деформации является существенно стохастическим. Поля деформации реликтового излучения и взрыва сверхновой моделируем полями деформации фрактальной дислокации (совокупностью квантовых точек малого радиуса) и квантовой точки (с мнимым аттрактором), соответственно. По аналогии с [10, 11] поведение функции u для связанной системы (фрактальная дислокация – фрактальная квантовая точка) сначала моделируем (рис. 1) выражениями при постоянных модулях $k_{\text{i}} = 0.5$ эллиптических функций

$$u = \sum_{\mathrm{i}=1}^{2} R_{\mathrm{i}}(1-\alpha_{\mathrm{i}})B_{G\mathrm{i}} / Q_{\mathrm{i}}\,; \quad B_{G\mathrm{i}} = 1 - 2sn^2(u-u_{0\mathrm{i}}, k_{\mathrm{i}})\,; \qquad (1)$$

$$Q_1 = p'_{11}n + p'_{21}m\,; \quad Q_2 = p'_{02} - b_{12}(n-n_{02})^2 / n_{c2}^2 - b_{22}(m-m_{02})^2 / m_{c2}^2\,. \qquad (2)$$

Моделирование выполняется на дискретной решетке $N_1 \times N_2 \times N_3$, узлы которой задаются целыми числами n, m, j ($n = \overline{1, N_1}$; $m = \overline{1, N_2}$; $j = \overline{1, N_3}$), $N_1 = 240$, $N_2 = 180$. Здесь α_{i}=0.5 – фрактальные размерности поля деформации u вдоль оси Oz ($\alpha_{\mathrm{i}} \in [0,1]$); $u_{0\mathrm{i}} = 29.537$ – постоянные (критические) смещения. Фрактальная дислокация ($\mathrm{i} = 1$) описывается параметрами $p'_{11} = -0.0739$; $p'_{21} = 0.0975$. Фрактальная квантовая точка ($\mathrm{i} = 2$) описывается параметрами $p'_{02} = -3.457 \cdot 10^{-11}$; $b_{12} = b_{22} = 1$; $n_{02} = 119.1471$; $m_{02} = 89.3267$; $n_{c2} = 44.4793$; $m_{c2} = 25.7295$. Параметры R_{i} определяют ориентацию полей деформации отдельных структур в связанной системе. Функции смещения (1) являются действительными.



а) $R_1 = 1, R_2 = 0$ *б*) $R_1 = 1, R_2 = 1$ *в*) $R_1 = 1, R_2 = -1$

г) $R_1 = 0, R_2 = 1$ *д*) $R_1 = -1, R_2 = 1$ *е*) $R_1 = -1, R_2 = -1$

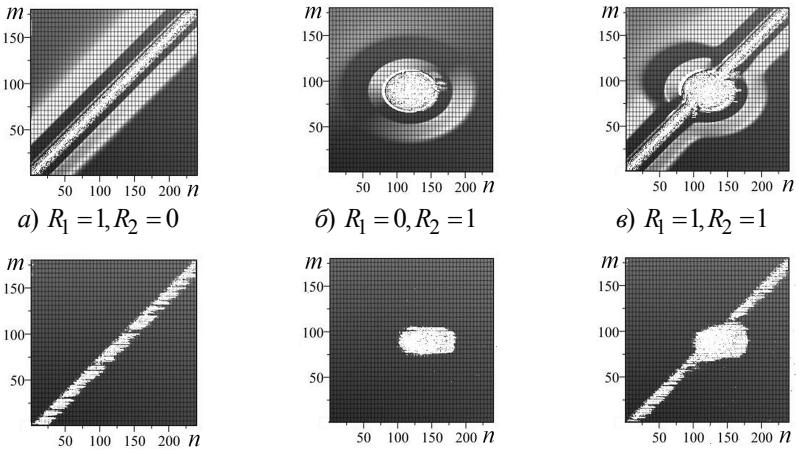
Рис. 1. Сечения $u \in [-0.5; 0.5]$ (вид сверху) для дислокации (*а*), квантовой точки (*г*), связанной системы (*б*, *в*, *д*, *е*) с постоянными модулями k_{i}

Вблизи области локализации фрактальной квантовой точки наблюдается искривление ядра фрактальной дислокации (рис. 1, *б*, *в*, *д*, *е*). Характер этого искривления зависит от взаимной ориентации полей деформации отдельных структур (рис. 1, *а*, *г*) в связанной системе. При разной ориентации (рис. 1, *в*, *д*) форма этого искривления является выпуклой; при одинаковой ориентации (рис. 1, *б*, *е*) – вогнутой. При моделировании ранних этапов формирования Вселенной или переходных эффектов после взрыва сверхновой типа 1*a* мы полагаем, что модули k_{i} являются функциями от индексов n, m, j объемной дискретной решетки. Наличие переменных модулей k_{i} приводит к двум ветвям u_1, u_2 решений нелинейных уравнений

$$u_1 = \sum_{\mathrm{i}=1}^{2} R_{\mathrm{i}}\, k_{\mathrm{i}}^2\, B_{\mathrm{G1i}}\,; \quad B_{G1\mathrm{i}} = 1 - 2sn^2(u_1 - u_{0\mathrm{i}}, k_{\mathrm{i}})\,; \quad k_{\mathrm{i}}^2 = (1-\alpha_{\mathrm{i}})/Q_{\mathrm{i}}\,; \quad (3)$$

$$u_2 = \sum_{\mathrm{i}=1}^{2} R_{\mathrm{i}}\, k_{\mathrm{i}}^2\, B_{\mathrm{G2i}}\,; \quad B_{G2\mathrm{i}} = 1 - 2sn^2(u_2 - u_{0\mathrm{i}}, k_{\mathrm{i}}')\,; \quad k_{\mathrm{i}}' = (1-k_{\mathrm{i}}^2)^{1/2}\,. \quad (4)$$

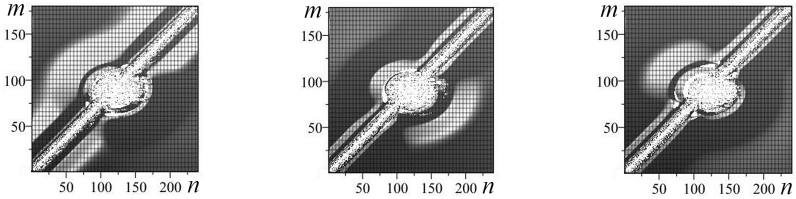
Функции смещения u_1 из (3) (рис. 2, 3) и u_2 из (4) (рис. 4, 5) становятся комплексными. При этом волновое поведение, характер эффективного затухания для u_1 и u_2 различны.



а) $R_1 = 1, R_2 = 0$ *б*) $R_1 = 0, R_2 = 1$ *в*) $R_1 = 1, R_2 = 1$

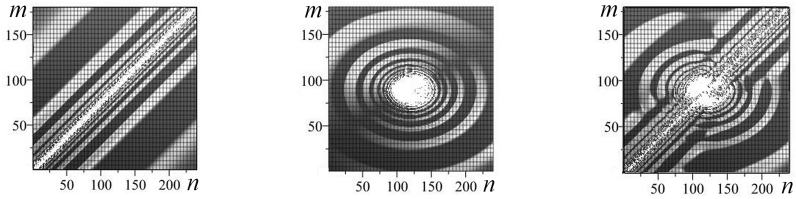
г) $R_1 = 1, R_2 = 0$ *д*) $R_1 = 0, R_2 = 1$ *е*) $R_1 = 1, R_2 = 1$

Рис. 2. Сечения $\mathrm{Re}(u_1) \in [-0.5; 0.5]$ (*а*, *б*, *в*), $\mathrm{Im}(u_1) \in [-10^{-10}; 10^{-10}]$ (*г*, *д*, *е*) (вид сверху) для дислокации (*а*, *г*), квантовой точки (*б*, *д*), связанной системы (*в*, *е*) с переменными модулями k_{i} для ветви u_1

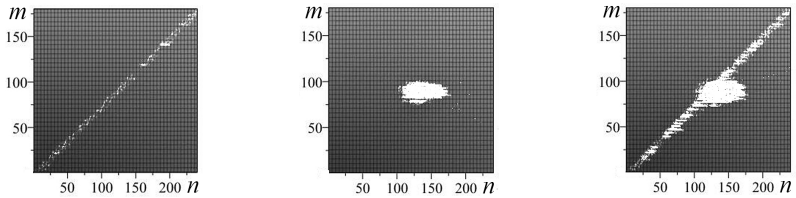


а) $R_1 = 1, R_2 = -1$ *б*) $R_1 = -1, R_2 = 1$ *в*) $R_1 = -1, R_2 = -1$

Рис. 3. Поведение сечения $\mathrm{Re}(u_1) \in [-0.5; 0.5]$ (вид сверху) для ветви u_1 связанной системы с переменными модулями k_i при изменении знаков R_1, R_2



а) $R_1 = 1, R_2 = 0$ *б*) $R_1 = 0, R_2 = 1$ *в*) $R_1 = 1, R_2 = 1$



г) $R_1 = 1, R_2 = 0$ *д*) $R_1 = 0, R_2 = 1$ *е*) $R_1 = 1, R_2 = 1$

Рис. 4. Сечения $\mathrm{Re}(u_2) \in [-0.5; 0.5]$ (*а*, *б*, *в*), $\mathrm{Im}(u_2) \in [-10^{-10}; 10^{-10}]$ (*г*, *д*, *е*) (вид сверху) для дислокации (*а*, *г*), квантовой точки (*б*, *д*), связанной системы (*в*, *е*) с переменными модулями k_i для ветви u_2

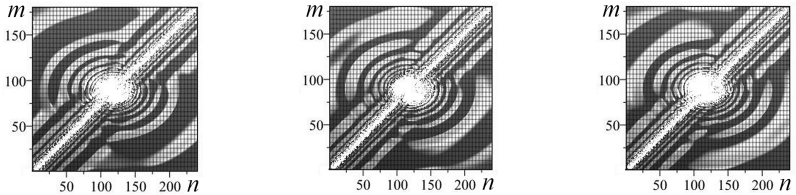
Наличие переменных параметров приводит к появлению эффективных затуханий (рис. 2, *г*, *д*, *е*; рис. 4, *г*, *д*, *е*), волновому поведению (рис. 2, *а*, *б*, *в*; рис. 4, *а*, *б*, *в*) функции смещения как отдельных дислокации, квантовой точки, так и всей связанной системы.

Изменение знаков у параметров R_i приводит к смене ориентации полей деформации отдельных структур в связанной системе (рис. 3, 5).

При этом поведения для первой (3) u_1 (рис. 3) и второй (4) u_2 (рис. 5) ветвей функции смещения существенно различаются: наблю-

даются изменения волнового поведения, количества ям и гребней, характера выпуклостей и вогнутостей вблизи квантовой точки.

Поведение поля деформации связанной системы существенно зависит от соотношений между характерными размерами $N_1 \times N_2$ исследуемой области и значениями полуосей n_{c2}, m_{c2} у квантовой точки (рис. 6). Функция u_2 из (4) вновь является комплексной с ярко выраженным стохастическим поведением.



а) $R_1 = 1, R_2 = -1$ *б*) $R_1 = -1, R_2 = 1$ *в*) $R_1 = -1, R_2 = -1$

Рис. 5. Поведение сечения $\mathrm{Re}(u_2) \in [-0.5; 0.5]$ (вид сверху) для ветви u_2 связанной системы с переменными модулями k_i при изменении знаков R_1, R_2

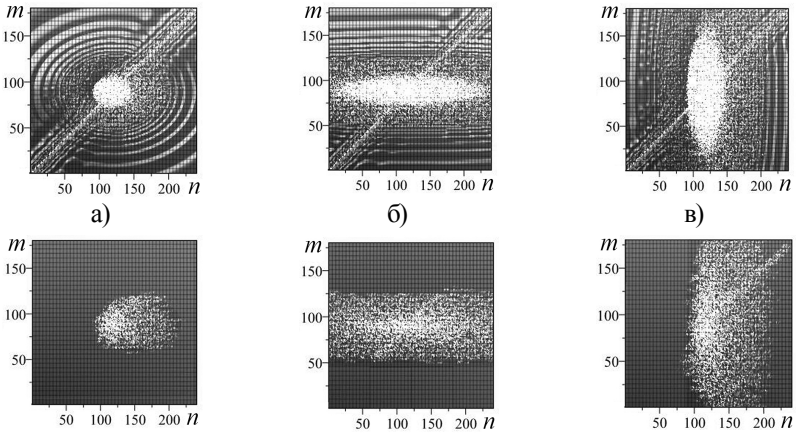


Рис. 6. Сечения $\mathrm{Re}(u_2) \in [-10; 10]$ (*а*, *б*, *в*), $\mathrm{Im}(u_2) \in [-10; 10]$ (*г*, *д*, *е*) (вид сверху) связанной системы с переменными модулями k_i для u_2 и полуосями для квантовой точки: $3n_{c2}$; $3m_{c2}$ (*а*, *г*); $12n_{c2}$; $3m_{c2}$ (*б*, *д*); $3n_{c2}$; $12m_{c2}$ (*в*, *е*)

Внутри области волнового поведения (рис. 6, *а*, *б*, *в*) наблюдаются фрактальные дыры с пропорциональными полуосями (рис. 6*а*), вытянутой вдоль оси On (рис. 6*б*) и вдоль оси Om (рис. 6*в*) эллиптическими структурами. При этом возникает ярко выраженное явление анизотропии фрактальной дыры. Характер анизотропии для эффективного затухания (рис. 6, *г*, *д*, *е*) согласуется с анизотропией фрактальной дыры.

Выводы

Поведение поля деформации связанной системы (дислокация – квантовая точка) исследуется в рамках фрактальной модели Вселенной. Показано, что наличие фрактальной квантовой точки приводит к искривлению ядра фрактальной дислокации. Переменные параметры приводят к появлению комплексных функций смещения u. Для $\mathrm{Re}(u)$ характерно волновое поведение, а $\mathrm{Im}(u)$ приводит к эффективному затуханию. Изменение размеров квантовой точки приводит к ярко выраженной анизотропии поля деформации, изменению структуры фрактальных дыр.

Полученные результаты могут быть использованы при описании параметров отдельных элементов крупномасштабных фрактальных структур Вселенной (например, стен, войдов), при построении динамических моделей отдельных этапов формирования Вселенной.

Литература

1. Riess A. et al. Observational Evidence from Supernovae for an Accelerating Universe and a Cosmological Constant // Astronomical Journal. – 1998. No 116. – P. 1009-1038.

2. STARMUS-2016 (http://www.starmus.com/tag/starmus-2016-en).

3. Рисс А. Взрывы звезд и расширение вселенной // Вселенная, пространство, время. – 2016. № 9 (146). – С. 4-9.

4. Higgs P.W. Broken Symmetries and the Masses of Gauge Bosons // Phys. Rev. Lett. – 1964. No 13. – P.508-509.

5. Грин Б. Теория струн и природа реальности // Вселенная, пространство, время. – 2016. № 10 (147). – С. 5-13.

6. Пенроуз Р. Мода, вера и фантазия в новой физике Вселенной // Вселенная, пространство, время. – 2016. № 11 (148). – С. 4-10.

7. Hawking S. Black Holes and Baby Universes. – Transworld Publishers, 1994. – 192 p.

8. Abbott B.P. et al. Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger // Phys. Rev. Lett. – 2016. No 116 (061102). – P.1-16.

9. Новосядлый Б. Войды – «Пустыни» Вселенной // Вселенная, пространство, время. – 2016. № 6 (143). – С. 4-11.

10. Абрамов В.С. Бозон Хиггса во фрактальных квантовых системах с активными наноэлементами // Изв. РАН. Сер. физ. – 2016. Т. 80. № 7. – С. 938-944.

11. Abramov V.S. Pairs of Vortex-Antivortex and Higgs Boson in a Fractal Quantum System // CMSIM Journal. – 2017. No 1. – P. 3-15.

12. Абрамов В.С. Квантовые точки во фрактальной многослойной наносистеме // Изв. РАН. Сер. физ. – 2017. Т. 81. № 5. – С. 625-632.

13. Abramova O.P. Attractors and Deformation Field in the Coupled Fractal Multilayer Nanosystem // CMSIM Journal. – 2017. No 1. – P. 16-26.

14. Abramova O.P., Abramov S.V. Governance of Alteration of the Deformation Field of Fractal Quasi-two-dimensional Structures in Nanosystems // CMSIM Journal. – 2013. No 3. – P. 367-375.

15. Климишин И.А. Элементарная астрономия. – М.: Наука, 1991. – 464 с.

16. Сверхтекучесть гелия-3: сборник статей. – М.: Мир, 1977. – 288 с

SIMULATION OF ELEMENTS OF LARGE-SCALE FRACTAL STRUCTURES OF THE UNIVERSE

V.S. Abramov

Donetsk Institute for Physics and Engineering named after A.A. Galkin

Simulation of the deformation fields of relic radiation and supernova bust is performed using the example of deformation fields of the fractal dislocation (the set of quantum dots with small radius) and the quantum dot (with an imaginary attractor). It is shown that the presence of the fractal quantum dot leads to a curvature of the fractal dislocation core. The change in the size of the quantum dot leads to a pronounced anisotropy of the deformation field

Keywords: fractal dislocation, fractal quantum dot, stochastic deformation fields, large-scale structure of the Universe, simulation

УДК 517.11

ОСОБЕННОСТИ ВОЛН, ФОРМИРУЮЩИХСЯ В ЦЕПОЧКЕ НЕСВЯЗАННЫХ ЛИНЕЙНЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Е.Е. Гетманова

ООО “Дистанционный репетитор”, г. Москва
elge@mail.ru

Аналитически и численно показано, что выбор времени начала действия повторных импульсов позволяет получить в цепочке несвязанных линейных маятников с плавно меняющимися частотами, одновременно бегущие и стоячие волны, созданные разными наборами маятников

Ключевые слова: волны в системе несвязанных линейных осцилляторов, периодические гармонические импульсы силы

Данная работа посвящена изучению влияния на систему, представляющую несвязанные линейные осцилляторы (маятники) с плавно меняющими собственными частотами, повторных импульсов силы. Показано, что действие повторных импульсов, начало которых выбрано определенным образом, приводит к тому, что часть маятников формируют бегущие волны, а часть – стоячие волны. Таким образом, часть маятников накапливает энергию, которая сохраняется в определенном интервале времени.

В работе [1] показано, что в результате действия единичного импульса силы $F(t) = F_0 \sin(\omega t)$ ($0 \le t \le T$, $T = \frac{2\pi}{\omega}$) на несвязанные линейные осцилляторы с плавно меняющимися частотами указанные осцилляторы выполняют согласованное волновое движение, то есть в рассмотренной системе формируются волны. Маятники, входящие в группу, которая формирует волну, имеют в каждый момент времени одинаковую разность фаз. Волны, имеющие одинаковую длину, объединяются в ансамбли. Минимальное число волн входит в ансамбль волны основной гармоники. Ансамбли высших гармоник включают большее число волн. При числовых значениях $\omega = 10^3, \text{с}^{-1}$, $\omega_{0s} = 5s, \text{с}^{-1}$ ($s < 400$ количество осцилляторов) число волн в ансамблях в интервале $T \le t \le 100{,}5$ вначале последовательно (на единицу) уменьшается, достигая минимального значения (в

интервале, близком к значению $100{,}5T$, формируется две волны), а затем последовательно увеличивается. Время, за которое система выполняет последовательное уменьшение, затем увеличение числа волн в ансамблях, и возвращается в исходное состояние ($t = T$), при указанных числовых значениях составляет $200T$

Существуют моменты времени, при которых разность фаз между осцилляторами в волновых группах, кратна 2π, число волн равно p, длины волн в ансамбле в указанное время максимальны. Одновременно существуют ансамбли, кратные $2p$, $3p$ и т.д. (высшие гармоники).

Действия последующих импульсов создают новые ансамбли, которые полностью повторяют характер изменения ансамблей, образованных после действия начального импульса, но существуют с задержкой во времени.

Образование p волн в ансамблях, созданных после действия повторных импульсов, происходит в различное время, но если в одном из ансамблей в некоторый момент времени между осцилляторами устанавливается разность фаз, кратная 2π, а в двух других ансамблях в этот же момент времени между теми же группами маятников устанавливается разность фаз $2n\pi \pm \Delta\varphi$, $\Delta\varphi \le 0{,}4\pi$, то указанные волны проявляются (визуализируются). При большей разности фаз волны в цепочке маятников не наблюдаются. Действие повторных импульсов, как правило, приводит к уменьшению гармоник высших порядков, что затрудняет процесс плавной трансформации, затягивает время существования волн p и вызывает быстрый переход в новое состояние.

Положим, начало действия второго и третьего импульсов силы соответствует $T_1 = 99T$ и $T_3 = 101T$. Данные моменты выбраны с учетом того, что вблизи указанных моментов формируется две волны. В результате по цепочке распространяются волны, которые являются суперпозицией от действия начального импульса $0 \le t \le T$ (первый ансамбль), второго $99T \le t \le 100T$ (второй ансамбль) и третьего $101T \le t \le 102T$ (третий ансамбль) импульсов. Каждый маятник входит в группы формирующие волны в первом, втором и третьем ансамбле и его смещение является суммой смещений в каждой группе. Можно показать, что положения осцилляторов в произвольный момент t_1 и $t_1 + T$ связаны следующим образом. Четные

маятники, создающие волны первого и второго ансамблей, в момент t_1 совпадают с положением четных маятников третьего и первого ансамблей в момент $t_1 + T$ и формируют падающую волну. Нечетные маятники первого и второго ансамблей в момент t_1 меняют фазу на π и с противоположным знаком определяют положение данных маятников в третьем и первом ансамблях в момент $t_1 + T$, создавая отраженную волну.

На рис. 1 показано положение маятников в последовательные моменты времени $t = 205T$ и $t = 206T$. Цифры 1, 2, 3 показывают ансамбли волн, образованные в результате действия первого (начального), второго и третьего импульсов, соответственно. Осциллятор $s = 22$ имеет одинаковое смещение в третьем ансамбле в момент $t = 206T$ и в первом ансамбле волн в момент $t = 205T$ (рис. 1а). Положения осциллятора $s = 32$ совпадают во втором ансамбле в момент $t = 205T$ и в первом в момент $t = 206T$ (рис. 1б), а положения осциллятора $s = 41$ во втором ансамбле в момент $t = 205T$ и в первом в момент $t = 206T$ противоположны по знаку (рис. 1в).

Также как противоположны по знаку (рис. 1в) положения $s = 43$ в первом ансамбле в момент $t = 205T$ и в третьем в момент $t = 206T$ (рис. 1г).

Падающие и отраженные волны существуют во всей цепочке маятников, однако проявляют себя различно. Выбранные моменты времени начала действия второго и третьего импульсов приводят к визуализации двух волн из нечетных (рис. 2, 4) и четных (рис. 3, 5) маятников вблизи $200T$. На рисунках показаны положения маятников в моменты $203T$, $203{,}5T$, $204T$, $204{,}5T$, $205T$, $205{,}5T$, обозначенные цифрами 1, 2, 3, 4, 5, 6. Из приведенного следует, что низкочастотные маятники $s \le 50$ колебаний смещаются со временем, что свидетельствует о том, что отраженная волна незначительна. Маятники в диапазоне $50 < s < 150$ (рис. 4) колебания совершают, а значит падающая и отраженная волны имеют соизмеримую амплитуду. Наконец, осцилляторы $150 < s < 250$ (рис. 5) имеют приблизительно одинаковую амплитуду падающей и отраженной волны, что и приводит к появлению стоячей волны.

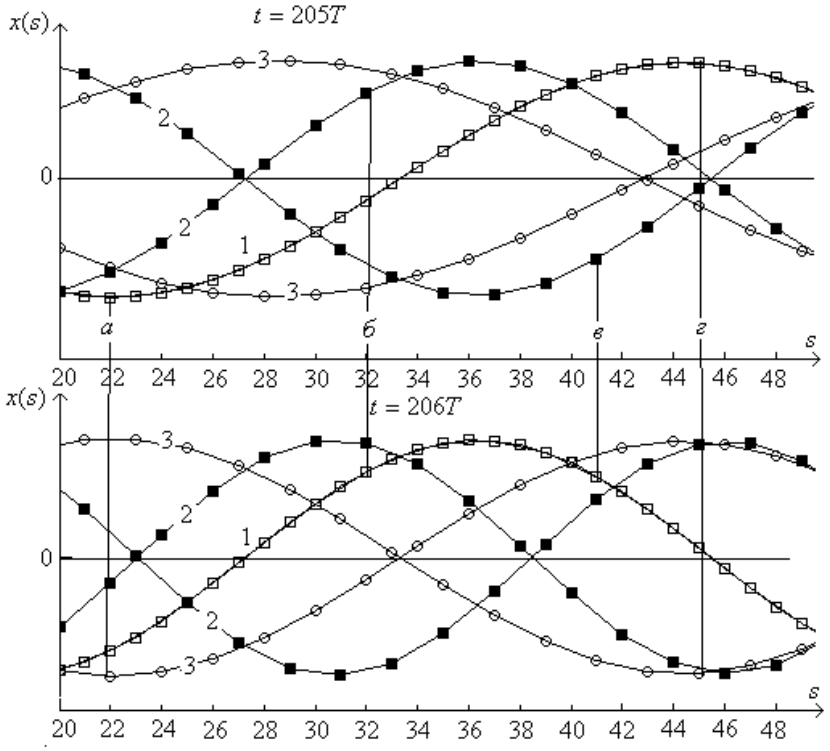

x(s)
t = 205T
3
2
2
1
3
0
а
б
в
г
s
20 22 24 26 28 30 32 34 36 38 40 42 44 46 48
x(s)
t = 206T
3
2
1
2
3
0
s
20 22 24 26 28 30 32 34 36 38 40 42 44 46 48

Рис. 1

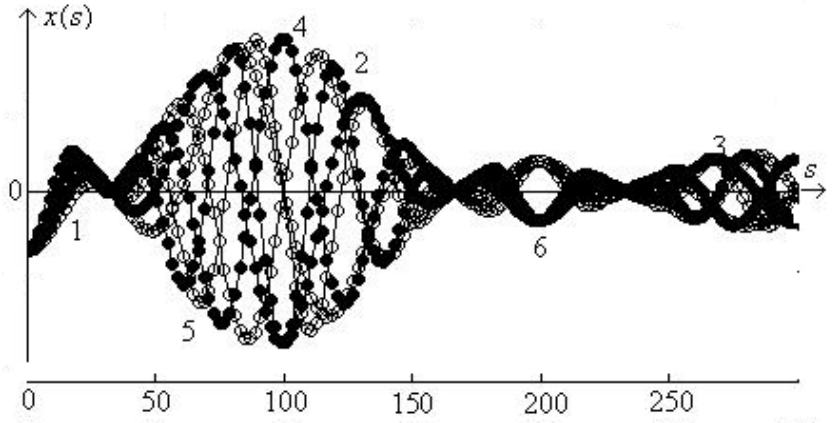

x(s)
4
2
3
0
s
1
6
5
0 50 100 150 200 250

Рис. 2

Чтобы наблюдать стоячие волны в системе осцилляторов необходимо, начало действия импульсов выбирать незначительно отличающимся от T_p-моментов времени, где волны после действия начального импульса имеют разность фаз кратную 2π между маятниками в волне.

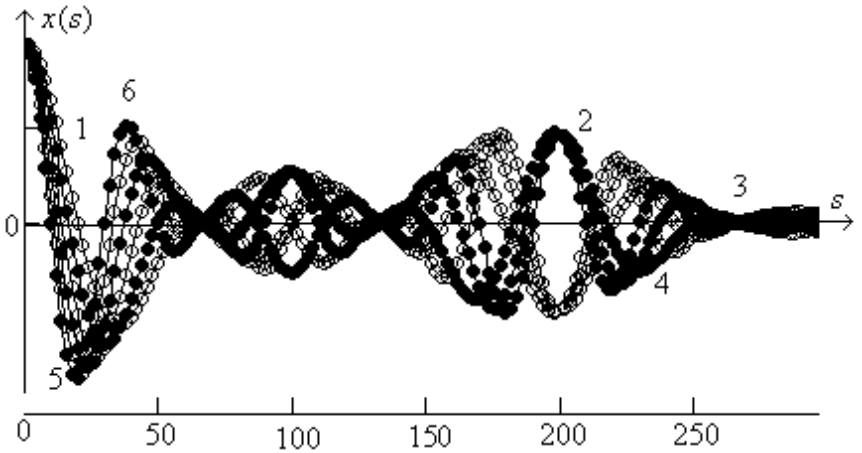


Рис. 3

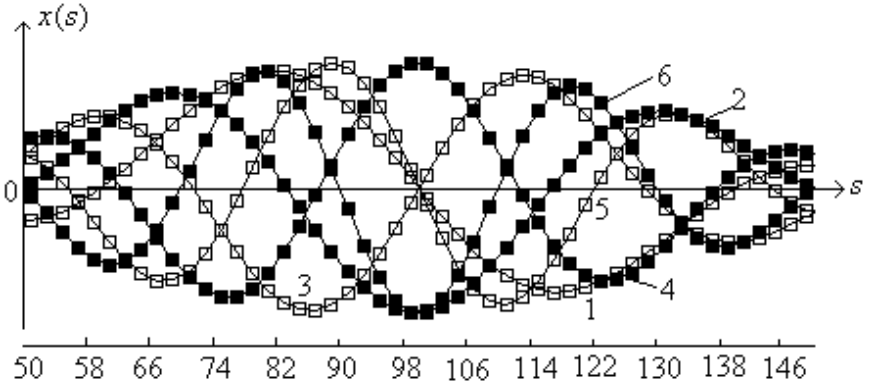


Рис. 4

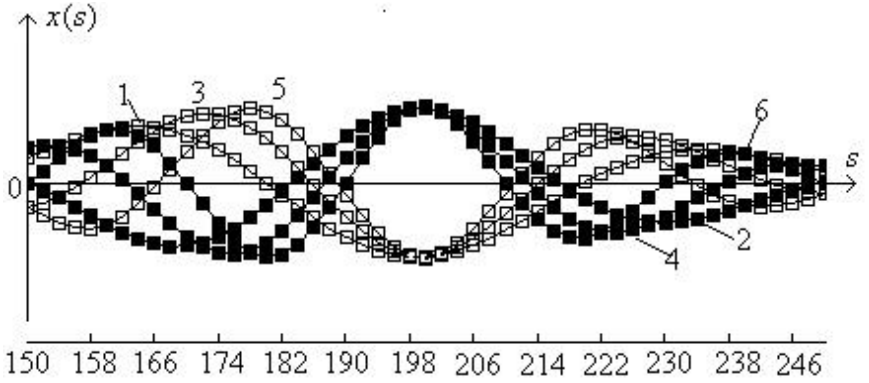


Рис. 5

К примеру, пять волн из соответствующих групп маятников имеют минимальную разность фаз в моменты $40{,}5T$; $80{,}5T$; $120{,}5T$; $160{,}5T$ (в интервале полного цикла колебаний). Для создания стоячих волн из указанного ансамбля необходимо воздействовать на систему импульсами, начало которых совпадает с $T_1 = 39T$, $T_3 = 41T$, $T_5 = 79T$, $T_7 = 81T$, $T_9 = 119T$, $T_{11} = 121T$, $T_{13} = 159T$, $T_{15} = 161T$.

При таком выборе моментов начала действия импульсов, четыре волны, в определенных интервалах времени, будут сливаться в одну. Положение осцилляторов показано в моменты $406T$ и $407T$, маятники $50 < s < 150$ формируют стоячую волну.

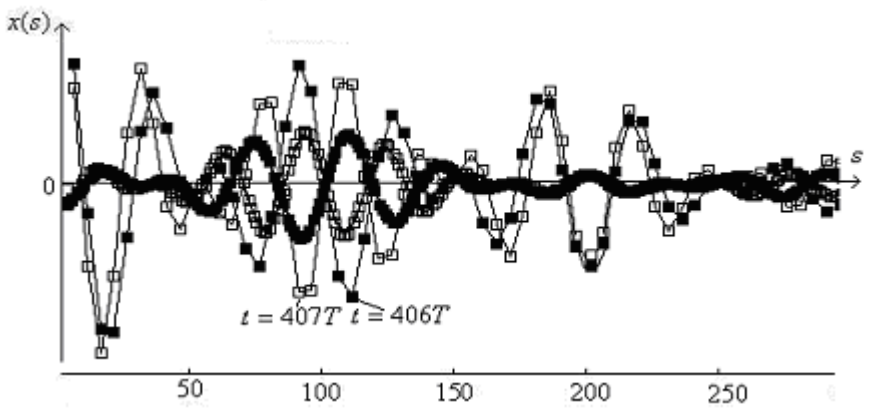


Рис. 6

Выполненные исследования показали, что выбор времени действия повторных импульсов позволяет сформировать стоячую волну в определенном наборе несвязанных линейных маятников. Этот набор маятников будет концентрировать энергию в течение некоторого интервала времени.

Литература

1. Гетманова Е.Е. Образование волн в системе несвязанных линейных осцилляторов // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIII Междунар. семинара. Воронеж: Изд. ФГБОУ ВПО «ВГТУ». 2014. Ч. 1. С. 54-60.

FEATURES OF WAVES FORMED IN THE UNBOUND CHAIN OF LINEAR OSCILLATORS

E.E. Getmanova

Company “DistTutor”, Moscow

Shown analytically and numerically that the choice of a start time of the repeat pulse in the chain of the unbound linear pendulum with a gradually changing frequencies at a time of traveling and standing waves created by different sets of pendulums

Keywords: waves in the system of unlinked linear pendulums, periodic harmonics impulses of the forces

УДК 539:537.226.4

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ИМПУЛЬСОВ ТОКА ПРИ ПОСТОЯННОЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ НАГРУЗКЕ СЕГНЕТОКЕРАМИЧЕСКОЙ ПЛАСТИНЫ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ПРОТИВ ВЕКТОРА ОСТАТОЧНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ

П.А. Бакулин, Л.В. Жога, Е.М. Пиунов, И.В. Валешний

Волгоградский государственный технический университет, Институт архитектуры и строительства
todestriebe@yandex.ru, levjog@mail.ru

Получены импульсы тока в цепи с образцом ЦТС сегнетокерамики в электромеханических полях. Показаны различия видов импульсов тока при активной и постоянной нагрузке образцов

Ключевые слова: сегнетоэлектрики, моделирование, ток поляризации, механическая нагрузка

Введение

При приложении электрического поля (ЭП) постоянной напряженности к образцу сегнетокерамики в цепи возникает ток утечки, который состоит из сквозного тока проводимости и поляризационного тока [1]. Кроме того, в нём возникают механические напряжения из-за обратного пьезоэффекта и гетерогенной структуры [2]. Нагружение механической нагрузкой (МН) приводит к возникновению импульсов тока, причиной которых является наличие пьезоэффекта и движение дислокаций и доменных границ[3]. Была поставлена задача изучить возможности возникновения импульсов тока при постоянной механической нагрузке.

Методика эксперимента и образцы

Изготовленные на заводе «Аврора» образцы сегнетокерамики ЦТС имели толщину $h = 0{,}7$ мм и диаметр вожженных электродов $d = 20$ мм. Механическое нагружение осуществлялось методом осесимметричного изгиба [3], деформация измерялись с точностью 1 мкм. Для измерения зависимости тока от времени в образце была использована модернизированная схема Мерца [4].

Результаты опытов и обсуждение

Результаты представлены на рис. 1-2. За начало отсчёта взят момент подачи импульса электрического поля (ЭП) постоянной напряженности $E = 1{,}5$ МВ/м. Через 120 секунд создавалось механическое напряжение (МН) $\sigma_1 = 26{,}36$ МПа и оставалось постоянным 120 с. Значению I_0 соответствуют максимальному значению тока при включении ЭП для каждого отдельного образца.

Образцы 1 и 2 находились в деполяризующем поле. Образец 3 – в поляризующем поле.

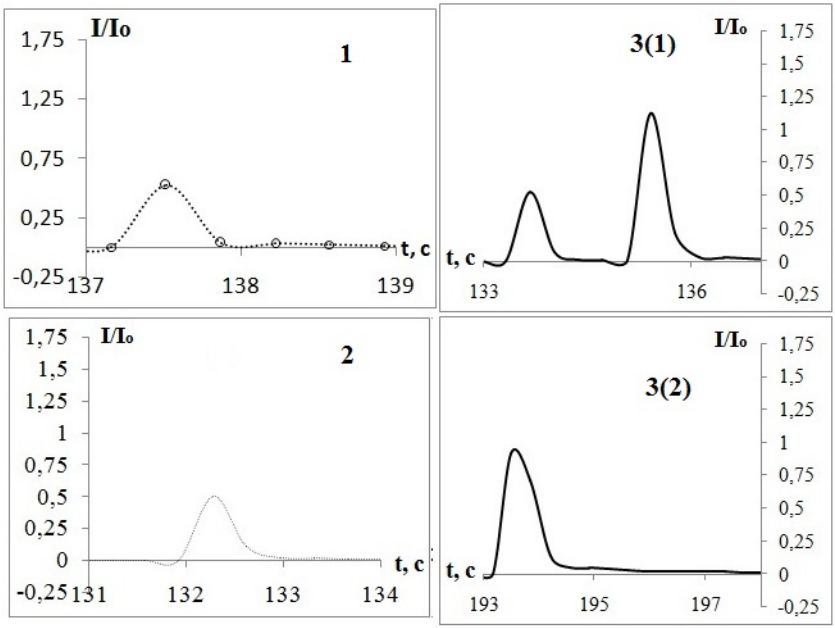


Рис. 1. Формы электрических импульсов, при постоянных ЭП ($E = 1{,}5$ МВ/м) и МН ($\sigma_1 = 26{,}36$ МПа) на образцах

При постоянной нагрузке на образце в его объеме проходит ряд процессов, связанных с кинетикой перестройки сегнетоэлектрических доменов и дислокаций [5] (т.е. образец находится в режиме ползучести, его прогиб увеличивается [6]) и в результате на проводящих электродах появляются свободные поверхностные заряды, которые до этого были связаны объемными дипольными моментами сегнетоэлектрических доменов. Это приводит к протеканию импульсного электрического тока в цепи.

При постоянной нагрузке импульсы – одновершинные. Импульс на рис. 1 (3(1)) можно воспринимать как два идущих друг за другом одновершинных. Длительность подобных импульсов примерно равна 1 с.

Формы импульсов токов при активном приложении МН (рис. 2) для всех образцов сложные, но их можно представить как результат сложения следующих друг за другом простых импульсов.

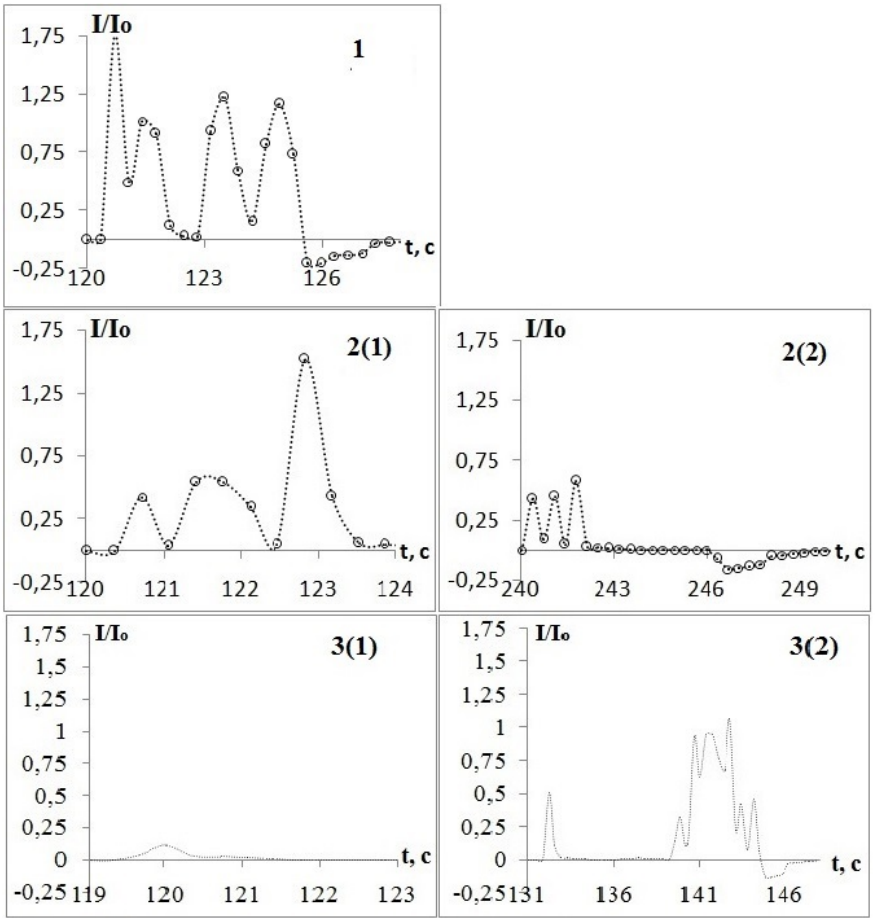


Рис. 2. Импульсы, возникающие в деполяризующем (1, 2(1), 2(2)) и поляризующем (3(1), 3(2)) ЭП при активной МН образца

Можно отметить (рис. 2), что в деполяризующем поле при активном нагружении от момента приложения МН до разрушения образца(1, 2(1), 2(2)) наблюдались серии импульсов, которые следовали один за другим, причем каждый из них был подобен импульсам появляющимся при постоянной механической нагрузке .

Импульсы токов при активном механическом нагружении (рис. 2) отличаются от импульсов, возникающих при постоянной МН, но не приводящих к разрушению образца (рис. 1). При активном нагружении многовершинные импульсы развиваются десятки секунд в течение которых образец разрушается.

Заключение

При постоянной нагрузке в электрической цепи возникают одновершинные импульсы. При активном нагружении в поляризующем поле появляются многовершинные импульсы длительность которых достигает десяти секунд в течение которых образец разрушается. При активном нагружении в деполяризующем поле появляются серии импульсов, каждый из которых подобен импульсу при постоянной МН. Можно предположить что природа импульсов при постоянной нагрузке связана с доменными перестройками и движением заряженных дислокаций в образце, а при активном нагружении с пьезоэффектом причем форма импульса зависит от индуцированных за счет него электрических зарядов на электродах. Серия импульсов в деполяризующем поле можно связать с облегчением доменных переориентаций при воздействии механической нагрузки.

Литература

1. Подгорный Ю.В., Воротилов К.А., Сигов А.С. // Токи утечки в тонких сегнетоэлектрических пленках / ФТТ. – 2012. – Т. 54, В. 5. – С. 859-862.

2. Ueda I., Takeuchi M., Ikegami S., Sato H. Temperature dependence of breakdown field of ceramic BaTiO3 // J. Phys. Soc. Jap. – 1962. – Vol. 17, №10. – P. 1679-1680.

3. Коренева В.В. Исследование разрушения сегнетокерамики при одновременном действии электрического поля и механических напряжений // Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.04. - Волгоград., 2014. - 16 с.

4. Merz W.J. Domain Properties in $BaTiO_3$ // Phys. Rev., 1952. - №88 - P. 421-425.

5. Нестеров В.Н., Кочергин И.В., Жога Л.В.// Абсорбционный ток в нагруженной сегнетокерамике / ФТТ. - 2009. - Т. 51, В. 7. - С. 1439-1440.

6. Жога Л.В., Шпейзман В.В. Кинетика хрупкого разрушения материалов в электрических и механических полях: монография // Волгогр. гос. архит.-строит. ун-т. – Волгоград: ВолгГАСУ, 2008. - 198 с.

FEATURES OF FORMING OF CURRENT PULSES WITH A CONSTANT MECHANICAL LOAD FERROELECTRIC PLATE IN AN ELECTRIC FIELD AGAINST THE RESIDUAL POLARIZATION VECTOR

P.A. Bakulin, L.V. Joga, E.M. Piunov, I.V. Valeshnij

Volgograd State Technical University, Institute of Architecture and Construction

Received current pulses in the circuit with a sample of ferroelectric PZT in electromechanical fields. Differences in the types of current pulses are shown for active and constant load of samples

Keywords: ferroelectrics, simulation, polarization current mechanical load

УДК 539:537.226.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВИДА ЗАВИСИМОСТИ ПРОЧНОСТИ СЕГНЕТОКЕРАМИКИ ОТ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ ИЗМЕНЕНИЕМ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РАЗРУШЕНИЯ

П.А. Бакулин, Л.В. Жога, Е.М. Пиунов, В.В. Гавришев

Волгоградский государственный технический университет, Институт архитектуры и строительства
todestriebe@yandex.ru, levjog@mail.ru

Получены кинетические параметры разрушения для сегнетокерамики ЦТС, состав которой лежит в окрестности морфотропной области со стороны ромбоэдрической границы. Снижение прочности в электрическом поле объясняется линейным уменьшением энергии активации процесса разрушения

Ключевые слова: сегнетоэлектрики, моделирование, ток поляризации, механическая нагрузка

Введение

Условия эксплуатации пьезокерамических элементов во внешних механических (МП) и электрических полях (ЭП) делают актуальным исследование свойств таких материалов и их устойчивости к циклическим и экстремальным нагрузкам, которые могут приводить к потере электрофизических свойств и даже к разрушению. В настоящей работе поставлена задача – получить зависимость разрушающих напряжений сегнетокерамики от величины внешнего электрического поля, используя релаксационную модель хрупкого разрушения твердых тел [1].

1. Образцы и методика эксперимента

Исследовались образцы пьезокерамики ЦТС, состав которой лежит в окрестности морфотропной области со стороны ромбоэдрической границы. Этот состав отличается повышенной чувствительностью к механической нагрузке, что обеспечивается высокими значениями пьезоэлектрических параметров ($\varepsilon_{33}/\varepsilon_0$ – 700; k_p – 0,62; Q_m – 90; g_{31} – $16{,}5\cdot10^{-3}$ В·м·Н$^{-1}$).

Испытывались пьезокерамические элементы диаметром 20 мм и толщиной 0,7 мм с вожженными серебряными электродами. Перед испытаниями верхний электрод травлением доводился до диаметра

6 мм. Образец помещался на опору диаметром 13 мм и сверху нагружался пуансоном диаметром 6 мм. Долговечность (время задержки разрушения) при постоянной нагрузке измерялась в секундах. Образцы испытывались в электрическом поле при разности потенциалов 1, 2 или 4 кВ. Электрическое напряжение подавалось ступенчато – по 0,5 кВ. Выдержка на ступени – 10 секунд. После достижении заданного значения электрического напряжения далее оно оставалось постоянным и с шагом в 10 секунд увеличивали механические напряжения методом осесимметричного изгиба пластины [2] до разрушения образца.

Высокое напряжение на образце контролировалось вольтметром типа С96. Испытания проходили в силиконовом масле. Температура испытания 300 К.

2. Результаты опытов и обсуждение

В [4] представлены результаты кинетики разрушения образцов с характеристиками состава ($\varepsilon_{33}/\varepsilon_0$ – 700; k_p – 0,62; Q_m – 90; g_{31} – $16{,}5\cdot10^{-3}$ В·м·Н$^{-1}$) при трех постоянных напряженностях электрического поля. Можно отметить наличие образцов разрушившихся при постоянной нагрузке, долговечность которых ограничивается длительностью ступеньки.

Используя данные [4], можно получить зависимость $\sigma(E)$ (рис. 1). Уменьшение σ с ростом E происходит по закону, близкому к линейному с коэффициентом 8,04 Н·(В·м)$^{-1}$.

Ранее в [5] для ЦТС-19 пьезоэлектрические характеристики которого отличаются от испытуемых образцов, была получена зависимость $\sigma(E)$ с углом наклона 6,4 Н·(В·м)$^{-1}$.

В рамках кинетического подхода к разрушению можно объяснить различие зависимости прочности от напряженности электрического поля, если из [5] запишем выражение для разрушающих напряжений:

$$\sigma = \frac{1}{B_{ME}}(\lg A_{ME} - \lg \tau), \qquad (1)$$

где

$$A_{ME} = \frac{\tau_0 \exp\left(U_0 - V_{\text{эф}}^E bE\right)}{kT}, \quad B_{ME} = \frac{V_{\text{эф}}^\sigma}{kT}.$$

Здесь U_0 – энергии активации процесса механического разрушения, $\tau_0 = 10^{-13}$ – константа, коэффициент b, имеющий размерность

Кл·м$^{-2}$, – поляризационный заряд на единицу площади, $V_{эф}^{E}$, $V_{эф}^{\sigma}$ – эффективный активационный объем для электрического и механического разрушения соответственно, k – постоянная Больцмана, T – температура испытания.

Отсюда получим для $\tau = 1$ (то же для любой заданной долговечности) выражение для σ:

$$\sigma = \frac{\log \tau_0 + \frac{U_0}{kT}}{B_{ME}} - \frac{V_{эф}^{E}}{V_{эф}^{\sigma}} E, \qquad (2)$$

где угол наклона прямой $V_{эф}^{E}/V_{эф}^{\sigma}$.

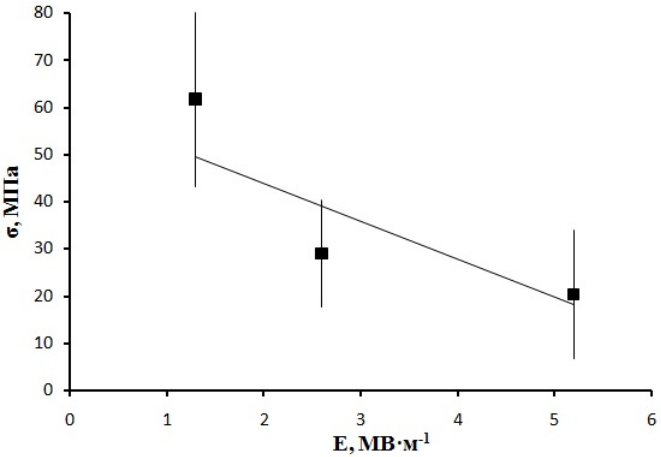


Рис. 1. Механическая прочность образцов сегнетокерамики в постоянном электрическом поле

Изменение величины угла наклона можно объяснить двумя причинами, поскольку $V_{эф}^{E}/V_{эф}^{\sigma}$ зависит как от дефектности структуры, так и от величины пьезоэлектрического коэффициента b.

Во-первых, поскольку $V_{эф}^{E} = qV^{E}$, $V_{эф}^{\sigma} = nV^{\sigma}$, где q, n – коэффициенты концентрации электрической или механической нагрузки, а V^{E}, V^{σ} – истинные активационные объемы, то отношение $V_{эф}^{E}/V_{эф}^{\sigma}$ определяется отношением коэффициентов концентрации электрической и механической нагрузок q/n, а истинные активационные объемы равны объему элементарной ячейки. Следовательно, угол наклона прямой $\sigma(E)$ может определяться различием коэффициентами

концентрации механической и электрической нагрузок на дефектах где происходит разрушение и их изменением во времени, т.е. механическое и электрическое разрушение происходит на разных дефектах.

Во-вторых, в случае, когда разрушение (механическое или электрическое) происходит на одном и том же дефекте, но образцы отличаются пьезоэлектрическими коэффициентами как, например, в [4] и [5].

Естественно, в реальности, поскольку и первая и вторая причины существуют одновременно, то обе они создают сложную зависимость $\sigma(E)$ в разных интервалах электрических полей [1]. Но понимание физической причины спада прочности в электрическом поле полезно для материаловедов.

Реакция сегнетокерамики на внешнее воздействие, в частности, заключается в появлении локальных упругих напряжений, возникающих при переключении отличных от 180°-х доменов. При этом изменяется поляризация, рождаются дефекты, которые препятствуют переключению доменов. Эти процессы приводят к изменению тока утечки (рис. 2).

Поэтому при приложении постоянного ЭП к сегнетокерамической пластине с электродами можно измерить полный ток в котором есть токи, обусловленные развитием разных видов диэлектрической поляризации (быстрых и медленных) и ток проводимости [7].

На рис. 2 можно заметить, что при напряжениях 1 кВ и 2 кВ при приложении МН ток изменялся, т.е. спад тока без МН был бы более быстрым. В то же время при 4 кВ влияния на ток утечки МН практически не было (небольшое уменьшение тока отмечено при механическом воздействии).

В [1] отмечалось, что в малых электрических полях действие механических напряжений может приводить к изменению доменной структуры, а в заполяризованной в предельном электрическом поле СК остаточная поляризация $\vec{P}_Z$ обусловлена, главным образом, "замораживанием" некоторой части (≈45%) переключенных не 180°-доменов; их обратное переключение под действием механической нагрузки сильно затруднено из-за возникающих больших внутренних напряжений в доменных стенках и межзёренных границах, а также из-за наличия дефектов кристаллической структуры.

Полученные результаты согласуются с дислокационной моделью сегнетожесткости ПСК [8], где рост сегнетожесткости связывается с увеличением стопоров-дислокаций при деформации сегнетоэлектрика.

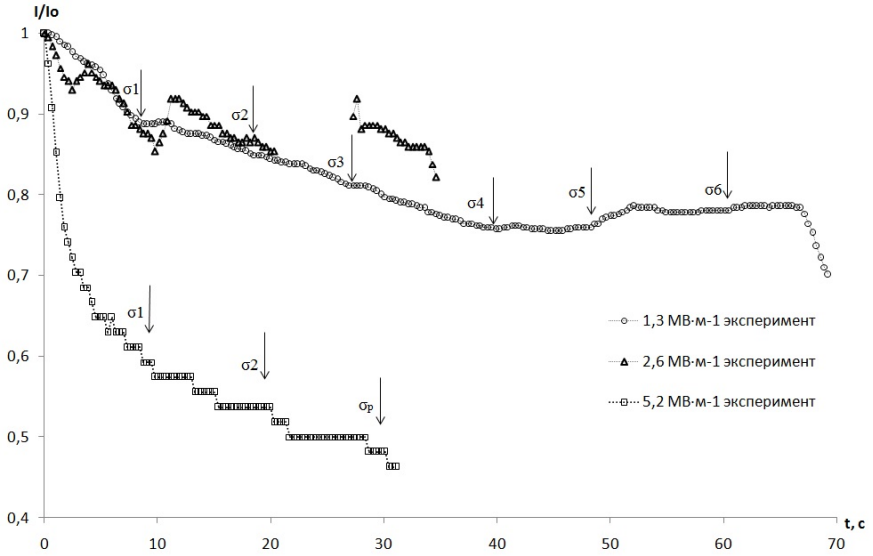


Рис. 2. Зависимость тока утечки (в относительных единицах измерения, где I_0 – максимальное значение) от времени для образцов СК1 ($\sigma_p = 46$ МПа), СК2 ($\sigma_p = 32$ МПа) и СК3 ($\sigma_p = 24$ МПа), экспериментальные данные. Стрелка σ_p отмечает приложение разрушающего напряжения. За начало отсчёта времени взято время установления максимального значения электрического поля, которое остается постоянным

3. Заключение

В рамках кинетического подхода к разрушению наблюдаемое снижение прочности сегнетокерамики в электрическом поле является следствием не только возникновения локальных упругих напряжений за счет обратного пьезоэффекта, поэтому и отличается для материалов с различными пьезокоэффициентами, но и их релаксацией в процессе разрушения, которое определяется типом дефектов.

В электрических полях малой напряженности механизмом релаксации напряжений в зоне разрушения для сегнетокерамики может быть движение не 180°-доменов.

Внешняя механическая нагрузка заметно влияет на вид характеристики тока утечки от времени в случае небольших напряженностей электрического поля и значительно слабее при больших электрических полях, а именно, в случае маленьких (меньше половины

электрической прочности без механической нагрузки) электрических полей – ток утечки увеличивается, а в случае больших (предпробивных) – уменьшается.

Литература

1. Шпейзман В.В., Жога Л.В. Кинетика разрушения поликристаллической сегнетокерамики в механическом и электрическом полях // ФТТ. - 2005. - Т. 47.-С. 843-850.

2. Витман Ф.Ф., Уфлянд Я.С., Иоффе Б.С. О вычислении напряжений при изгибе тонких стеклянных пластинок // Прикладная механика. – 1970. – 6. – 5. С. 122-125.

3. Merz W.J. Domain Properties in $BaTiO_3$ // Phys. Rev., 1952. - №88 - С. 421-425.

4. Кочергин И.В., Жога Л.В., Бакулин П.А. Разрушение сегнетокерамики при одновременном действии электрического поля и механической нагрузки // Известия ВолгГТУ. - 2015. - № 11 (176) - С. 17-20.

5. Жога Л.В., В.В. Шпейзман Кинетика хрупкого разрушения материалов в электрических и механических полях: монография // Волгогр. гос. архит.-строит. ун-т. – Волгоград: ВолгГАСУ, 2008. – 198 с.

6. Жога Л.В., Дорогин В.И., Шпейзман В.В. Зависимость электрической прочности сегнетокерамики ЦТС-19 от механических напряжений // ФТТ. - 1987. - Т. 29. - №11. - С. 3485-3486.

7. Notingher P.V., Busoi S., Dimiitran L.M., Stancu C., Tanasescu G. etc AgeingAssement of Insulation Systems by Absorption/Resorption Currents // World Academy of Science. Engineering and Technology. - 2009. - V. 25. - P. 648-654.

8. Приседский В.В. // Сегнетожесткость и сегнетомягкость пьезокерамики ЦТС - В сб.: Сегнето- и пьезокерамика в ускорении научно-технического прогресса. М.: МДНТП-1987. - С. 61-65.

MODELING THE FORM OF THE DEPENDENCE OF THE FERROELECTRIC CERAMICS STRENGTH ON THE ELECTRIC FIELD BY CHANGING THE KINETIC PARAMETERS OF DESTRUCTION

P.A. Bakulin, L.V. Joga, E.M. Piunov, V.V. Gavrishev

Volgograd State Technical University, Institute of Architecture and Construction

The kinetic parameters of fracture for the ferroelectric PZT, part of which lies in the vicinity of the area morphotropic from rhombohedral border. Reducing the strength of an electric field is explained by a linear reduction in the activation energy of the failure process

Keywords: ferroelectrics, simulation, polarization current mechanical load

УДК 621.365.5

ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ РАСЧЕТ ИНДУКЦИОННОГО НАГРЕВАТЕЛЯ ЗАБОЯ НЕФТЯНОЙ СКВАЖИНЫ

А.Л. Балабан, Ю.А. Бахвалов, В.В. Гречихин

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова, г. Новочеркасск
vgrech@mail.ru

Статья посвящена проектированию индукционных нагревателей забоя нефтяной скважины. Предложена методика электромагнитного расчета параметров нагревателя, основанная на применении пакета FEMM, реализующего метод конечных элементов. Построена математическая модель задачи, представляющая собой совокупность уравнения цепи и уравнения плоскомеридианного электромагнитного поля. Рассматривается реализация методики на примере выбора оптимальной толщины обсадной трубы. Методика отличается высокой эффективностью и может быть использована при проектировании индукционных нагревателей различного применения

Ключевые слова: индукционный нагрев, математическая модель, метод конечных элементов

В процессе эксплуатации месторождений высокопарафинистой нефти происходит закупорка призабойной зоны кристаллами парафина, что приводит к уменьшению притока нефти. Для устранения описанного явления применяют нагрев забоя и призабойного пространства, что позволяет увеличить нефтеотдачу пласта и повысить производительность скважины.

Существуют огневой, паровой и электрический виды нагрева. Наиболее эффективным является электрический нагрев с применением индукционного нагревателя (ИН) [1]. ИН устанавливается в конце обсадной трубы *1* из малоуглеродистой литой стали (рис. 1), окруженной призабойной зоной *2* и представляет собой цилиндрический сердечник *3*, на который надета катушка *4*, подключенная к сети переменного тока. Сердечник *2*, выполненный из шихтованной листовой электротехнической стали, усиливает переменное магнитное поле, индуцирующее в трубе *1* вихревые токи. Мощность этих токов является основным источником тепловой энергии.

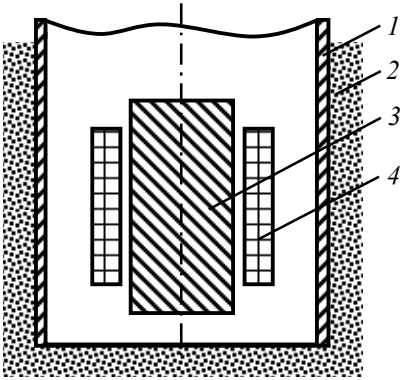


Рис. 1. Эскиз индукционного нагревателя, размещенного в обсадной трубе

Принимаем следующие допущения:

– электромагнитное поле является квазистационарным (не учитываем токи смещения);

– кривые намагничивания ферромагнетиков считаем однозначными;

– все среды изотропны;

– вихревые токи в сердечнике не учитываем.

С учетом допущений в каждой точке пространства электромагнитное поле определяется векторами магнитной индукции $\vec{B}$, напряженностей электрического $\vec{E}$ и магнитного $\vec{H}$ полей и при наличии проводников с током его можно описать системой дифференциальных уравнений (уравнений Максвелла**)**

$$\begin{aligned} \mathrm{rot}\vec{H} &= \vec{\delta}_e + \vec{\delta}_{ed}; \\ \mathrm{div}\vec{B} &= 0; \\ \mathrm{rot}\vec{E} &= -\frac{\partial B}{\partial t}, \end{aligned} \qquad (1)$$

дополненные соотношениями, зависящими от свойств среды $\vec{B} = \mu\vec{H}$, $\vec{\delta}_{ed} = \gamma_p \vec{E}$ и граничными условиями $E_\tau^+ = E_\tau^-$; $H_\tau^+ = H_\tau^-$; $B_n^+ = B_n^-$. Здесь $\vec{\delta}_e$ – вектор плотности тока, вызванной сторонней по отношению к кулоновской напряженности поля, μ – магнитная проницаемость среды, γ_p – удельная электропроводимость литой стали.

Уравнения электрической цепи устройства имеют следующий вид

$$u_c = r_c i_c + d\Phi_c / dt\,, \tag{2}$$

где u_c – напряжение, приложенное к катушке; r_c – сопротивление катушки; i_c – ток в катушке; Φ_c – потокосцепление катушки, $\Phi_c = \sum_{i=1}^{w} \Phi_{ci}$, Φ_{ci} – поток, сцепленный с i-м витком, w – число витков катушки.

В силу симметрии устройства электромагнитное поле является плоскомеридианным. Выбираем цилиндрическую систему координат. Введем векторный магнитный потенциал $\vec{A}$ соотношениями $\mathrm{rot}\vec{A} = \vec{B}$; $\mathrm{div}\vec{A} = 0$. В нашем случае r и z составляющие векторов плотности тока и магнитного потенциала $\delta_{er} = \delta_{ez} = 0$, $A_r = A_z = 0$. Тогда $\vec{\delta}_e = \delta_{e\alpha}\vec{e}_\alpha$; $\vec{A} = A_\alpha \vec{e}_\alpha$; $\vec{E} = -(\partial A_\alpha / \partial t)\vec{e}_\alpha$, где $\vec{e}_\alpha$ – единичный вектор по координате α. Далее индекс α будем опускать.

Исключая $\vec{B}$ и $\vec{E}$ из системы (1), получим следующие уравнения

$$\mathrm{div}\left(\frac{1}{\mu r}\mathrm{grad}\psi\right) - \frac{\gamma_p}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \delta_e = 0\,, \tag{3}$$

где ψ – функция потока, $\psi = rA$.

Составляющие магнитной индукции определяются соотношениями

$$B_r = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial z}\,; \quad B_z = \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\,.$$

Поток Φ_{ci}, сцепленный с i-м витком, определим по формуле

$$\Phi_{ci} = 2\pi R_i A_{i_{av}}\,, \tag{4}$$

где $A_{i_{av}}$ – среднее значение векторного магнитного потенциала по сечению i-го витка.

Перейдем к комплексным величинам. Уравнения (2) и (3) принимают вид

$$\dot{U}_c = r_c \dot{I}_c + j\omega\dot{\Phi}_c\,; \tag{5}$$

$$\operatorname{div}\left(\frac{1}{\mu r}\operatorname{grad}\dot{\psi}\right)-\frac{\gamma_p}{r}j\omega\dot{\psi}+\dot{\delta}_e=0, \qquad (6)$$

где ω – круговая частота, $\omega=2\pi f$, f – частота сети переменного тока.

Плотность вихревых токов в обсадной трубе определим соотношением $\dot{\delta}_{ed}=-\gamma j\omega\dot{\psi}/r$, объемную плотность тепловых источников в обсадной трубе: $q=\gamma\omega^2\dot{\psi}^2/r^2$.

Полную мощность тепловых источников в обсадной трубе определим из выражения $P_p=\iint\limits_{V_p} qdV$, в катушке – $P_p=I_c^2 r_c$, где V_p – объем обсадной трубы, в которой протекают вихревые токи.

Рассмотрим вопрос выбора размеров и числа витков ИН.

Внешний диаметр обсадной трубы считаем заданным. Толщину трубы b_p выбираем из условия [2]

$$J=P_p/V_p\to\max.$$

Выполненный анализ задачи путем решения системы (5), (6) с использованием программного комплекса FEMM [3] показал, что критерий J принимает максимальное значение при $b_p=0{,}0045$ м (рис. 2).

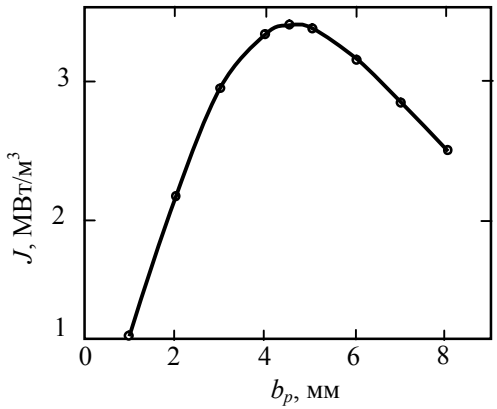


Рис. 2. Зависимость удельных потерь мощности J в отрезке трубы от толщины трубы b_p

Диаметр цилиндрического шихтованного сердечника *2* выбираем так, чтобы сталь сердечника была ненасыщена. Число ампер-

витков должно обеспечивать при температуре призабойной зоны 50 °С температуру нагрева среды больше температуры плавления парафина $T_{par} = 64$ °С.

Исходные данные для расчетов: магнитная проницаемость стали обсадной трубы $\mu_p = 80\mu_0$, где μ_0 – магнитная постоянная); источник питания – промышленная сеть 380 В, 50 Гц; число витков катушки $w = 300$; плотность тока в катушке $\delta_c = 3$ А/мм^2; провод прямоугольного сечения $4 \times 5{,}6$ мм; удельная электропроводимость $\gamma_p = 3 \cdot 10^6$ 1/Ом·м.

Геометрические размеры ИН и обсадной трубы (обозначения приведены на рис. 3): $R_1 = 0{,}05$ м; $R_2 = 0{,}052$ м; $R_3 = 0{,}08$ м; $h_c = 0{,}642$ м; $h_1 = 0{,}01$ м; $h_2 = 0{,}644$ м; $b_c = 0{,}016$ м; $b_p = 0{,}0045$ м.

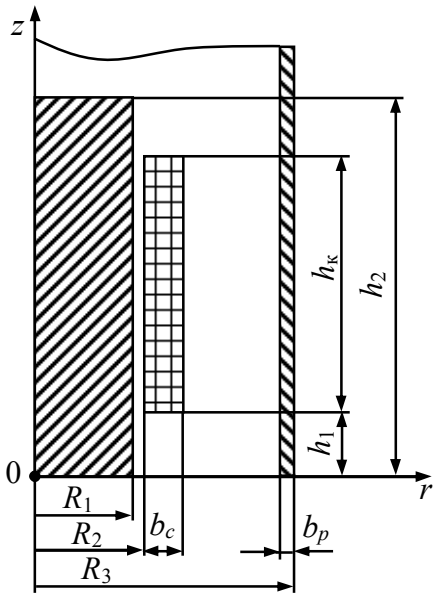


Рис. 3. Обозначение размеров индукционного нагревателя и обсадной трубы

В результате расчета с помощью пакета FEMM определено: ток катушки $I_к = 60$ А; полная мощность ИН $S = 11470{,}5$ ВА; ак-

тивная мощность ИН $P = 7978$ Вт; активная мощность вихревых токов в обсадной трубе $P_p = 7842$ Вт; потери мощности в катушке $P_c = 109$ Вт; коэффициент мощности $\cos\varphi = 0{,}7$.

Выводы. Предложена методика расчета параметров индукционного нагревателя забоя нефтяной скважины, основанная на применении пакета FEMM, реализующего метод конечных элементов. Методика обеспечивает выбор оптимальной толщины обсадной трубы. Рассмотренный вариант индукционного нагревателя имеет важное преимущество перед другими типами нагревателей, поскольку в катушке выделяется всего 0,95 % общей активной мощности. Остальная часть потребляемой от сети мощности выделяется в обсадной трубе, имеющей непосредственный контакт с призабойным пространством. Все это обеспечивает высокую эффективность нагревателя.

Литература

1. Вильданов Е.С. Индукционный нагреватель забоя нефтяной скважены / Е.С. Вильданов, Е.М. Огарков // Автоматизация в электроэнергетике и электротехнике: материалы II Международной научно-технической конференции, 21.04.-22.04.2016 г., г. Пермь – Пермь: Издательский центр ПНИПУ, 2016. С. 176-179 с.

2. Шимони К. Теоретическая электротехника: монография / К. Шимони. – М.: Мир, 1964. – 774 с.

3. Официальный сайт программного комплекса FEMM. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.femm.info. – (Дата обращения: 05.05.2017).

ELECTROMAGNETIC CALCULATION OF INDUCTION HEATER FOR OIL BOTTOMHOLE

A.L. Balaban, Y.A. Bachvalov, V.V. Grechikhin

Platov South-Russia State Polytechnic University (NPI), Novocherkassk

The article is devoted to designing of induction heaters for oil bottomhole. It is proposed method of electromagnetic calculation of heater parameters, based on the use of FEMM, which implementing the finite element method. The article presents mathematical model of the problem, which is the network equations and electromagnetic field is meridian plane. The implementation of the method is considered using the example of choosing the optimum casing thickness. The method is highly efficient and can be used in the design of induction heaters for various applications

Keywords: induction heating, mathematical model, finite element method

УДК 539.374

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИЛОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ В СПЛАВАХ С МАРТЕНСИТНОЙ НЕУПРУГОСТЬЮ

И.Н. Андронов, Н.П. Богданов, Е.В. Семиткина

Ухтинский государственный технический университет
nbogdanov@ugtu.net

Рассматривается поведение модельного материала для случая одноосного нагружения при постоянной температуре до определенной интенсивности деформации и дальнейшего нагревания (охлаждения) в условиях жесткого защемления или стесненного противодействия. В основу феноменологической модели положены гипотезы и допущения, соответствующие экспериментальным фактам и предложенные в ранних работах

Ключевые слова: эффект памяти формы, генерация напряжения

Развитие прикладных методов расчета для материалов с памятью формы позволяет разрабатывать новые конструкционные силовые устройства, сокращая тем самым объем экспериментальных работ. Термомеханические соединения трубопроводов являются наиболее отработанной сферой применения сплавов с эффектом памяти формы. Обычно эффект памяти формы реализуется как формовосстановление при нагревании в условиях противодействия. В работе [1] рассмотрен простейший пример расчета усилия упругого зажима детали 2 из конструкционного материала силовым элементом 1 из сплава с памятью формы. Силовая схема узла в исходном состоянии, при предварительной деформации силового элемента и после реализации термического формовосстановления показана на рис. 1.

Силовой элемент 1 и деталь 2 в недеформированном состоянии имеет размеры, удовлетворяющие условию $L < l_1 + l_2$. После пластической деформации ε_{1p} при температуре ниже точки начала прямого мартенситного превращения длина силового элемента $l_{1д} = l_1(1 - \varepsilon_{1p})$. При нагреве выше температуры обратного мартенситного превращения в аустените силовой элемент 1 вспоминает свою исходную до деформации форму и, выбирая технологический зазор Z, зажимает деталь 2. В результате стеснённого формовосстановления развивается реактивное усилие противодействия P_R, а деталь 2 деформируется на величину ε_2.

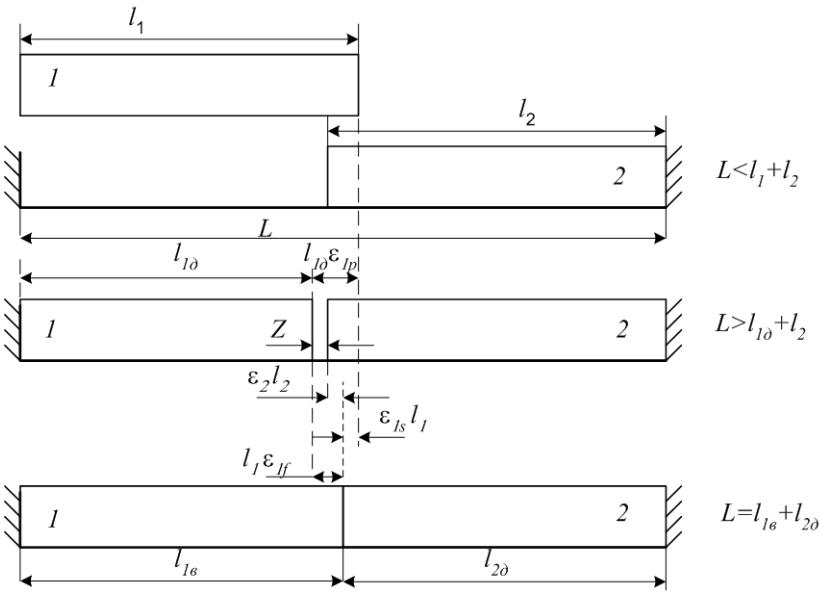


Рис. 1. Схема зажима детали (2) силовым элементом (1) из сплава с памятью формы до и после при реализации его термического формовосстановления

В целом, для абсолютно жёсткой станины приспособления условие совместности перемещений контактирующих деталей определяется $\varepsilon_{1f} l_1 - \varepsilon_2 l_2 = Z$, где ε_{1f} – термически обратимая деформация. Если учитывать деформацию недовосстановления силового элемента ε_{1s}, а заданная деформация равна деформации памяти формы $\varepsilon_{1p} = \varepsilon_{1v}$, уравнение совместности деформаций после завершения формовосстановления в результате обратного мартенситного превращения, можно представить в $\varepsilon_{1s} l_1 + \varepsilon_2 l_2 / l_1 = \varepsilon_{1v} - Z/l_1 > 0$, где при соответствующих выкладках находим усилие противодействия P_R. В более общем случае в условиях сложного нагружения решается уже нелинейная конструкционно-контактная задача узла. Например, решение контактной задачи об определении давления в соединении с натягом двух колец при формовосстановлении наружного кольца из материала с термомеханической памятью.

В данном сообщении рассматривается поведение модельного материала для случая одноосного нагружения при постоянной температуре до определенной интенсивности деформации и дальнейшего нагревания (охлаждения) в условиях жесткого защемления (рис. 2а) (или стесненного противодействия – рис. 2б). В основу феноменологической модели положены следующие гипотезы и допущения, соответствующие экспериментальным фактам и предложенные ранее в работах [2, 3, 4].

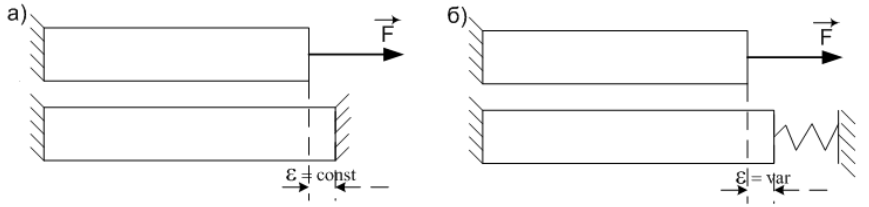


Рис. 2. Схема испытаний модельного материала с памятью формы при жесткой заделке и стесненного упругого противодействия

Схему решения задачи о поведение модельного материала для случая одноосного нагружения при постоянной температуре (изотермическое деформирование) можно представить следующим образом. Деформацию материала считаем пропорциональной фазе, которую предлагается задать аналитически в виде уравнения Ферхлюста – Пёрла.

$$d\Phi = -K(1-\Phi)dT,$$

где K – положительная константа, определяющее наклон кривой. K_M, K_A – значения соответствуют фазам мартенсита и аустенита соответственно. После интегрирования получим соотношение, которое описывает зависимость величины фазы мартенсита Ф от температуры.

$$\Phi = H(-\dot{T})\left[\frac{1}{1+e^{K_M(T-M_0)}}\right] + H(\dot{T})\left[\frac{1}{1+e^{K_A(T-A_0)}}\right], \qquad (1)$$

$H(X) = \begin{cases} 1, X \geq 0 \\ 0, X < 0 \end{cases}$ – функция Хевисайда, служит переключателем режимов, в случае роста T «активно» второе слагаемое в формуле (1), в противном случае – первое. M_0, A_0 – среднее арифметическое тем-

пературы фазового перехода. Изменение упругой деформации находили в линейно-упругом приближении с помощью обобщенного закона Гука:

$$d\varepsilon_{ij} = \frac{1}{E}\left(\frac{E}{2G}d\sigma_{ij} + \left(1 - \frac{E}{2G}\right)\right)(d\sigma_{11} + d\sigma_{22} + d\sigma_{33})\delta_{ij},$$

где $d\varepsilon_{ij}$ и $d\sigma_{ij}$ соответственно приращения упругой деформации и величины тензора напряжений. Величины E и G находили согласно правилу смеси фаз. Для модельного материала характеристические температуры фазового перехода составляли 320 К, 280 К, 360К, 340 К.

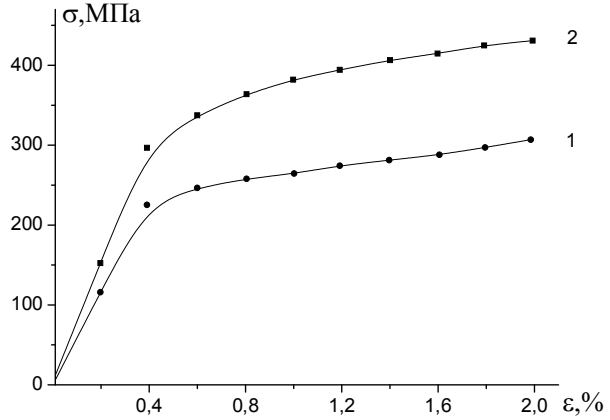


Рис. 3. Расчетные зависимости осевой деформации для модельного материала при изотермическом нагружении при температуре ниже точки начала прямого мартенситного превращения 270 К (1) и в аустенитном состоянии 400 К (2)

Согласно схеме на рис. 2, модельный материал сначала растягивали на 1% при температурах 290 К, что находится ниже точки начала прямого мартенситного превращения, а также 310, 330, 350 К, что соответствует двухфазному состоянию. Далее образец после задания предварительной деформации защемляли и нагревали, при этом фиксируя напряжение, которое возникает в образце при изменении температуры. Эволюция напряженного состояния (генерация напряжения) от температуры после предварительного изотермического деформирования и "защемления" показаны на рис. 4.

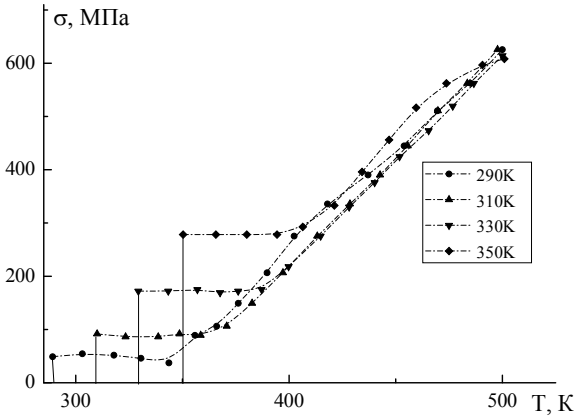


Рис. 4. Изменение напряженного состояния (генерация напряжения) модельного материала с памятью формы при нагревании в условиях жесткой заделки после предварительного изотермического (температуры указаны на рисунке) деформирования до ε = 2 %

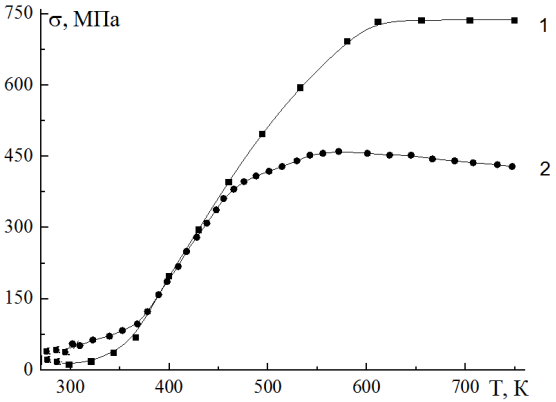


Рис. 5. Изменение напряженного состояния модельного материала с памятью формы при нагревании в условиях жесткой заделки (1) и стесненном упругом противодействии (2) после предварительного изотермического деформирования до ε = 1%

Как видно из расчетных зависимостей, напряжение в предварительно деформированном образце зависит от температуры деформации, а при нагревании происходит генерация "одинакового" на-

пряжения. При стесненном упругом противодействии (испытания по схеме на рис. 2*б*) изменение напряжения в модельном образце изменяется в меньшей степени (рис. 5, кривая 2). Как видим, предложенная расчетная модель позволяет наблюдать отклик сплава с мартенситной неупругостью при термосиловом воздействии, т.е. ее можно применить при расчетах контактных задач, например, об определении давления в соединении с натягом двух колец.

Литература

1. Шишкин С.В., Махутов Н.А. Расчет и проектирование силовых конструкций на сплавах с эффектом памяти формы. – М. - Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", 2007. – 412 с.

2. Андронов И.Н., Крючков С.В., Овчинников С.К. Одноуровневая модель явлений мартенситной неупругости // Труды 6-го Междунар. симп. им. В.А. Лихачева “Современные проблемы прочности”, Великий Новгород, 20 – 24 окт. 2003. Т. 2. С. 167 – 172.

SIMULATION OF FORCE IN ALLOYS WITH MARTENSITIC INELASTICITY

I.N. Andronov, N.P. Bogdanov, E.V. Semitkina

Ukhta State Technical University

The behavior of the model material for the case of uniaxial loading at a constant temperature up to a certain deformation intensity and further heating (cooling) under conditions of rigid pinching or constrained counteraction is considered. The basis of the phenomenological model is hypotheses and assumptions, corresponding to experimental facts and proposed earlier works

Keywords: shape memory effect, mechanical stress generation

УДК 537.612.3, 537.613

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ДИСКООБРАЗНОГО ПОСТОЯННОГО МАГНИТА

С.М. Гудилов

Академия гражданской защиты МЧС России, г. Химки
s.gudilov@amchs.ru

В работе представлены результаты численного расчета напряженности магнитного поля для модели дискообразного постоянного магнита. Рассмотрены особенности пространственного распределения осевой составляющей напряженности магнитного поля в зависимости от толщины и диаметра магнита

Ключевые слова: магнит, скалярный магнитный потенциал, напряженность магнитного поля

Дискообразные постоянные магниты находят широкое применение в различных областях промышленности, что связано с существенным улучшением их свойств в результате применения современных материалов и уменьшением толщины. В то же время, эффективное применение таких магнитов в технических устройствах требует представлений о распределении магнитного поля в пространстве как вблизи, так и на некотором расстоянии от торцевых поверхностей магнита. Имеющиеся в литературе сведения по этим вопросам (например [1]), явно недостаточны, что, по-видимому, связано как с высокой трудоемкостью экспериментальных исследований, так и со сложностью использования для расчетов готовых программных продуктов.

Промышленные магниты обычно имеют дефекты намагниченности, поэтому для выяснения общих закономерностей представляется достаточным рассмотреть идеальный магнит, обладающий магнитным полем с осевой симметрией.

Задача расчета магнитного поля дискообразных магнитов не имеет аналитического решения [2], поэтому для определения поля используются численные вычисления по различным методикам [1, 3].

В данной работе представлены результаты численного моделирования магнитного поля, основанные на расчете магнитных по-

тенциалов, создаваемых фиктивными магнитными зарядами в области пространства вне магнита [2, 4].

Таким образом, численно решалась задача Дирихле для магнитного поля, подчиняющегося уравнению Лапласа:

$$\Delta\varphi_m = 0,$$

где φ_m – магнитный потенциал.

Вычисления проводились по описанной в [4] методике для магнитного поля с осевой симметрией на двумерной сетке с квадратной ячейкой размером 1 мм×1 мм с помощью программы, написанной на языке Си#. На торцевой поверхности магнита предполагалось равномерное распределение потенциала, равное 100 условным единицам, на боковой поверхности предполагалось линейное изменение потенциала, а на удаленных сторонах сетки потенциал полагался равным нулю. Как показал численный эксперимент, удаление границ на расстояние порядка 400 мм от середины магнита диаметром 36 мм является оптимальным, так как позволяет проводить вычисления без излишних временных затрат с необходимой точностью. Так, удвоение этого расстояния приводило к изменению потенциалов в узлах сетки вблизи магнита всего на доли процента, но сопровождалось резким увеличением времени расчетов.

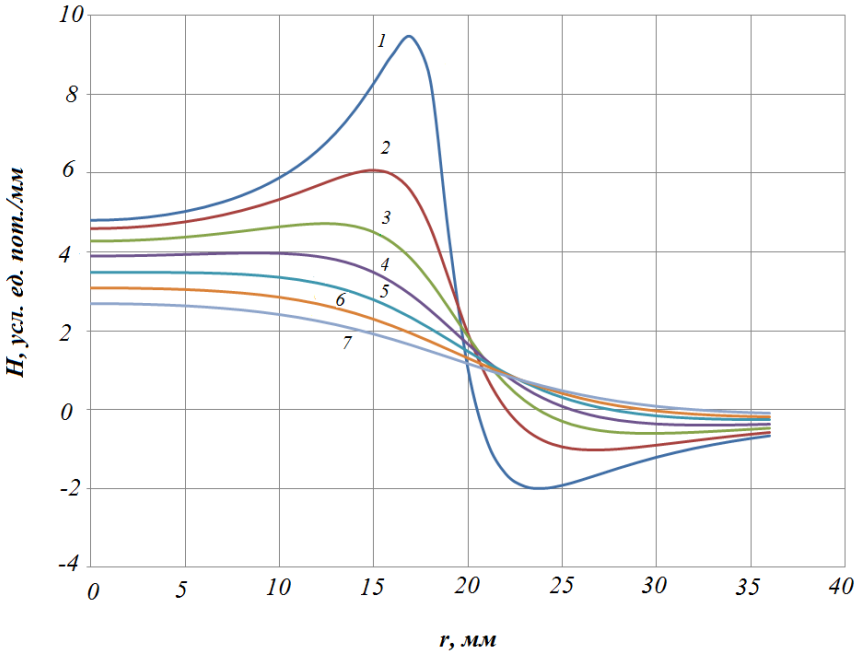
Напряженность магнитного поля определялась по формуле:

$$\vec{H} = -\operatorname{grad}\varphi_m.$$

На сетке определялись осевая H_z и радиальная H_r компоненты напряженности. Зависимость осевой составляющей от расстояния до оси для магнита диаметром 36 мм и толщиной 6 мм показана на рис. 1 для различных рядов сетки. Показаны ряды, отстоящие от торца магнита и друг от друга на 2 мм. Видно, что H_z имеет «провал» в центральной области торцевой поверхности магнита и максимальное значение на расстояниях порядка радиуса магнита. Уменьшение напряженности поля вблизи оси также описано в [1] и других работах.

На рис. 1 также видно, что «провал» исчезает на расстояниях порядка 11 мм от торца магнита. Проведенные численные эксперименты показали, что это расстояние не меняется при изменении толщины магнита, по крайней мере, до значения 160 мм.

В то же время для магнита диаметром 8 мм и толщиной 6 мм исчезновение «провала» наблюдается на расстоянии порядка 3 мм.



1 – 2 мм, 2 – 4 мм, 3 – 6 мм, 4 – 8 мм, 5 – 10мм, 6 – 12 мм, 7 – 14 мм

Рис. 1

Глубину «провала» можно характеризовать величиной отношения напряженности поля на оси H_{zo} к ее максимальному значению $H_{z\,max}$ вдоль ряда сетки. На рис. 2 показана зависимость этой величины от толщины h магнитов диаметром 36 мм, рассчитанной на расстоянии 3 мм от торцевой поверхности. Видно, что величина «провала» уменьшается при увеличении толщины магнитов, причем для тонких магнитов эти изменения выражены сильнее. Увеличение толщины магнита не приводит к исчезновению «провала», поэтому размеры зоны, в которой он обнаруживается, по-видимому, связаны в основном с диаметром магнитов.

Таким образом, полученные результаты показывают, что поле дискообразных магнитов вблизи торцевых поверхностей обладает существенной неоднородностью, которую необходимо учитывать при технических применениях таких магнитов.

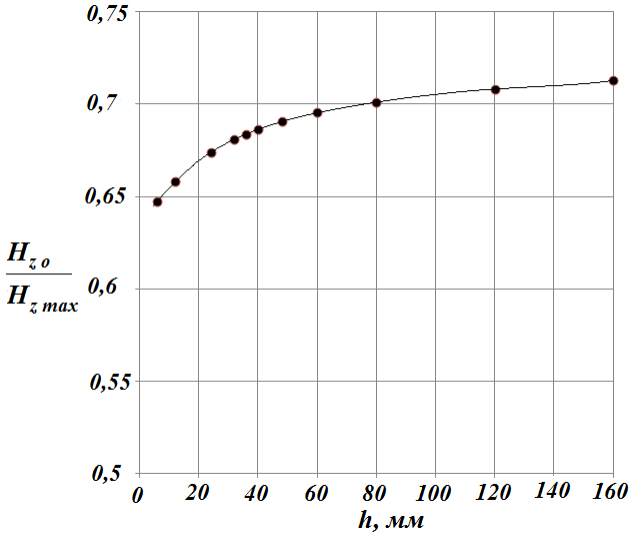


Рис. 2

Литература

1. Черкасова О.А. Исследование магнитного поля постоянного магнита с помощью компьютерного моделирования// Гетеромагнитная микроэлектроника, 2014. № 17. С. 112–120.

2. Тамм И.Е. Основы теории электричества. М.: Наука, 1989.–504 с.

3. Булыжев Е.М., Меньшов Е.Н., Джавахия Г.А. Моделирование поля постоянного магнита // Изв. Самарского научного центра РАН, 2011. Т.13, №4, С. 106-110.

4. Говорков В.А. Электрические и магнитные поля. М.: Энергия, 1968. – 488 с.

SIMULATION OF MAGNETIC FIELD OF THE DISC-SHAPED PERMANENT MAGNET

S.M. Gudilov

Academy of Civil Defense EMERCOM of Russia, Khimki

In work results of numerical calculation of a magnetic intensity for model of a disk permanent magnet are presented. Features of a spatial distribution of an axial component of a magnetic intensity depending on thickness and diameter of a magnet are considered

Keywords: magnet, scalar magnetic potential, magnetic intensity

УДК 537.311.322

ЛОКАЛЬНЫЙ ЧЕТЫРЕХЗОНДОВЫЙ МЕТОД СОВМЕСТНОГО ИЗМЕРЕНИЯ КОМПОНЕНТ ТЕНЗОРА УДЕЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ И КОЭФФИЦИЕНТА ХОЛЛА В АНИЗОТРОПНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНКАХ

А.А. Заворотний[1, 2]

[1]Липецкий государственный педагогический университет
имени П.П. Семенова-Тян-Шанского
[2]Липецкий казачий институт технологий и управления (филиал)
ФГБОУ ВО «Московский государственный университет технологий
и управления имени К.Г. Разумовского (Первый казачий университет)
aazavorotniy@mail.ru

На основе решения краевой задачи электродинамики по распределению потенциала электрического поля предложена оригинальная методика совместного измерения компонент тензора удельной электропроводности и коэффициента Холла в анизотропных полупроводниковых пленках четырехзондовым методом с ромбовидным расположением зондов на поверхности. Особое внимание уделено локальности измерений и влияния границ пленки на получаемые результаты

Ключевые слова: анизотропный полупроводник, четырехзондовый метод, локальность измерения, тензор удельной электропроводности, коэффициент Холла, поправочный множитель

Введение

Четырехзондовый метод по сравнению с двухзондовым является более совершенным и имеет автоматизированную измерительную установку. Однако поправочные множители, получаемые из рассмотрения теории четырехзондового метода имеют довольно громоздкий вид, нежели в теории двухзондового [1-3]. Эта ситуация еще более усугубляется в случае необходимости проведения измерений в анизотропных полупроводниковых структурах. Но в современной электронике большее предпочтение отводится зондовым методам в связи микроминиатюризацией полупроводниковых структур и приборов. Поэтому рассмотрим методику совместного измерения коэффициента Холла и компонент тензора электропроводности четырехзондовым измерительным пробником на поверхности анизотропной полупроводниковой пленки.

Зондовым методам измерения коэффициента Холла в анизотропных полупроводниковых кристаллах посвящено мало работ, среди которых особо следует отметить статью [4]. В этой публикации автор решает задачу о распределении потенциала в полупроводниковых пленках, обладающих анизотропией электропроводности, при четырехзондовом расположении токовых и измерительных контактов. В этом случае расположение зондов представляет собой квадрат, стороны которого параллельны сторонам исследуемого образца. Такое положение позволяет получать относительно простые выражения при измерении компонент тензора удельной электропроводности. Однако в случае измерения э.д.с. Холла данное расположение зондов является не очень удобным, т.к. получающиеся выражения для поправочного множителя слишком громоздки, что затрудняет процедуру их расчета в условиях заводской лаборатории.

Для измерения коэффициента Холла более удачным, по сравнению с предложенным в [4], расположением зондов является такая схема, при которой зонды на поверхности кристалла образуют ромб (рис. 1), т.к. в этом случае измерительные зонды э.д.с. Холла расположены вдоль линии параллельной одной из сторон исследуемого кристалла. Именно такая ситуация в расположении зондов на поверхности полупроводниковой пленки и рассматривается в данной работе.

Постановка и решение краевой задачи электродинамики

Рассмотрим прямоугольный полупроводниковый образец (рис. 1), имеющий следующие геометрические размеры: $2a$ – длина, $2b$ – ширина, d – толщина. Вдоль оси Oz направлено внешнее магнитное поле индукцией $\vec{B}$. Четырехзондовый пробник, находящийся на плоской поверхности образца, имеет ромбовидную форму, т.е. относительно его центра, имеющего координаты (a_0, b_0), одна пара зондов расположена на расстоянии l_1, а вторая – на расстоянии l_2.

В трехмерном случае, когда анизотропный образец ориентирован вдоль главных направлений тензора удельной электропроводности, последний без внешнего магнитного поля принимает следующий вид [5, 6]:

$$\hat{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{bmatrix}, \qquad (1)$$

где σ_i, $i = x, y, z$ – главные направления тензора.

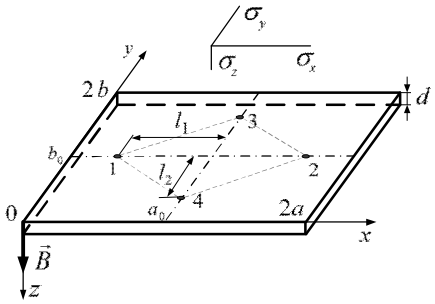


Рис. 1. Схема расположения зондов на поверхности

В ряде последних публикаций [3, 7, 8] показано, что потенциал электрического поля в трехмерном случае удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению:

$$\sigma_x \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0 . \qquad (2)$$

При измерении компонент тензора удельной электропроводности токовыми будут зонды 1 и 4 (рис. 1). В этом случае граничные условия для потенциала в области образца, следующие из того, что нормальная составляющая плотности тока равна нулю всюду, кроме точек под токовыми контактами [3, 7, 8], имеют вид:

$$\left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{\substack{x=0,\\ x=2a}} = 0; \qquad \left.\frac{\partial \phi}{\partial y}\right|_{\substack{y=0,\\ y=2b}} = 0; \qquad \left.\frac{\partial \phi}{\partial z}\right|_{z=d} = 0; \qquad (3)$$

$$\left.\frac{\partial \phi}{\partial z}\right|_{z=0} = \frac{I_{12}}{\sigma_z}\left[\delta(x-a_0) - \delta(x-(a_0-l_1))\right]\delta(y-b_0) , \qquad (4)$$

где $\delta(x)$ – функция Дирака, использование которой оправдано в случае малых входных сечений токовых контактов.

Решение краевой задачи (2) – (4) методом разделения переменных [9] дает следующее выражение:

$$\phi(x,y) = \frac{I_{12}}{ab\sigma_z} \sum_{n,k=0}^{\infty} \left\{ \Theta_n \Theta_k \frac{\mathrm{ch}(\eta_{nk} d)}{\eta_{nk} \cdot \mathrm{sh}(\eta_{nk} d)} \times \right. \qquad (5)$$

$$\left. \times \left[\cos(\alpha_n a_0)\cos(\beta_k (b_0 - l_2)) - \cos(\alpha_n (a_0 - l_1))\cos(\beta_k b_0)\right] \cdot \cos(\alpha_n x)\cos(\beta_k y) \right\},$$

где введены обозначения:

$$\alpha_n = \frac{\pi n}{2a},\ \beta_k = \frac{\pi k}{2b},\ \eta_{nk}^2 = (\gamma_1\alpha_n)^2 + (\gamma_2\beta_k)^2,$$
$$\gamma_1 = \sqrt{\sigma_x/\sigma_z},\ \gamma_2 = \sqrt{\sigma_y/\sigma_z},\quad \Theta_i = \begin{cases} 1, \text{ при } i \neq 0; \\ 1/2, \text{ при } i = 0; \end{cases} \quad i = n,k. \tag{6}$$

В (5) учтено, что все измерения производятся на поверхности образца, т.е. $z = 0$.

При включении внешнего магнитного поля вдоль оси Oz тензор электропроводности (1) принимает следующий вид:

$$\hat{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x & \sigma_x\sigma_y RB & 0 \\ -\sigma_x\sigma_y RB & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{bmatrix}, \tag{7}$$

где σ_x, σ_y и σ_z – компоненты диагонального тензора электропроводности в отсутствии магнитного поля (см. (1)), R – коэффициент Холла.

Измерения коэффициента Холла проводятся, как правило, в относительно слабых магнитных поля, для которых выполнено условие $(\mu B)^2 << 1$, где μ – подвижность носителей заряда. В этом случае э.д.с. Холла E_H линейно зависит от B [10, 11].

При измерении эффекта Холла четырехзондовым методом токовыми контактами будут служить зонды 1 и 2 (рис. 1), а измерительными – 3 и 4. В этом случае граничные условия краевой задачи по распределению потенциала электрического поля примут вид:

$$\left(\sigma_x\frac{\partial\phi}{\partial x} + \sigma_x\sigma_y RB\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)\Bigg|_{x=0,\,2a} = 0; \quad \left(\sigma_y\frac{\partial\phi}{\partial y} - \sigma_x\sigma_y RB\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)\Bigg|_{y=0,\,2b} = 0; \tag{8}$$

$$\sigma_z\frac{\partial\phi}{\partial z}\Bigg|_{z=0} = I_{12}\left[\delta\left(x-(a_0+l_1)\right) - \delta\left(x-(a_0-l_1)\right)\right]\delta\left(y-b_0\right); \quad \sigma_z\frac{\partial\phi}{\partial z}\Bigg|_{z=d} = 0. \tag{9}$$

Решение краевой задачи (2), (8), (9) ищется методом разделения переменных в линейном приближении потенциала $\phi(x,y,z)$ [10, 11]. В результате приближения тонких пленок ($d << 2a, 2b, l_1, l_2$) и учета того, что измерения производятся на плоской поверхности образца при $z = 0$ имеем окончательное выражение для $\phi(x,y,z)$:

$$\phi(x,y,z) = \phi_0(x,y,z) + \phi_H(x,y,z), \tag{10}$$

где $\phi_0(x,y,z)$ – потенциал электрического поля в отсутствии магнитного поля:

$$\phi_0(x,y,z)=\frac{2I_{12}}{\sigma_z ab}\sum_{n,k=0,1,\ldots}\left\{\Theta_k\frac{\mathrm{ch}\left[\eta_{nk}(d-z)\right]}{\eta_{nk}\cdot\mathrm{sh}\left(\eta_{nk}d\right)}\cdot\sin(\alpha_n l_1)\times\right.$$
$$\left.\times\sin(\alpha_n a_0)\cos(\beta_k b_0)\cos(\alpha_n x)\cos(\beta_k y)\right\}; \qquad (11)$$

$\phi_H(x,y,z)$ – дополнительный холловский потенциал, возникающий при включении магнитного поля:

$$\phi_H(x,y,z)=\frac{2\sigma_x I_{12}RB}{\sigma_z\gamma a^2 bd}\sum_{n,k,p}\left[\Theta_k\Theta_p\frac{\left[1-(-1)^{n+p}\right]\alpha_n^2}{\alpha_p\eta_{nk}^2\left(\alpha_n^2-\alpha_p^2\right)}\times\right.$$
$$\left.\times\frac{\mathrm{ch}\left[\alpha_p\gamma(y-2b)\right]-(-1)^k\mathrm{ch}\left(\alpha_p\gamma y\right)}{\mathrm{sh}\left(2\alpha_p\gamma b\right)}\cdot\cos\left(\alpha_p x\right)\right]+ \qquad (12)$$
$$+\frac{2\sigma_y\gamma I_{12}RB}{\sigma_z ab^2 d}\sum_{n,k,r}\left[\Theta_r\frac{\left[1-(-1)^{k+r}\right]\beta_k^2}{\beta_r\eta_{nk}^2\left(\beta_k^2-\beta_r^2\right)}\times\right.$$
$$\left.\times\frac{(-1)^n\mathrm{ch}\left(\beta_r x/\gamma\right)-\mathrm{ch}\left[\beta_r(2a-x)/\gamma\right]}{\mathrm{sh}\left(2\beta_r a/\gamma\right)}\cdot\cos\left(\beta_r y\right)\right],$$

где $\gamma=\sqrt{\sigma_x/\sigma_y}$, $\Theta_i=\begin{cases}1, \text{ при } i\neq 0;\\ 1/2, \text{ при } i=0;\end{cases}$ $i=k,p,r$.

При расчетах холловского потенциала по выражению (12) необходимо учитывать, что оно должно обращаться в нуль при $n=p$ и $k=r$.

Теоретическое обоснование предлагаемой методики

Полученные выражения (5), (10) для потенциала электрического поля в области анизотропной полупроводниковой пленки прямоугольной формы позволяют теоретически обосновать методику совместного измерения компонент тензора удельной электропроводности и коэффициента Холла.

Рассмотрим первоначально измерения компонент тензора электропроводности (1). Для этого постоянный ток, величиной I_{14}, пропускается через зонды 1 и 4.

Тогда используя выражение (5), найдем падение напряжения между парами зондов 1, 2 и 3, 4 (рис. 1). В результате расчетов получим:

$$U_{12} = \frac{2I_{14}}{abd\sigma_x} Q_1, \tag{13}$$

$$Q_1 = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty}\left\{\Theta_k \frac{\sin(\alpha_n l_1)\cdot\sin(\alpha_n a_0)\cdot\cos(\beta_k b_0)}{\alpha_n^2+\gamma^2\beta_k^2}\times\right. \tag{14}$$
$$\left.\left[\cos(\alpha_n a_0)\cdot\cos(\beta_k(b_0-l_2))-\cos(\alpha_n(a_0-l_1))\cdot\cos(\beta_k b_0)\right]\right\}.$$

$$U_{34} = \frac{2I_{14}}{abd\sigma_x} Q_2, \tag{15}$$

$$Q_2 = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\Theta_n \frac{\sin(\beta_k l_2)\cdot\sin(\beta_k b_0)\cdot\cos(\alpha_n a_0)}{\alpha_n^2+\gamma^2\beta_k^2}\times\right. \tag{16}$$
$$\left.\left[\cos(\beta_k b_0)\cdot\cos(\alpha_n(a_0-l_1))-\cos(\beta_k(b_0-l_2))\cdot\cos(\alpha_n a_0)\right]\right\}.$$

Используя полученные выражения для напряжений (13) и (15), составим функцию их отношений:

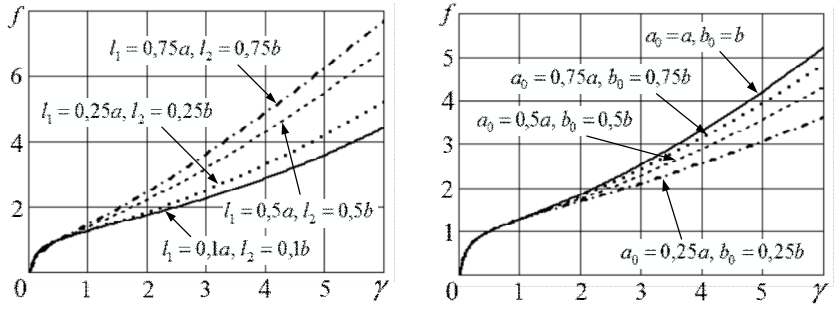
$$f(a,b,\gamma,a_0,b_0) = \frac{U_{12}}{U_{34}} = \frac{Q_1}{Q_2}. \tag{17}$$

Данная функция зависит от длины a, ширины b исследуемого образца, параметра анизотропии $\gamma = \sqrt{\sigma_y/\sigma_x}$ и координат центра измерительного пробника a_0 и b_0.

На рис. 2*а* представлены зависимости функции f от параметра анизотропии γ при различных положениях зондов относительно центра пробника. В этом случае для моделирования взяты следующие параметры: $a/b = 2, a_0 = a, b_0 = b$. Из приведенных кривых видно, что с уменьшением расстояния между зондами зависимость функции f от γ несколько снижается, но все еще остается достаточно наглядной для практических расчетов.

На рис. 2*б* изображены зависимости функции f от параметра анизотропии γ при изменении положения измерительного пробника на поверхности исследуемого образца. Видно, что при приближении зондов к краям образца кривая $f(\gamma)$ снижает свои значения, но остается достаточно наглядной для практического применения.

Перейдем к рассмотрению возможности измерения коэффициента Холла с ромбовидным расположением 4-х зондов на поверхности анизотропной полупроводниковой пленки.



а) *б)*

Рис. 2. Зависимости функции отношения напряжений от параметра анизотропии

Воспользуемся выражением (12) для потенциала холловского поля, чтобы найти э.д.с. Холла между зондами 3 и 4 (рис. 1):

$$\varepsilon_H = \phi_H^3\left(x = a_0, y = b_0 + l_2\right) - \phi_H^4\left(x = a_0, y = b_0 - l_2\right) = \frac{IR_z B}{d} \cdot Q, \quad (18)$$

где множитель Q в результате ряда математических упрощений [12, 13] принимает вид:

$$Q = \frac{l_1 l_2}{ab} + G_1 + G_2 + G_3 + G_4, \quad (19)$$

$$G_1 = \frac{2\gamma\, l_2}{ab} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{\cos\left(\beta_k b_0\right)}{\beta_k} \cdot \frac{\operatorname{sh}\left(\beta_k l_1/\gamma\right) \cdot \operatorname{ch}\left[\beta_k \left(a - a_0\right)/\gamma\right]}{\operatorname{ch}\left(\beta_k a/\gamma\right)} \right\}, \quad (20)$$

$$G_2 = -\frac{4\gamma\, b_0 l_2}{ab^2} \sum_{k=1,3,\ldots} \left\{ \frac{\cos\left(\beta_k b_0\right)}{\beta_k} \cdot \frac{\operatorname{sh}\left(\beta_k l_1/\gamma\right) \cdot \operatorname{ch}\left[\beta_k \left(a - a_0\right)/\gamma\right]}{\operatorname{ch}\left(\beta_k a/\gamma\right)} \right\}, \quad (21)$$

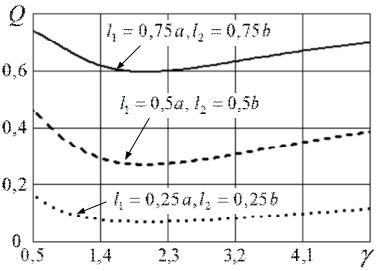
$$G_3 = \frac{4}{a^2} \sum_{n,p=1}^{\infty} \left\{ \left[1 - (-1)^{n+p}\right] \cdot \frac{\alpha_n \sin\left(\alpha_n l_1\right) \cdot \sin\left(\alpha_n a_0\right) \cdot \cos\left(\alpha_p a_0\right)}{\alpha_p \left(\alpha_n^2 - \alpha_p^2\right)} \times \right.$$
$$\left. \times \frac{\operatorname{sh}\left(\gamma\alpha_p b_0\right) \cdot \operatorname{ch}\left(\gamma\alpha_n b_0\right) + \operatorname{sh}\left[\gamma\alpha_p \left(2b - b_0\right)\right] \cdot \operatorname{ch}\left[\gamma\alpha_n \left(2b - b_0\right)\right]}{\operatorname{sh}\left(2\gamma\alpha_p b\right) \cdot \operatorname{sh}\left(2\gamma\alpha_n b\right)} \cdot \operatorname{sh}\left(\gamma\alpha_p l_2\right) \right\}, \quad (22)$$

$$G_4 = -\frac{4}{b^2} \sum_{k,r=1}^{\infty} \left\{ \left[1 - (-1)^{k+r}\right] \cdot \frac{\beta_k \cdot \cos\left(\beta_k b_0\right) \cdot \sin\left(\beta_r b_0\right) \cdot \sin\left(\beta_r l_2\right)}{\beta_r \left(\beta_k^2 - \beta_r^2\right)} \times \right.$$
$$\left. \times \frac{\operatorname{sh}\left(\beta_k a_0/\gamma\right) \cdot \operatorname{ch}\left(\beta_r a_0/\gamma\right) + \operatorname{sh}\left[\beta_k \left(2a - a_0\right)/\gamma\right] \cdot \operatorname{ch}\left[\beta_r \left(2a - a_0\right)/\gamma\right]}{\operatorname{sh}\left(2\beta_k a/\gamma\right) \cdot \operatorname{sh}\left(2\beta_r a/\gamma\right)} \cdot \operatorname{sh}\left(\beta_k l_1/\gamma\right) \right\}. \quad (23)$$

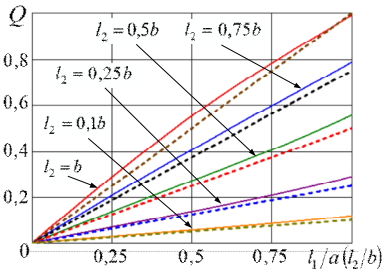
Заметим следующие особенности выражения (19): 1) при расположении зондов на краях образца множитель $Q=1$, что совпадает с известной формулой Ван дер Пау [3, 14]; 2) в случае изотропного образца, т.е. при $\gamma=1$ и при расположении пробника в центре плоской поверхности исследуемого кристалла, т.е. при $a_0=a,\ b_0=b$, выражение для множителя Q совпадает с результатом работы [15]; 3) выражение (19) записано в виде суммы рядов $G_i\ (i=1,2,3,4)$ для дальнейшего удобства анализа; 4) значение э.д.с. Холла зависит от множителя Q, поэтому в дальнейшем будем анализировать только его.

При исследовании поведения множителя Q от различных параметров, учитывающих геометрию образца, его проводимость и расположение зондов на поверхности, будем придерживаться следующих числовых значений: $a/b=2$, $a/d=0{,}25\cdot10^{-4}$, $a_0=a, b_0=b$.

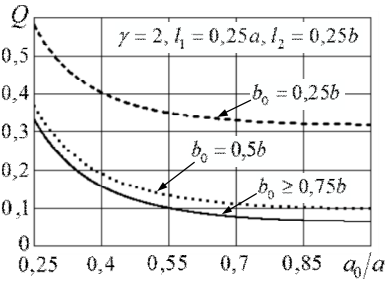
На рис. 3 представлены зависимости множителя Q от различных параметров. Так на рис. 3*а* изображены кривые, показывающие изменение значение множителя Q от параметра анизотропии электропроводимости $\gamma\in[0{,}5;5]$ при некоторых разных положениях зондов относительно центра измерительного пробника. Видно, что кривые имеют схожий между собой вид, а увеличение интервалов изменений множителя Q связано с увеличением расстояния между токовыми и измерительными зондами, в связи с чем анизотропия образца проявляет себя более явно. Кривые зависимостей $Q=Q(\gamma)$ имеют минимум примерно в одной области значений параметра γ. Теоретический анализ изучения влияния γ на ряды $G_i\,(i=1,2,3,4)$ позволяет это объяснить следующим образом: при небольших γ больший вклад в зависимость вносит ряд G_3, определяемый выражением (22), значение которого уменьшается в области $\gamma\approx2$. При больших значениях γ возрастает влияние ряда G_4, находимого выражением (23), а значения G_3 близко к нулю. Следует отметить, что ряд G_2, определяемый выражением (21), практически не зависит от параметра анизотропии γ и его вкладом в значение множителя Q с погрешностью менее 0,01% можно в этом случае пренебречь. Зависимости ряда G_1 от γ достаточно явная и пренебрегать им нельзя.



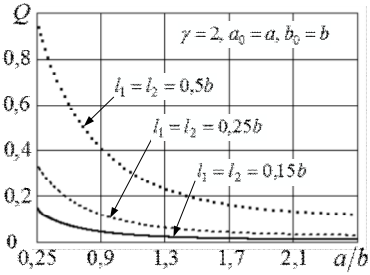
а) Зависимость Q от параметра анизотропии образца γ



б) Зависимость Q от параметра l_1 (зависимость $Q(l_2)$ аналогична)



в) Зависимость Q от параметра a_0 (зависимость $Q(b_0)$ аналогична)



г) Зависимость Q от относительного размера образца a/b

Рис. 3. Кривые зависимостей множителя Q от различных параметров образца и измерительного пробника

Таким образом, из анализа кривых $Q = Q(\gamma)$ можно сделать следующие выводы: 1) если $0{,}5 \le \gamma \le 1{,}3$, то рядом G_4 с погрешностью менее 2% можно пренебречь; 2) если $2 \le \gamma \le 5$, то с погрешностью до 3% можно опустить расчет ряда G_3; 3) если $1{,}3 < \gamma < 2$, то пренебрегать G_3 и G_4 можно в случае, если допустима погрешность в 10%; 4) при любых γ ряд G_2 можно не учитывать.

На рис. 3*б* представлены зависимости множителя Q от параметра l_1 расстояния токовых зондов относительно центра измерительного пробника при различных значениях расстояния измерительных зондов относительно центра. Для моделирования выбраны следующие значения: $\gamma = 2$, $a_0 = a$, $b_0 = b$. Заметим, что зависимости Q от параметра l_2, задающего расстояние измерительных зондов

от центра четырехзондового пробника, полностью идентичны кривым $Q(l_1)$ при соответствующих значениях l_1. На графиках для сравнения пунктирными линиями представлены прямые зависимости дроби $(l_1 l_2)/(ab)$ от l_1 при соответствующих значениях параметра l_2. Из представленных на рисунке графиков $Q(l_1)$ можно сделать вывод, что в пределах 5% погрешности рядами в выражении (19) можно полностью пренебречь, считая множитель $Q = (l_1 l_2)/(ab)$. Погрешность такого пренебрежения будет тем меньше, чем ближе зонды друг к другу. В отклонение множителя Q от линейных функций $Q(l_1)$ наибольший вклад вносят ряды G_1 и G_4 (их вклад составляет до 40% от общего значения Q). Рядами G_2 и G_3 даже при самых больших значениях l_1 можно пренебречь с погрешностью менее 10%. Заметим, что подобная картина наблюдается для образцов с относительными размерами $a/b > 1{,}5$.

На рис. 3*в* представлены кривые зависимости множителя Q от изменения положения измерительного пробника вдоль оси Ox при некоторых разных значениях второй координаты центра пробника b_0. При моделировании были использованы следующие параметры: $l_1 = 0{,}25a$, $l_2 = 0{,}25b$, $\gamma = 2$. Все остальные параметры остались без изменения. Изменение координаты центра a_0 происходило в пределах от $0{,}25a$ до a, дальнейший диапазон был опущен из-за симметрично поставленной задачи, т.е. дальнейшее увеличение a_0 будет полностью идентичным представленному в обратном порядке. Анализ кривых $Q(a_0)$ позволяет сделать следующие выводы: значение множителя довольно сильно зависит от положения зондового пробника на поверхности исследуемого кристалла – при непосредственной близости к краю образца даже небольшое изменение в положении вносит довольно весомый вклад в значение множителя Q; в средней части образца из-за достаточной отдаленности границ кристалла положение измерительного пробника можно варьировать в пределах 3% погрешности в диапазоне $0{,}7 \le a_0/a \le 1{,}3$, что, несомненно, довольно значимо при проведении эксперимента. При расчётах множителя Q в этом случае в пределах менее 4% погрешности рядом G_2, определяемым выражением (21), можно пренебречь; остальные ряды в (19) вносят существенный вклад в значение Q.

Зависимость множителя Q от координаты b_0, определяющей положение измерительного пробника вдоль оси Oy, полностью совпадет с кривыми, представленными на рис. 3*в*, при соответствующей

замене значений параметра b_0 на a_0. Тогда в области $0{,}7 \le b_0/b \le 1{,}3$ в пределах 3% погрешности можно варьировать положение центра измерительного пробника.

Таким образом, в средней части исследуемого кристалла прямоугольной формы при $a/b > 1{,}5$ с погрешностью в пределах 5% множитель Q можно рассчитывать по следующей формуле:

$$Q = \frac{l_1 l_2}{ab}. \qquad (24)$$

Интерес представляет также анализ зависимости множителя Q от размеров исследуемого образца. На рис. 3*г* представлены кривые $Q(a/b)$. Анализ этих зависимостей позволяет сделать следующие выводы: 1) при $a \ge 2b$ множитель Q перестает зависеть от размеров образца в пределах погрешности менее 3% и будет определяться формулой (24); 2) чем ближе зонды находятся друг к другу, тем менее явная зависимость Q от размеров образца.

Методика совместного измерения компонент тензора удельной электропроводности и коэффициента Холла

Проведенный анализ полученных выражений (17) и (19) позволяет предложить методику совместного локального измерения компонент тензора удельной электропроводимости и коэффициента Холла.

Измерение компонент тензора электропроводимости

1. Измерить геометрические размеры исследуемого кристалла: длину $2a$, ширину $2b$ и толщину d. Заметим, что образец должен быть вырезан вдоль главных направлений тензора электропроводимости (1), а также необходимо, чтобы было выполнение условий $d << a, b, l_1, l_2$.

2. Расположить измерительный четырехзондовый пробник на плоской поверхности кристалла согласно схеме, представленной на рис. 1. Определить координаты центра пробника (a_0, b_0) и измерить параметры l_1 и l_2.

3. По определенным параметрам построить теоретическую зависимость функции отношения напряжений между зондами 1, 2 и 3, 4 $f^{meop} = U_{12}/U_{34}$ от параметра анизотропии γ.

4. Пропуская постоянный ток силой I_{14} через зонды 1 и 4 произвести измерения соответствующих напряжений U_{12} и U_{34}, найти

их отношение. Полученный результат является экспериментальным значением для функции $f^{экс}$.

5. По теоретическому графику $f^{теор}(\gamma)$ путем приравнивания $f^{экс} = f^{теор}$, найти значение параметра анизотропии γ.

6. Зная γ, вычислить значение множителя Q_1 или Q_2 путем расчетов по выражениям (14), (16) или по теоретически построенной кривой $Q_i(\gamma)$, где $i = 1,2$.

7. Из формулы (13) или (15) найти компоненту σ_x:

$$\sigma_x = \frac{2I_{14}}{abdU_{12}}Q_1 \quad \text{или} \quad \sigma_x = \frac{2I_{14}}{abdU_{34}}Q_2, \tag{25}$$

где I_{14} и U_{12} или U_{34} определены экспериментально.

8. Зная параметр анизотропии γ и компоненту σ_x, вычислить σ_y по формуле:

$$\sigma_y = \gamma^2 \sigma_x. \tag{26}$$

Измерение коэффициента Холла

9. Не меняя расположения зондов на поверхности, путем переключений во внешней цепи, пропустить постоянный ток силой I_{12} через зонды 1 и 2. Измерить напряжение U_{34}^0 между зондами 3 и 4 без магнитного поля.

10. Включить постоянное магнитное поле индукцией B направленной вдоль оси Oz и повторно измерить напряжение U_{34}^B между зондами 3 и 4 в магнитном поле.

11. Определить э.д.с. Холла, как разность полученных значений напряжений $\varepsilon_H = U_{34}^B - U_{34}^0$.

12. Вычислить компоненту тензора коэффициента Холла R_Z по формуле, полученной из (18):

$$R_Z = \frac{\varepsilon_H d}{I_{12}BQ}, \tag{27}$$

где множитель Q рассчитан по выражению (19) или (24) с учетом проведенного выше анализа.

Практические рекомендации применения предлагаемой методики измерений: 1) для уменьшения влияния границ кристалла рекомендуется проводить измерения в центральной части образца; 2) для снижения сопутствующих измерениям нежелательных эффектов

(эффекты Нернста-Этинсгаузена, Риги-Ледюка и др.) [1] необходимо все измерения проводить при малых значениях сил токов ($I \le 30\,\text{мА}$) и как можно быстрее (время одного измерения $t \le 10\,\text{с}$); 3) асимметрию расположения измерительных зондов можно устранить применяя компенсационный метод.

Таким образом, предложенная методика, основанная на сравнении теоретически рассчитанных величин и экспериментально полученных их значений, позволяет производить одновременные измерения электропроводимости и коэффициента Холла в анизотропной пленке. К ***достоинствам данной методики*** можно отнести следующее: 1) не требуется создания специальной тестовой структуры с контактами по граням кристалла; 2) расположение зондов на поверхности может варьироваться в пределах границы образца, что позволяет вести постоянный контроль параметров кристалла в процессе нанесения частей микросхемы на кристалл; 3) методика позволяет произвести измерения достаточно быстро, т.е. является экспрессной; 4) все переключения токов и измеряемых напряжений производятся во внешней цепи; 5) появляется возможность контроля однородности распределения электрофизических параметров по всей плоской поверхности кристалла.

Литература

1. Кучис, Е.В. Гальваномагнитные эффекты и методы их исследования / Е.В. Кучис. – М.: Радио и связь, 1990. – 264 с.

2. Батавин, В.В. Измерение параметров полупроводниковых материалов и структур / В.В. Батавин, Ю.А. Концевой, Ю.В. Федорович. – М.: Радио и связь, 1985. – 264 с.

3. Поляков, Н.Н. Кинетические явления в ограниченных анизотропных и неоднородных полупроводниках: Дис. д-ра физ.-мат. наук: 01.04.10 / Н.Н. Поляков. – Липецк, 1995. – 308 с.

4. Филиппов, В.В. Четырехзондовый метод совместных измерений компонент тензора удельной электропроводности и коэффициента Холла анизотропных полупроводниковых пленок / В.В. Филиппов // Приборы и техника эксперимента. – 2012. - № 1. – С. 112-117.

5. Аскеров, Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках / Б.М. Аскеров. – М.: Наука, 1985. – 320 с.

6. Ландау, Л.Д. Электродинамика сплошных сред. Теоретическая физика. Т.8 / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2003. – 656 с.

7. Филиппов, В.В. Явления электронного переноса в анизотропных и низкоразмерных полупроводниковых структурах: Дис. д-ра. физ.-мат. наук: 01.04.10 / В.В. Филиппов. – Липецк, 2012. – 358 с.

8. Филиппов, В.В. Методы измерения и контроля коэффициентов электронного переноса анизотропных полупроводников: монография / В.В. Филиппов, Н.Н. Поляков. – Липецк: ЛГПУ, 2011. – 110 с.

9. Эдвардс, Р. Ряды Фурье в современном изложении. В 2-х томах. Т. 1 / Р. Эдвардс. – М.: Мир, 1985. – 264 с.

10. Коньков, В.Л. Об измерении постоянной Холла полупроводниковых пленок методом зондов / В.Л. Коньков // Физика твердого тела. – 1964. – Т. 6. - № 1. – С. 308-310.

11. Буш, Г. Определение характеристических параметров полупроводников / Г. Буш, У. Винклер. – М.: Издательство иностранной литературы, 1959. – 140 с.

12. Двайт, Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы / Г.Б. Двайт. – М.: Наука, 1966. – 228 с.

13. Прудников, А.П. Интегралы и ряды. В 3 томах. Т1. Элементарные функции / А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. – М.: Физматлит, 2003. – 632 с.

14. Van der Pauw, L.J. A method of measuring the specific resistivity and Holl coefficient of disc of arbitrary shape / L.J. Van der Pauw // Phil. Rec. Rep. – 1958. – V.13. - №1. – P. 1-9.

15. Поляков, Н.Н. Измерение проводимости и э.д.с. Холла прямоугольных полупроводниковых образцов пробников с квадратным расположением зондов / Н.Н. Поляков, Р.А. Рубцова // Заводская лаборатория. – 1970. – Т. 36. - № 10. – 1207-1211.

LOCAL FOUR-PROBE METHOD JOINT MEASUREMENT COMPONENTS OF THE TENSOR CONDUCTIVITY AND COEFFICIENT HALL IN ANISOTROPIC SEMICONDUCTOR FILMS

A.A. Zavorotniy[1,2]

[1]Lipetsk State Pedagogical University n.a. P.P. Semenov-Tyan-Shanskiy
[2]Lipetsk Cossack Institute of Technologies and Management (branch)
"Moscow State University of Technologies and Management n.a.
K.G. Razumovsky (the First Cossack University)"

On the basis of the solution of the boundary problem of electrodynamics to distribute the electric field potential offered an original technique of joint measurement of the components of the tensor conductivity and Hall coefficient in anisotropic semiconductor films four-probe method with a diamond-shaped arrangement of probes on the surface. Particular attention is paid to the local measurements and boundaries of the film effect on the results

Keywords: anisotropic semiconductor four-probe method, local measurements, the tensor conductivity, Hall coefficient, a correction factor

УДК 537.311.322

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА ВЗАИМОВЛИЯНИЯ КОНТАКТОВ МЕТАЛЛ-АНИЗОТРОПНЫЙ ПОЛУПРОВОДНИК НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДРУГ ДРУГА

А.А. Заворотний[1, 2], В.В. Филиппов[1]

[1]Липецкий государственный педагогический университет имени П.П. Семенова-Тян-Шанского
[2]Липецкий казачий институт технологий и управления (филиал) ФГБОУ ВО «Московский государственный университет технологий и управления имени К.Г. Разумовского (Первый казачий университет)»
aazavorotniy@mail.ru

В работе на основе решения краевых задач электродинамики по распределению потенциала электрического поля в области полупроводника, обладающего анизотропией удельной электропроводности, рассматривается новый эффект влияния омических токовых электродов на электрофизические характеристики друг друга. Показано, что данный эффект в анизотропных образцах выражен особенно ярко и достигает величины сравнимой с их объемным сопротивлением

Ключевые слова: омический контакт металл-анизотропный полупроводник, контактное сопротивление, сопротивление растекания токового электрода

Проблема обеспечения надежности контактов является одной из самых важных в электронике. Получать информацию о свойствах электрического электрода можно путем измерения его сопротивления R_E постоянному току, которое складывается из омического сопротивления полупроводника R_{12} и переходного сопротивления контактов R_C металл-полупроводник (в идеальных контактах R_C стремится к нулю) [1-5]. В ряде случаев величина R_C может быть достаточно близкой по значению к объемному сопротивлению образца, что объясняется различными негативными (в данном случае) факторами [6]: наличием потенциального барьера между контактирующими материалами, окислением подконтактной поверхности, нежелательными примесями и др. Основная трудность определения переходного сопротивления состоит в том, что по величине экспериментально измеренного значения сопротивления R_E между контактами невозможно судить, какая часть его относится к омическому сопро-

тивлению структуры металл-полупроводник R_{12}, а какая часть к сопротивлению контактов R_C. В данной работе эта проблема решена путем теоретического вычисления R_{12}.

Целью данного исследования является разработка способа измерения сопротивления контактов металл-полупроводник. Для ее достижения в работе построены математические модели, адекватные условиям физического эксперимента. На основе этих моделей предложена методика измерения сопротивления контактов. Рассмотрены наиболее часто встречающиеся возможные случаи расположения токовых электродов на боковых гранях образца (геометрические размеры: a – длина, b – ширина, d – толщина), вырезанного вдоль главных направлений тензора удельной электропроводности $\hat{\sigma}$ [5], и проведен соответствующий анализ полученных выражений для сопротивления растекания этих контактов к образцу.

1. Сопротивление растекания двух токовых контактов, расположенных на противоположных гранях. Рассмотрим ситуацию, когда через электроды шириной $2c_i$ $(i = 1, 2)$, расположенные на противоположных гранях анизотропного образца, пропускается постоянный ток силой I. Положения контактов 1 и 2 задаются параметрами b_i (рис. 1*а*).

Процедура вычисления сопротивления структуры металл-полупроводник следующая: используя выражение для потенциала электрического поля, взятого из работ [7-9], вычисляется напряжение между токовыми контактами, а затем находится сопротивление растекания R_{12} постоянному току. В результате итоговое выражение имеет следующий вид:

$$R_{12} = R_0 + R_{s1} + R_{s2} + R_{s12} = R_0(1 + Q_1 + Q_2 + Q_{12}), \qquad (1)$$

где R_0 – объемное сопротивление образца; R_{s1}, R_{s2} – сопротивление растекания первого и второго электродов соответственно; R_{s12} – сопротивление, обусловленное взаимным влиянием контактов на сопротивление растекания друг друга:

$$R_0 = \frac{a}{\sigma_x db}; \quad R_{s1} = \frac{a}{\sigma_x db} Q_1; \quad R_{s2} = \frac{a}{\sigma_x db} Q_2; \quad R_{s12} = \frac{a}{\sigma_x db} Q_{12}; \qquad (2)$$

$$Q_i = \frac{2}{a} \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{\sin^2(\alpha_k c_i)}{(\alpha_k c_i)^2} \cdot \frac{\cos^2(\alpha_k b_i)}{\gamma \alpha_k} \cdot \frac{\mathrm{ch}(\gamma \alpha_k a)}{\mathrm{sh}(\gamma \alpha_k a)} \right\}, \text{ где } i = 1, 2; \qquad (3)$$

$$Q_{12} = \frac{4}{a}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\frac{\sin(\alpha_k c_1)\sin(\alpha_k c_2)}{\alpha_k^2 c_1 c_2}\cdot\frac{\cos(\alpha_k b_1)\cos(\alpha_k b_2)}{\gamma\alpha_k \mathrm{sh}(\gamma\alpha_k a)}\right\}. \qquad (4)$$

В выражениях (3) и (4) использованы следующие обозначения: σ_x, σ_y – значения удельной проводимости вдоль оси X и Y соответственно (главные направления тензора $\hat{\sigma}$), $\alpha_k = \pi k/b$, $\gamma = \sqrt{\sigma_y/\sigma_x}$ – параметр анизотропии образца.

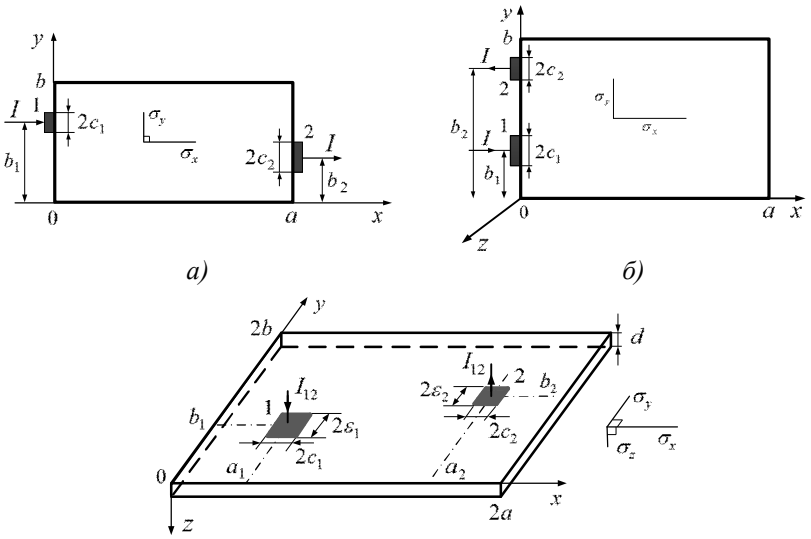
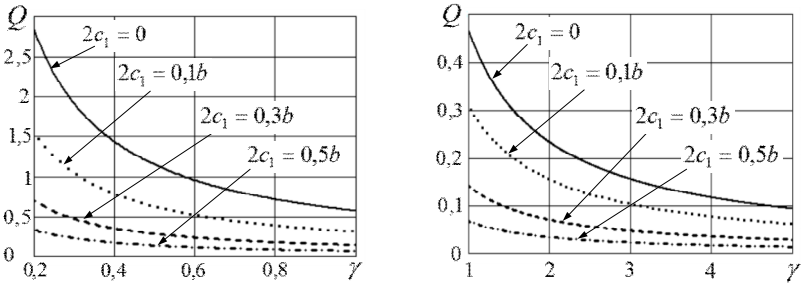


Рис. 1. Схемы расположения токовых контактов на образце

Безразмерные множители $Q_i = Q$ определяют величину сопротивления растекания и позволяют сравнивать R_{si} с R_0.

На рис. 2 представлены графики зависимостей множителя Q, определяемого выражением (3), от параметра анизотропии $\gamma \in [0{,}2;\ 5]$ при $b_1 = b/2$, $a/b = 2$. Для наглядности данные зависимости разбиты на два рисунка. Из представленных графиков видно, что сопротивление растекания токового электрода R_{s1} вносит достаточно большой вклад в общее сопротивление системы контакт-анизотропный полупроводник. Из рис. 2*б* можно сделать вывод, что выражением (5) для сопротивления растекания в пределах инструментальной погрешности 5% можно пренебречь только в случае достаточно широких контактов ($2c_1 > 0{,}5b$) и при $\gamma > 1$.



а) *б)*

Рис. 2

На рис. 3 представлена зависимость множителя Q от относительной ширины токовых электродов $2c_1/b$ для анизотропного образца ($\gamma = 0{,}5$) при различных относительных размерах a/b и $b_1 = b/2$. Из графиков видно, что сопротивлением растекания контактов можно пренебречь в пределах инструментальной погрешности 5% для любых размеров образца, если относительная ширина будет $2c_1/b \geq 0{,}7$. Во всех остальных случаях R_{s1} в несколько раз больше объемного сопротивления R_0 [8].

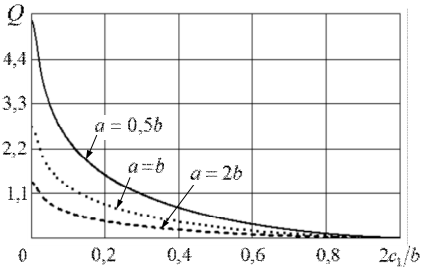


Рис. 3

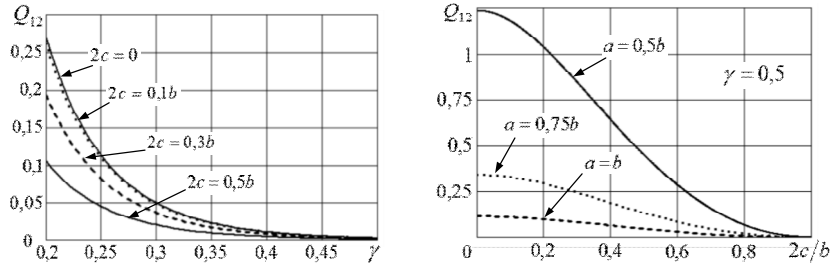
Рассмотрим множитель Q_{12}, определяемый выражением (4), отвечающий за взаимовлияние токовых контактов на характеристики друг на друга. Представим его в виде

$$Q_{12} = R_{s12}/R_0\,, \qquad (5)$$

что позволяет сравнивать взаимовлияние с объемным сопротивлением образца.

На рис. 4*а* представлены зависимости Q_{12} от параметра анизотропии полупроводникового образца γ для разных относительных размеров ширины контактов $2c/b$ (где $c = c_1 = c_2$) при $a/b = 2$, $b_1 = b_2 = 0{,}5b$. Из графиков видно, что множителем Q_{12} можно пренебречь в пределах 1% погрешности при $\gamma = \sqrt{\sigma_y/\sigma_x} \geq 0{,}4$. При $\gamma < 0{,}4$ токовые электроды оказывают влияние на сопротивление друг друга сравнимое с объемным сопротивлением полупроводника,

достигая при точечных контактах ($2c \approx 0$) $\approx 27\%$ всего сопротивления образца (см. выражение (4)).



а) *б)*

Рис. 4

На рис. 4*а* представлена также кривая зависимости Q_{12} от γ для точечных контактов ($2c \approx 0$). Видно, что в пределах 0,5% погрешности токовые контакты можно считать точечными уже при относительной их ширине $2c/b \sim 0{,}1b$.

На рис. 4*б* представлены зависимости множителя Q_{12} от относительной ширины токовых контактов для полупроводниковых кристаллов с относительными геометрическими размерами $a/b \le 1$. Из графиков видно, что в анизотропных образцах в случае преобладания проводимости вдоль оси *Ox*, т.е. при $\gamma < 1$, Q_{12} вносит вклад сравнимый в объемным сопротивлением полупроводникового кристалла.

Проведенный анализ полученного выражения (1) для сопротивления кристалла позволяет сделать следующие выводы:

1. Сопротивление полупроводникового образца R_{12} можно представить в виде суммы объемного сопротивления R_0 и сопротивлений растекания токовых контактов R_{s1} и R_{s2} каждого в отдельности.

2. Величиной R_{s12}, определяемой выражениями (2) и (4), в случаях, когда $a/b > 1$ и $\gamma > 0{,}4$ можно пренебречь.

3. Полученные ряды (3), (4) достаточно хорошо сходятся и при практическом их использовании можно ограничится 75 членами ряда, что позволяет находить значения величин с точностью до 0,01%.

2. Сопротивление растекания двух токовых контактов, расположенных на одной грани образца. Рассмотрим случай расположения токовых контактов на одной грани исследуемого анизотропного образца (см. схему на рис. 1*б*).

Сопротивление структуры металл-полупроводник находится аналогично:

$$R_{12} = R_{s1} + R_{s2} + R_{s12} = R_0\left(Q_1 + Q_2 + Q_{12}\right), \qquad (6)$$

где R_0 – объемное сопротивление образца, R_{s1}, R_{s2} – сопротивления растекания первого и второго токовых контактов, R_{s12} – сопротивление, обусловленное взаимным влиянием электродов:

$$R_0 = \frac{a}{\sigma_x db};\quad R_{s1} = \frac{a}{\sigma_x db}Q_1;$$
$$R_{s2} = \frac{a}{\sigma_x db}Q_2;\quad R_{s12} = \frac{a}{\sigma_x db}Q_{12}; \qquad (7)$$

$$Q_i = \frac{2}{a}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\frac{\sin^2\left(\alpha_k c_i\right)}{\left(\alpha_k c_i\right)^2}\cdot\frac{\cos^2\left(\alpha_k b_i\right)}{\gamma\alpha_k}\cdot\operatorname{cth}\left(\gamma\alpha_k a\right)\right\},\quad \text{где } i = 1,2; \qquad (8)$$

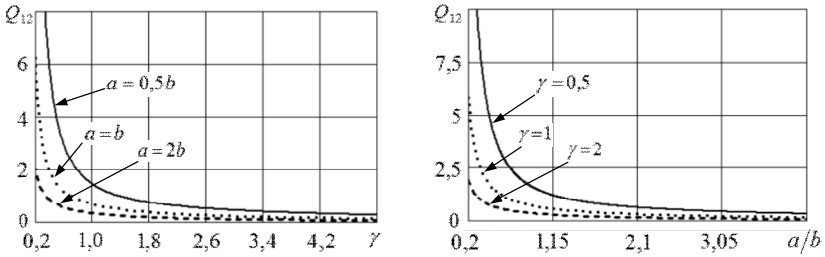
$$Q_{12} = -\frac{4}{a}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\frac{\sin\left(\alpha_k c_1\right)\cdot\sin\left(\alpha_k c_2\right)}{\alpha_k^2 c_1 c_2}\cdot\frac{\cos\left(\alpha_k b_1\right)\cdot\cos\left(\alpha_k b_2\right)}{\gamma\alpha_k}\cdot\operatorname{cth}\left(\gamma\alpha_k a\right)\right\}. \qquad (9)$$

Значения множителей Q_i, определяемые выражением (8), графически представлены на рис. 2 и рис. 3.

Множитель Q_{12}, определяемый выражением (9), отличен от аналогичного ему выражения (4) поскольку здесь идет учет достаточно сильного влияния токовых контактов на сопротивление растекания друг друга из-за их близкого расположения (на одной грани кристалла). На рис. 5*а* представлены зависимости Q_{12} от параметра анизотропии γ при разных относительных размерах полупроводника a/b, а на рис. 5*б* зависимости данного множителя от a/b при некоторых значениях γ. При моделировании были использованы следующие параметры: $2c_1 = 2c_2 = 2c = 0{,}05b$, $b_1 = b_2 = 0{,}5b$.

Графики на рис. 5 позволяют сделать следующие выводы: выражением, определяющим взаимное влияние токовых контактов друг на друга в подавляющем большинстве случаев пренебрегать нельзя, т.к. множитель Q_{12} достаточно сильно зависит и от анизотропии кристалла и от относительных размеров самого образца.

Результаты моделирования зависимостей множителя Q_{12} от относительной ширины токовых контактов $2c/b$ показали, что в пределах погрешности расчетов в 3% данными зависимостями можно пренебречь при любых $2c/b < 0{,}5$.



а) *б)*

Рис. 5

3. Сопротивление растекания двух токовых контактов, находящихся на поверхности образца (трехмерный случай). В случае, если токовые контакты располагаются на поверхности анизотропной прямоугольной пластины, вырезанной вдоль главных направлений тензора удельной электропроводимости (рис. 1*в*), то необходимо рассматривать распределение потенциала электрического поля в трехмерной модели. Геометрические размеры образца и токовых электродов в этом случае, а также параметры, задающие их положение на поверхности кристалла представлены на рис. 1*в*. Выражение для потенциала в этом случае также берется из работы [9] и в результате расчета сопротивления структуры получается следующее выражение, представимое в следующем виде:

$$R_{12} = R_{s1} + R_{s2} - R_{s12} = R_0\left(Q_1 + Q_2 - Q_{12}\right), \tag{10}$$

где R_0 – объемное сопротивление образца; R_{s1}, R_{s2} – сопротивление растекания соответственно первого и второго токовых контактов; R_{s12} – выражение, учитывающее влияние контактов на электрофизические характеристики друг друга:

$$R_0 = \frac{d}{4ab\sigma_z}, \quad R_{s1} = R_0 Q_1, \quad R_{s2} = R_0 Q_2, \quad R_{s12} = R_0 Q_{12}; \tag{11}$$

$$Q_i = \frac{4}{d}\sum_{n,k=1}^{\infty}\left\{\Theta_n\Theta_k\frac{\operatorname{ch}\left(\eta_{nk}d\right)}{\eta_{nk}\cdot\operatorname{sh}\left(\eta_{nk}d\right)}\cdot\left[\frac{\sin\left(\alpha_n c_i\right)\cdot\cos\left(\alpha_n a_i\right)}{\alpha_n c_i}\right]^2\times\right.$$
$$\left.\times\left[\frac{\sin\left(\beta_k\varepsilon_i\right)\cdot\cos\left(\beta_k b_i\right)}{\beta_k\varepsilon_i}\right]^2\right\}, \text{ где } i = 1,2; \tag{12}$$

$$Q_{12} = \frac{8}{d}\sum_{n,k=1}^{\infty}\left\{\Theta_n\Theta_k\frac{\mathrm{ch}(\eta_{nk}d)}{\eta_{nk}\cdot\mathrm{sh}(\eta_{nk}d)}\cdot\frac{\sin(\alpha_n c_1)\cdot\cos(\alpha_n a_1)}{\alpha_n c_1}\times\right.$$
$$\left.\times\frac{\sin(\alpha_n c_2)\cdot\cos(\alpha_n a_2)}{\alpha_n c_2}\cdot\frac{\sin(\beta_k\varepsilon_1)\cdot\cos(\beta_k b_1)}{\beta_k\varepsilon_1}\frac{\sin(\beta_k\varepsilon_2)\cdot\cos(\beta_k b_2)}{\beta_k\varepsilon_2}\right\}. \quad (13)$$

В (12) и (13) использованы следующие обозначения: $\alpha_n = \pi n/2a$, $\beta_k = \pi k/2b$, $\eta_{nk}^2 = (\gamma_1\alpha_n)^2 + (\gamma_2\beta_k)^2$, $\gamma_1 = \sqrt{\sigma_x/\sigma_z}$, $\gamma_2 = \sqrt{\sigma_y/\sigma_z}$, $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ – удельные проводимости в области образца вдоль осей Ox, Oy, Oz соответственно, $\Theta_i = \begin{cases}1, & \text{при } i \neq 0;\\ 1/2, & \text{при } i = 0;\end{cases}$ $i = n, k$, a_1, a_2 – параметры, задающие положение контактов 1 и 2 вдоль оси Ox, b_1, b_2 – параметры, задающие положение вдоль оси Oy. Размеры токовых электродов и полупроводникового образца приведены на рис. 1*в*.

Выражение (12) по виду совпадает с выражением (8) для двумерного случая с расположением контактов на одной грани. Отличие лишь в том, что (12) учитывает распределение тока в трехмерном случае. Ввиду сказанного анализ множителей, описываемых выражениями (12) и (13), опустим из-за явной аналогии.

Рассмотренные случаи расположения токовых контактов на периметре полупроводникового образца позволяют предложить следующую ***методику измерения контактного сопротивления***:

1. Через контакты 1 и 2 пропустить постоянный ток I_{12} (во избежание нагревания электродов и исследуемого образца значение тока I_{12} должно быть порядка 10 мА, а измерения должны проводиться достаточно быстро).

2. Измерить экспериментально напряжение U_E между токовыми контактами 1 и 2.

3. Вычислить сопротивление системы металлический контакт-полупроводник по закону Ома:

$$R_E = U_E/I_{12}. \quad (14)$$

На основании рассмотренных выше математических моделей можно утверждать, что полученное таким образом сопротивление R_E между электродами является суммой сопротивления растекания первого и второго контактов, объемного сопротивления, слагаемого, отвечающего за влияние электродов на сопротивление растекания друг друга, и суммарного сопротивления двух токовых контактов R_C:

$$R_E = R_{s1} + R_{s2} + R_0 + R_{s12} + R_C. \quad (15)$$

4. По соответствующим случаям расположения токовых контактов вычислить все слагаемые выражения (15), кроме R_C.

Заметим, что для расчетов соответствующих сопротивлений необходимо знать компоненты тензора удельной электропроводности и значение параметра анизотропии $\gamma = \sqrt{\sigma_y / \sigma_x}$ (в двумерном случае) или $\gamma_1 = \sqrt{\sigma_x / \sigma_z}$, $\gamma_2 = \sqrt{\sigma_y / \sigma_z}$ (в трехмерном случае).

5. Из выражения (15) определить суммарное сопротивление двух токовых контактов R_C, по значению которого можно судить о качестве изготовленных металлических контактов.

Заметим, что вычисление сопротивление каждого контакта в отдельности в рассмотренных случаях невозможно. При необходимости этого изготавливается тестовая структура, в которой один из контактов имеет ширину всей боковой грани образца и является заземленным [8].

Предложенная в этой работе методика определения сопротивления контактов имеет определенные достоинства. Она проста в реализации, и при условии применения ЭВМ может быть использована для оперативного контроля качества изготовленных электродов и кристаллов в условиях заводской лаборатории. Погрешность определения сопротивления контактов и удельной электропроводности складывается из двух составляющих: погрешности при выводе расчетных формул и погрешности измерительной аппаратуры. Непосредственное решение краевых задач электродинамики проведено методом Фурье без приближений [7, 9]. С учетом этого погрешность предлагаемого метода фактически определяется погрешностью измерительной аппаратуры.

Предлагаемая методика прошла успешную апробацию на анизотропных полупроводниковых кристаллах группы A_2B_5 ($CdAs_2$, $ZnAs_2$, CdSb) [10].

Таким образом, предложенная методика измерения сопротивления контактов металл-полупроводник может быть использована в научных исследованиях и производственных испытаниях полупроводниковых материалов.

Литература

1. Родерик, Э.Х. Контакты металл-полупроводник / Э.Х. Родерик. – М.: Радио и связь, 1982. – 208 с.

2. Бланк, Т.В. Механизмы протекания тока в омических контактах металл-полупроводник / Т.В. Бланк, Ю.А. Гольдберг // ФТП. – 2007. – Т. 41. - №11. – С. 1281-1308.

3. К вопросу об учете растекания тока в полупроводнике при определении переходного сопротивления омических контактов / А.Н. Андреев [и др.] // ФТП. – 1998. – Т. 32. - №7. – С. 832-838.

4. Батавин, В.В. Измерение параметров полупроводниковых материалов и структур / В.В. Батавин, Ю.А. Концевой, Ю.В. Федорович. – М.: Радио и связь, 1985. – 264 с.

5. Поляков, Н.Н. Измерение сопротивления контактов металл-полупроводник путем определения сопротивления растекания / Н.Н. Поляков, С.В. Мицук, В.В. Филиппов // Заводская лаборатория. Диагностика материалов, 2007. – Т. 73. - №4. – С. 35-39.

6. К вопросу о механизме формирования контактного сопротивления на шлифованных образцах n-Si / А.В. Саченко [и др.] // ФТП, 2013. – Т. 47. - №3. – С. 426-431.

7. Филиппов, В.В. Особенности явлений электронного переноса в анизотропных полупроводниках: монография / В.В. Филиппов. – М.: Спутник+, 2015. – 259 с.

8. Поляков, Н.Н. Измерение и контроль свойств металлических контактов к полупроводниковым пластинам и пленкам / Н.Н. Поляков, А.А. Заворотний // Заводская лаборатория. Диагностика материалов, 2013. – Т. 79. - №9. – С. 36-40.

9. Филиппов, В.В. Методы измерения и контроля коэффициентов электронного переноса анизотропных полупроводников: монография / В.В. Филиппов, Н.Н. Поляков. – Липецк: ЛГПУ, 2011. – 110 с.

10. Маренкин, С.Ф. Фосфиды, арсениды цинка и кадмия / С.Ф. Маренкин, В.М. Трухан. – Минск: Вараскин, 2010. – 224 с.

MATHEMATICAL MODELING OF THE INTERINFLUENCE EFFECT OF METAL-SEMICONDUCTOR CONTACTS ON ELECTROPHYSICAL CHARACTERISTICS OF EACH OTHER

A.A. Zavorotny[1, 2], V.V. Filippov[1]

[1] "Lipetsk State Pedagogical of the P.P. Semenov-Tyan-Shansky University"
[2] "Lipetsk Cossack Institute of Technologies and Management" (branch)
"Moscow State University of Technologies and Management of the
K.G. Razumovsky (the First Cossack University)"

Based on the solution of boundary value electrodynamic problems concerning the electric field potential distribution near a semiconductor with anisotropy of the specific electrical conductivity, this work considers a new influence of ohmic current electrodes on electrophysical characteristics of each other. It has been shown that this effect is particularly pronounced in anisotropic samples and reaches a value comparable to their bulk resistance

Keywords: metal-anisotropic semiconductor ohmic contact, contact resistance, spreading resistance of a current electrode

УДК 53.086

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ ПРИ ХОЛЛОВСКИХ ИЗМЕРЕНИЯХ В АНИЗОТРОПНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛАХ

В.В. Филиппов[1,2], А.А. Заворотний[1], С.В. Мицук[1], С.Е. Лузянин[1]

[1]Липецкий государственный педагогический университет
им. П.П. Семенова-Тян-Шанского
[2]Липецкий государственный технический университет
wwfilippow@mail.ru

Представлена теоретическая модель распределения потенциала электрического поля в анизотропных полупроводниковых пленках при холловских измерениях. Впервые получены трехмерные распределения потенциала холловского поля в анизотропных полупроводниковых кристаллах при зондовых измерениях

Ключевые слова: полупроводник, э.д.с. Холла

При исследовании электрических свойств полупроводников и производстве на их основе микро- и наноустройств возникает необходимость измерения удельного сопротивления образцов и контроля их однородности [1]. Определим распределение потенциала при гальваномагнитных явлениях в анизотропных полупроводниках прямоугольной формы в случае зондовых измерений коэффициента Холла (рис. 1). В рассматриваемом случае образец прямоугольной формы вырезан так, что его грани параллельны кристаллографическим плоскостям. Образец помещен в поперечное магнитное поле $\mathbf{B}$, постоянный электрический ток $I_{(12)}$ (здесь и далее нижние индексы, показывающие номера контактов, указаны в скобках) пропускается через зонды 1 и 2 (рис. 1). В этом случае тензор электропроводимости уже не является диагональным [2, 3, 4]:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_x\sigma_y R_z B & 0 \\ -\sigma_x\sigma_y R_z B & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

где σ_x, σ_y, σ_z – компоненты диагонального тензора электропроводимости в отсутствии магнитного поля, R_z – компонента тензора коэффициента Холла.

Следует отметить, что в данной записи компоненты тензора электропроводимости зависят от индукции магнитного поля B линейно. Это означает, что рассматривается эффект Холла в области относительно слабых магнитных полей ($(\mu B)^2 << 1$), когда можно пренебречь эффектом магнетосопротивления, определяемого членами, содержащими B^2.

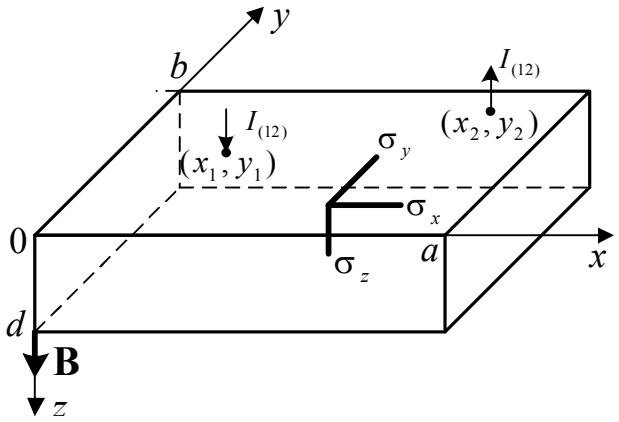


Рис. 1. Схема положения зондов к анизотропному полупроводнику. $I_{(12)}$ – ток зондов; (x_1, y_1), (x_2, y_2) – координаты центров зондов; a, b, d – размеры пленки, L – сторона квадратного пробника

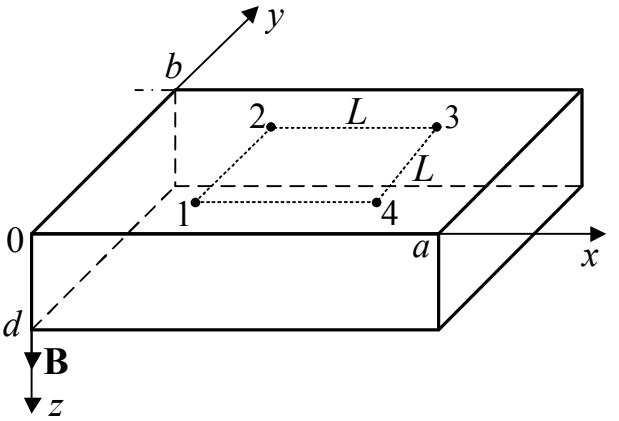


Рис. 2. Схема квадратного пробника, располагаемого по центру боковой грани для измерения э.д.с. Холла по методу Ван-дер-Пау

При измерениях на постоянном токе, во внешнем постоянном магнитном поле в установившемся режиме, в случае, когда магнитным полем тока можно пренебречь по сравнению с внешним, потенциал электрического поля в области образца, согласно [5, 6] удовлетворяет следующей краевой задаче:

$$\operatorname{div}\mathbf{j} = \sigma_x \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = 0\,, \tag{2}$$

$$\left(\sigma_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \sigma_x \sigma_y R_z B \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)\Bigg|_{x=0,a} = 0\,, \tag{3}$$

$$\left(\sigma_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} - \sigma_x \sigma_y R_z B \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)\Bigg|_{y=0,b} = 0\,, \tag{4}$$

$$\sigma_z \frac{\partial \varphi}{\partial z}\Bigg|_{z=d} = 0\,, \tag{5}$$

$$\sigma_z \frac{\partial \varphi}{\partial z}\Bigg|_{z=0} = -I_{(12)} \cdot \left[\delta\left(x - x_{(1)}\right) \cdot \delta\left(y - y_{(1)}\right) - \delta\left(x - x_{(2)}\right) \cdot \delta\left(y - y_{(2)}\right) \right], \tag{6}$$

где $\mathbf{j}$ – вектор плотности тока; a, b, d — длина, ширина и толщина образца; $\delta(y)$, $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака, использование которой оправдано для токовых зондов с малой площадью входных сечений. Граничные условия (3) - (6) определены из требования, что нормальная составляющая вектора плотности тока на поверхности исследуемого образца отлична от нуля лишь под токовыми зондами.

Следует отметить, что данная краевая задача (2) – (6) не принадлежит к числу типичных краевых задач Дирихле или Неймана. На сегодняшний день точное аналитическое решение данной задачи отсутствует. Однако, в связи с тем, что уже при постановке краевой задачи использовалось предположение о линейности потенциала φ по B, то ее решение можно представить в линейном приближении по магнитному полю. Таким образом, искомый потенциал можно представить в следующем виде:

$$\varphi = \varphi_0 + \varphi_H\,, \tag{7}$$

где φ_0 – потенциал электрического поля в отсутствии внешнего магнитного поля, φ_H – потенциал поля Холла, которое возникает в

образце после включения внешнего магнитного поля. При этом каждое из составляющих поля (7) должно удовлетворять уравнению (2).

Подставив решение (7) в краевую задачу (2) – (6), получим соответствующие краевые задачи для потенциала φ_0 :

$$\sigma_x \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial z^2} = 0 , \tag{8}$$

$$\sigma_x \frac{\partial \varphi_0}{\partial x}\bigg|_{x=0,a} = 0 , \tag{9}$$

$$\sigma_y \frac{\partial \varphi_0}{\partial y}\bigg|_{y=0,b} = 0 , \tag{10}$$

$$\sigma_z \frac{\partial \varphi_0}{\partial z}\bigg|_{z=d} = 0 , \tag{11}$$

$$\sigma_z \frac{\partial \varphi_0}{\partial z}\bigg|_{z=0} = -I_{(12)} \left[\delta\left(x - x_{(1)}\right)\delta\left(y - y_{(1)}\right) - \delta\left(x - x_{(2)}\right)\delta\left(y - y_{(2)}\right) \right] \tag{12}$$

и для потенциала φ_B :

$$\sigma_x \frac{\partial^2 \varphi_H}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2 \varphi_H}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2 \varphi_H}{\partial z^2} = 0 , \tag{13}$$

$$\left(\sigma_x \frac{\partial \varphi_H}{\partial x} + \sigma_x \sigma_y R_z B \frac{\partial \varphi_0}{\partial y} \right)\bigg|_{x=0,a} = 0 , \tag{14}$$

$$\left(\sigma_y \frac{\partial \varphi_H}{\partial y} - \sigma_x \sigma_y R_z B \frac{\partial \varphi_0}{\partial x} \right)\bigg|_{y=0,a} = 0 , \tag{15}$$

$$\sigma_z \frac{\partial \varphi_H}{\partial z}\bigg|_{z=0,d} = 0 . \tag{16}$$

Решение краевых задач (8) - (12) и (13) - (16) осуществим методом Фурье. Опуская громоздкое математическое решение задачи, запишем окончательное выражение для распределения потенциала электрического поля:

$$\varphi_0 = -\frac{4I_{(12)}}{\sigma_z ab}\sum_{n,k=0}^{\infty}\left\{ A_{nk}\cdot\frac{\mathrm{ch}\left(\eta_{kn}(d-z)\right)}{\eta_{kn}\,\mathrm{sh}(\eta_{kn}d)}\cos(\alpha_k x)\cos(\beta_n y)\right\}, \qquad (17)$$

$$\varphi_B = \frac{16I_{(12)}\sigma_y R_z B}{\sigma_z ab^2 d}\sum_{r,s,k,n=0}^{\infty}\left\{\frac{\Theta_r\Theta_s A_{nk}\left(1-(-1)^{n+r}\right)\beta_n^2}{\left(\beta_n^2-\beta_r^2\right)\xi_{rs}\left(\eta_{kn}^2+\delta_s^2\right)}\times\right.$$

$$\left.\times\frac{(-1)^k\,\mathrm{ch}(\xi_{rs}x)-\mathrm{ch}\left(\xi_{rs}(x-a)\right)}{\mathrm{sh}\left(\xi_{rs}a\right)}\cos\left(\beta_r y\right)\cos(\delta_s z)\right\}-$$

$$-\frac{16I_{(12)}\sigma_x R_z B}{\sigma_z a^2 bd}\sum_{p,q,k,n=0}^{\infty}\left\{\frac{\Theta_p\Theta_q A_{nk}\left(1-(-1)^{k+p}\right)\alpha_k^2}{\left(\alpha_k^2-\alpha_p^2\right)\omega_{pq}\left(\eta_{kn}^2+\delta_q^2\right)}\times\right.$$

$$\left.\times\frac{(-1)^n\,\mathrm{ch}(\omega_{pq}y)-\mathrm{ch}\left(\omega_{pq}(y-b)\right)}{\mathrm{sh}(\omega_{pq}b)}\cos\left(\alpha_p x\right)\cos\left(\delta_q z\right)\right\}; \qquad (18)$$

$$A_{nk} = \Theta_n\Theta_k\left(\cos\left(\alpha_k x_{(1)}\right)\cos\left(\beta_n y_{(1)}\right)-\cos\left(\alpha_k x_{(2)}\right)\cos\left(\beta_n y_{(2)}\right)\right); \qquad (19)$$

$$\Theta_{i\{i=k,n,p,q,r,s\}} = \begin{cases}1, & i\neq 0;\\ 1/2, & i=0;\end{cases} \qquad (20)$$

$$\alpha_k = \pi k/a,\ \alpha_p = \pi p/a,\ \beta_n = \pi n/b,\ \beta_r = \pi r/b,\ \delta_q = \pi q/d,\ \delta_s = \pi s/d; \qquad (21)$$

$$\eta_{kn}^2 = \left(\sigma_x\alpha_k^2+\sigma_y\beta_n^2\right)/\sigma_z,\ \omega_{pq}^2 = \left(\sigma_x\alpha_p^2+\sigma_z\delta_q^2\right)/\sigma_y,\ \xi_{rs}^2 = \left(\sigma_y\beta_r^2+\sigma_z\delta_s^2\right)/\sigma_x. \qquad (22)$$

Полученные решения (17), (18) позволяют проанализировать распределение потенциала и плотности тока в анизотропных образцах, помещенных во внешнее магнитное поле, а также предлагать теоретически обоснованные методы измерения компонент тензора электропроводимости.

Для определения компоненты тензора коэффициента Холла, как правило, образец помещают в поперечное магнитное поле индукцией **B**, постоянный ток $I_{(13)}$ пропускается через зонды 1 и 3, а между зондами 2, 4 измеряется э.д.с. Холла $E_{(24)}$ (рис. 2). Э.д.с. Холла определяется как дополнительная разность потенциалов между зондами 2, 4 на неизменном значении тока $I_{(13)}$ при включении магнитного поля.

Литература

1. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники. – М.: Физматкнига, 2006. – 496 с.

2. Аскеров, Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках / Б.М. Аскеров. – М.: Наука, 1985. – 320 с.

3. Най, Дж. Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц / Дж. Най. – М.: Мир, 1967. – 380 с.

4. Кучис, Е.В. Гальваномагнитные явления и методы их исследования / Е.В. Кучис. – М.: Радио и связь, 1990. – 264 с.

5. Ландау, Л.Д. Электродинамика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2003. – 656 с.

6. Бредов, М.М. Классическая электродинамика / М.М. Бредов, В.В. Румянцев, И.Н. Топтыгин. – М.: Наука. Главная редакция физ.-мат. лит., 1985. – 400 с.

THE DISTRIBUTION OF ELECTRIC FIELDS IN HALL MEASUREMENTS IN ANISOTROPIC SEMICONDUCTOR CRYSTALS

V.V. Filippov[1,2], A.A. Zavorotniy[1], S.V. Mitsuk[1], S.E. Luzyanin[1]

[1]Lipetsk State Pedagogical University n.a. P. Semenov-Tyan-Shansky
[2]Lipetsk State Technical University

A theoretical model for the distribution of the potential of an electric field in anisotropic semiconductor films for Hall measurements is presented. Three-dimensional distributions of the potential of the Hall field in anisotropic semiconductor crystals for probe measurements were obtained for the first time

Keywords: semiconductor, Hall emf

УДК 544.18, 546.271

ВЫЯСНЕНИЕ МЕХАНИЗМА ФОРМИРОВАНИЯ ДИБОРАНА ПРИ ГИДРОЛИЗЕ БОРОГИДРИДА МАГНИЯ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.С. Зюбин, Т.С. Зюбина, О.В. Кравченко,
М.В. Соловьев, Ю.А. Добровольский

Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка
zyubin@icp.ac.ru

В рамках кластерного подхода с использованием базиса 6-31G* и гибридного функционала плотности (B3LYP) выполнено моделирование формирования BH_3 в процессе взаимодействия различных комплексов борогидрида магния с водой. Найдено, что отщепление BH_3 с последующим формированием диборана возможно в тех случаях, когда возникающий на первом этапе отделения водорода анион H_3BOH^- стабилизируется двумя катионами металла

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, функционал плотности, борогидрид магния, получение водорода

Одной из ключевых проблем водородной энергетики является создание компактных источников водорода с высоким его содержанием. В этом плане большой интерес представляют борогидриды металлов, в частности борогидрид магния, который содержит почти 15 весовых процентов H_2. Однако прямое извлечение водорода из этого соединения требует существенных затрат энергии и достаточно высокой температуры (> 400^o C). Более перспективным представляется гидролиз борогидрида магния, протекающий с выделением энергии при умеренных температурах, поэтому соответствующие реакции в настоящее время подробно изучаются [1-4]. При этом было найдено, что в ряде случаев отщепление водорода сопровождается выделением диборана, что снижает выход водорода и формирует токсичные выбросы, но добавление органических лигандов в ряде случаев способно существенно снизить выход диборана [5, 6]. Целью данной работы является изучение с помощью квантово-химического моделирования влияния органических лигандов разного типа (тетрагидрофурана, ТГФ, диглима, ДГ, и диэтилового эфира, ДЭФ) на возможность формирования диборана в процессе гидролиза борогидрида магния.

Методика расчетов

Для изучаемых систем моделирование было выполнено в рамках того же подхода, что и в наших предыдущих работах [7-9], посвященных изучению отрыва молекулярного водорода от борогидридов натрия и магния при их взаимодействии с водой. В данных работах использован хорошо зарекомендовавший себя в молекулярных расчетах гибридный функционал плотности B3LYP [10, 11] с базисом 6-31G*, и программный комплекс GAUSSIAN [12]. Полученные в рамках ССП энергии корректировались введением поправок на энергии нулевых колебаний (ЭНК, или ZPE).

Обсуждение результатов

Ранее [7-9] нами было выполнено квантово-химическое моделирование отрыва молекулярного водорода от борогидридов натрия и магния при их взаимодействии с водой. В этих работах было найдено, что в процессе такой трансформации на первом этапе формируются структуры с анионами H_3BOH^-, которые могут возникать как непосредственно при взаимодействии BH_4^- и H_2O, так и в две стадии с образованием сначала очень слабо связанного комплекса BH_3*H_2 и стабилизированного катионами и молекулами воды аниона OH^-, с дальнейшим отщеплением H_2 и практически безбарьерным объединением BH_3 и OH^-. Возможен и обратный канал, с отделением BH_3 от аниона H_3BOH^- и последующим образованием диборана, который будет удаляться из зоны реакции. Для проверки характера отщепления BH_3 от OH^- было выполнено сканирование потенциальной поверхности модельной системы $Mg_{10}(BH_4)_{19}H_3BOH*2O(C_4H_{10})_2$ вдоль расстояния B-O аниона H_3BOH^- (рис. 1). Согласно полученным результатам, в комплексе борогидрида магния с диэтиловым эфиром, как и в чистом борогидриде магния, при увеличении расстояния B-O энергия системы монотонно растет, асимптотически приближаясь к сумме энергий изолированных фрагментов $Mg_{10}(BH_4)_{19}OH*2O(C_4H_{10})_2$ и BH_3. Поэтому возможность отделения BH_3 в процессе взаимодействия борогидридов с водой будет определяться величиной энергетических затрат на разделение $H_3BOH^- \Rightarrow BH_3 + OH^-$. Эта величина существенным образом зависит от энергии взаимодействия аниона с ближайшим окружением. Поэтому в данной работе нами было рассмотрено его влияние на энергию отрыва молекулы BH_3 от аниона H_3BOH^- в продуктах гидролиза борогидридов натрия и магния.

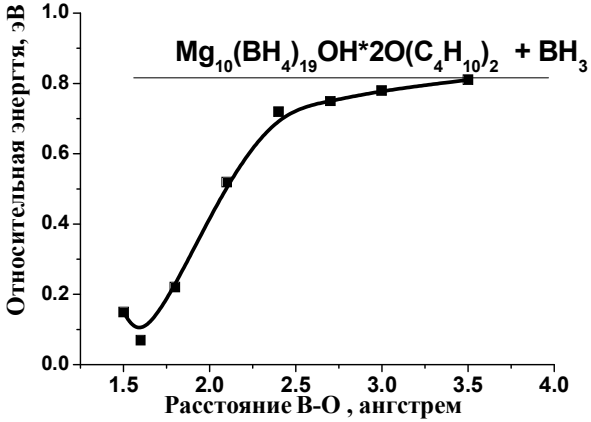


Рис. 1. Потенциальная кривая взаимодействия фрагментов OH и BH_3 в кластере $Mg_{10}(BH_4)_{19}H_3BOH*2O(C_4H_{10})_2$

В модельной системе $(Mg(BH_4)_2)_4*4H_2O$, имитирующей взаимодействие молекул воды с поверхностью кристаллического борогидрида магния, отщепление первой молекулы водорода приводит к конфигурации b1, изображенной на рис. 2, в которой анион H_3BOH^- формирует кислородный мостик между двумя катионами магния. Отрыв от этой структуры молекулы BH_3 создает конфигурацию c1 с мостиком Mg-OH-Mg и требует затрат энергии ~ 0.9 эВ (рис. 2). В кластере, имитирующем аналогичную систему без дополнительных молекул воды, картина получается похожей, но энергия отщепления BH_3 ниже, ~ 0.7 эВ (рис. 2).

У комплекса борогидрида магния с диглимом формирование мостиков Me-O-Me затруднительно, поскольку димеризация таких комплексов с близким расположением катионов металла энергетически невыгодна как в исходном состоянии, так и после формирования анионов H_3BOH^- вместо BH_4^-. При отщеплении H_2 здесь возникает конфигурация b1, изображенная на рис. 3, которая прочно удерживает BH_3 (энергия отрыва ~ 1.6 эВ, рис. 3, c1).

Аналогичная ситуация имеет место и для $(Mg(BH_4)_2)*3ТГФ$, но здесь структура комплекса не является столь жесткой, как в предыдущем случае, поскольку молекулы растворителя могут уходить из первой координационной сферы с небольшими затратами энергии. Тем не менее и комплексы $(Mg(BH_4)_2)*2ТГФ$ не образуют стабильных димеров. Однако при возникновении анионов H_3BOH^- вместо BH_4^- ситуация меняется. Молекула $BH_4MgBH_3OH*2TGF$ мо-

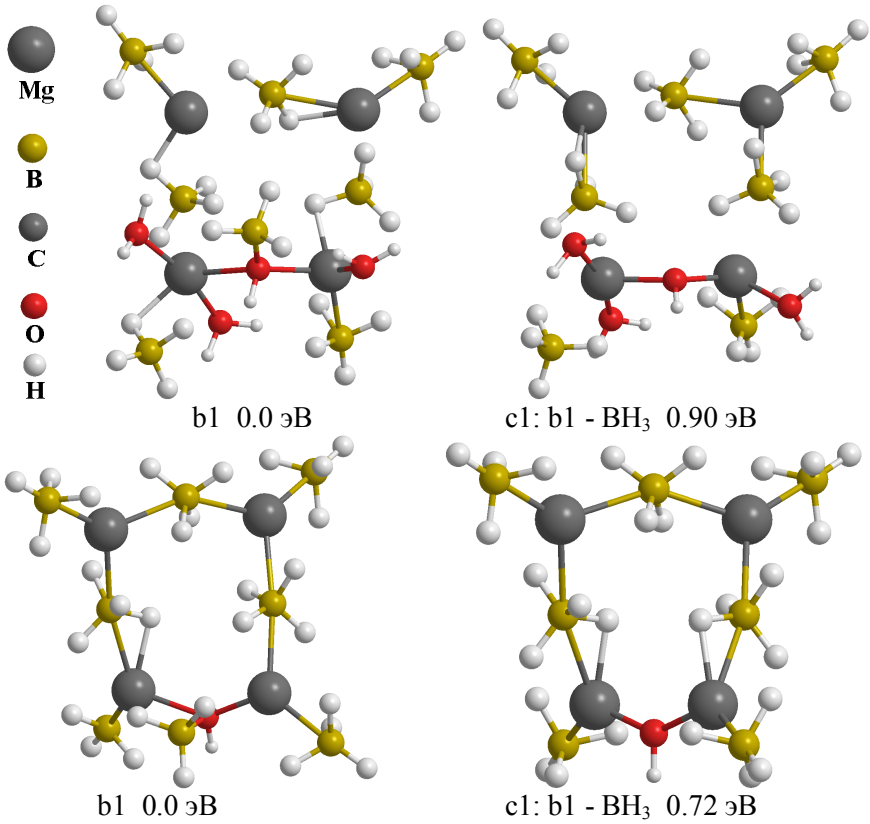
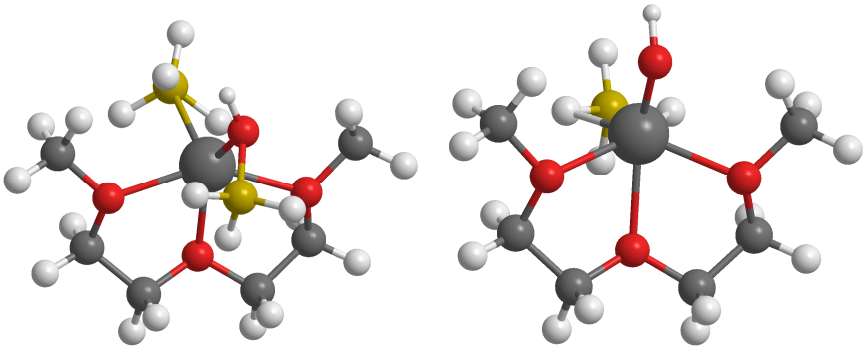


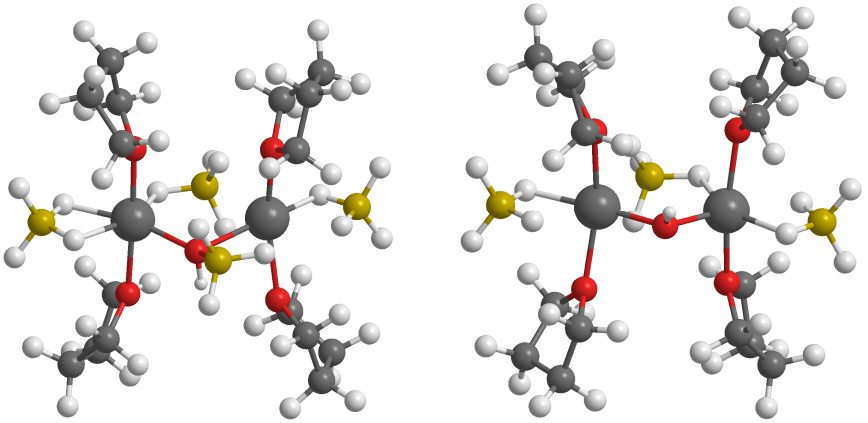
Рис. 2. Гидратированный и безводный терамеры борогидрида магния после удаления молекул H_2 и BH_3

жет образовать с $(Mg(BH_4)_2)$*2ТГФ сравнительно слабый комплекс (энергия взаимодействия ~ 0.5 эВ), стабильный лишь при низких температурах (до -20 C^o), но энергия взаимодействия двух молекул BH_4MgBH_3OH*2TGF вдвое выше (0.98 эВ), энтальпия димеризации BH_4MgBH_3OH*2ТГФ при нормальных условиях с учетом энтропийных вкладов составляет 0.2 эВ, т.е. такие формирования могут на некоторое время возникать в процессе реакции. Энергия отделения BH_3 от таких комплексов почти такая же, как и у борогидрида магния, ~ 0.9 эВ (рис. 4), но вероятность образования диборана в данном случае должна быть ниже, поскольку при близких значениях затрат энергии для отделения BH_3 от комплекса с ТГФ необходимо возникновение ассоциатов с мостиками $Mg\text{-}H_3BOH\text{-}Mg$.



b1 0.0 эВ c1: b1 - BH_3 1.57 эВ

Рис. 3. Комплекс борогидрида магния с диглимом после взаимодействия с молекулой воды и удаления молекул H_2 и BH_3

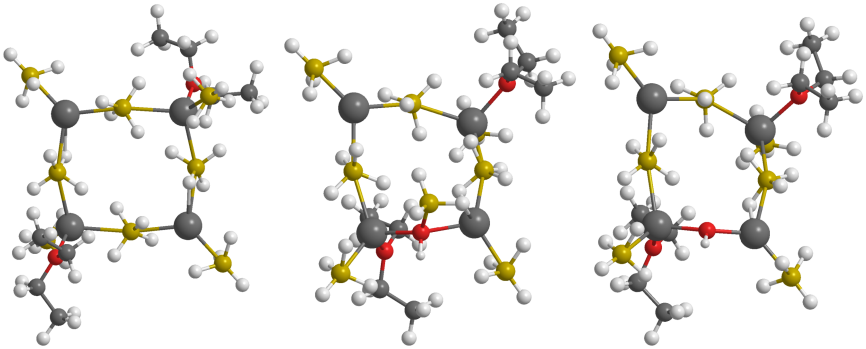


b1 0.0 эВ c1: b1 - BH_3 0.86 эВ

Рис. 4. Комплекс $Mg(BH_4)_2$*BH_4MgBH_3OH*4ТГФ до и после удаления BH_3

У кристалла $[Mg(BH_4)_2]_2$*ДЭФ строение решетки соответствует трехмерной пространственной сетке, в узлах которой расположены четырехкратно координированные катионы магния, связанные мостиками с двукратно координированными анионами BH_4^-. К половине катионов координированы молекулы эфира, и координационные числа таких катионов по BH_4^- снижаются до трех. Одной из наиболее простых моделей, имитирующей фрагмент такой решетки, является кластер $[Mg(BH_4)_2]_4$*2ДЭФ, изображенный на рис. 5. В этой

системе отрыв BH_3 от H_3BOH^- требует примерно таких же затрат энергии, как и в боргидриде магния, порядка 0.8 эВ.



$[Mg(BH_4)_2]_4$*2ДЭФ b1 0.0 эВ c1: b1 - BH_3 0.79 эВ

Рис. 5. Кластер $[Mg(BH_4)_2]_4$*2ДЭФ после формирования аниона H_3BOH^- (b1) и удаления BH_3 (c1)

Однако изображенные на рис. 2 и 5 кластеры недостаточно точно воспроизводят окружение активного фрагмента Mg-H_3BOH-Mg в кристаллах, поскольку в этих кластерах координационные числа атомов магния равны трем, а в кристаллах – четырем. Поэтому для уточнения влияния окружения были рассмотрены более крупные модельные системы $Mg_{10}(BH_4)_{20}$ и $Mg_{10}(BH_4)_{20}(OC_4H_{10})_2$, в которых координационные числа атомов магния в активной области равны четырем. Чтобы имитировать встроенность таких фрагментов в кристаллическую решетку, на первом этапе проводилась оптимизация структуры исходных кластеров, а при рассмотрении систем с анионами H_3BOH^- и OH^- позиции граничных атомов магния фиксировались, а остальных – оптимизировались. При переходе к более адекватной модели энергии отрыва BH_3 немного снижаются (рис. 6), причем для кристалла $2(Mg(BH_4)_2)OC_4H_{10}$ эта величина на 0.1 эВ выше, чем для чистого борогидрида магния, поэтому для первой системы вероятность формирования диборана должна быть ниже.

Резюмируя полученные в данной работе результаты, можно сказать, что отщепление молекул BH_3 в процессе гидролиза борогидрида магния облегчается в тех случаях, когда возникающий на первой стадии анион H_3BOH^- стабилизирован двумя катионами металла. Если добавленные лиганды препятствуют формированию такого фрагмента, то выход диборана должен существенно снижаться.

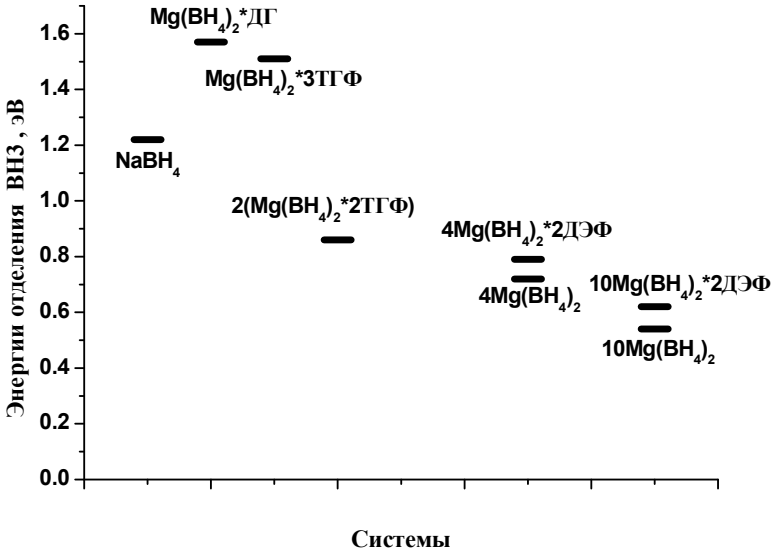


Рис. 6. Энергии отделения BH_3 в различных системах

Данная работа выполнена на ВЦ ИПХФ РАН при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 15-03-07750)

Литература

1. Kong V.C.Y., Foulkes F.R., Kirk D.W., Hinatsu J.T. // International Journal of Hydrogen Energy. 1999. V. 24. P. 665.

2. Zavorotynska O., El-Kharbachi A., Deledda S., Hauback B.C. // International Journal of Hydrogen Energy. 2016. V. 41. P. 14387.

3. David W. I. F., Callear S. K., Jones M. O. at al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2012. V. 14. P.11800.

4. Bateni A., Scherpe S., Acar S., Somer M. // Energy Procedia. 2012. V. 29. P.26.

5. Konoplev V.N., Bakulina V.M. // Russ. Chem. Bull. 1971. V. 20 P. 136.

6. Aiello R., Matthews M.A., Reger D.L., Collins J.E. // International Journal of Hydrogen Energy. 1998. V. 23. P. 1103.

7. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В., Соловьев М.В., Добровольский Ю.А. // Ж. Неорг. Химии. 2016. Т. 61. С. 767.

8. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В., Соловьев М.В., Цветков М.В., Добровольский Ю.А. // Ж. Неорг. Химии. 2017. Т. 62. С. 305.

9. Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В., Соловьев М.В., Цветков М.В., Добровольский Ю.А. // Материалы XVI Международного семинара "Физико-математическое моделирование систем", Воронеж, 24-25 июня 2016 г. С. 75.

10. Becke A.D. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. P. 5648.

11. Johnson B.J., Gill P.M.W., Pople J.A. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. P. 5612.

12. Gaussian 03, Revision C.02. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.

INVESTIGATION OF THE MECHANISM FOR DIBORANE FORMATION IN THE HYDROLYSIS OF BOROHYDRIDE MAGNESIUM BY QUANTUM-CHEMICAL MODELING

A.S. Zyubin, T.S. Zyubina, O.V. Kravchenko,
M.V. Solovjev, Yu.A. Dobrovolsky

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

In the frame of cluster approach with 6-31G * basis set and hybrid density functional theory (B3LYP) was modeled BH_3 formation in the process of interaction of various magnesium borohydride complexes with water. It was found that the BH_3 cleavage with the subsequent diborane formation is possible in cases, when arising at the first stage of hydrogen separation H_3BOH^- anion is stabilized by two metal cations

Keywords: quantum chemical modeling, periodical boundary condition, density-functional theory, magnesium borohydride, hydrogen production

УДК 544.18

МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ ОЗОНА ПРИ ГИДРОЛИЗЕ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ $(MnO)_3$, $(MnO)_6$ И $(Mn\ SO_4)_3$. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Т.С. Зюбина, Т.С. Джабиев, А.С. Зюбин, Ю.А. Добровольский

Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка
zyubin@icp.ac.ru

В настоящей работе были рассчитаны структуры кластеров $(Mn\text{-}A)_n$, где A=O и SO_4, n=1-12, и теоретически исследована возможность выделения озона из гексагональных кластеров $(MnO)_3$, $(MnO)_6$ и $(MnSO_4)_3$ при взаимодействии с водой. Для расчетов были использованы функционал плотности PBE с базисом проектированных плоских волн PAW и гибридный функционал B3LYP с базисами 6-31G* и 6-31G**. Показано, что гексагональные структуры кластеров $(MnA)_{3k}$ (где A=O или SO_4, k=1,2) могут при взаимодействии с водой выделять озон под воздействием видимого света

Ключевые слова: марганец, окисление воды до O_3, кластеры $(MnO)_n$, $(MnSO_4)_n$

Марганец, занимающий 25-ю ячейку Периодической системы элементов Д.И. Менделеева, является самым важным из десятков переходных металлов для современной жизни на Земле. Благодаря марганцу около 2.5 млрд лет тому назад на Земле появился оксигенный фотосинтез, позволивший использовать воду в качестве восстановителя при превращении углекислого газа в углеводы. После примерно 250 лет изучения фотосинтеза установлено, что окисление воды ферментом вода/пластохинон - оксидоредуктаза в фотосистеме II оксигенного фотосинтеза осуществляется в координационной сфере тетраядерного марганцевого кофактора Mn_4O_5Ca (4Mn-co) по реакции, индуцируемой квантами света:

$$4\ P680^{+\bullet} + 2\ H_2O = 4\ P680 + O_2 + 4\ H^+.$$

Здесь одноэлектронный окислитель $P680^{+\bullet}$ представляет собой фотоокисленный димер хлорофилла *a*, окруженный еще двумя молекулами хлорофилла *a*. Кроме этого хорошо известного четырехэлектронного процесса окисления воды до O_2 существует еще и малоизвестное шестиэлектронное окисление воды до озона. Эта реакция на-

блюдалась пока только в морских красных и бурых водорослях в условиях водного дефицита [1]. Авторы полагают, что в условиях водного дефицита в хлоропластах морских водорослей появляются шестиядерные марганцевые кофакторы 6Mn-co, которые окисляют воду шестиэлектронно до O_3. Эксперименты по окислению воды кластерами Mn(IV) в сернокислотных растворах показали, что процесс осуществляется в координационных сферах кластеров Mn_n (n = 2 – 18), образующихся в различных условиях опытов (разные концентрации Mn и H_2SO_4 или разных температурах растворов) [2]. . Эти кластеры получаются из биядерного комплекса $(Mn\text{-}O)_2$ в сернокислотных растворах. Стабильные кластеры марганца образуются также при олигомеризации трёхядерных шестиугольных комплексов $(Mn\text{-}O)_3$ в условиях высокого вакуума, масс-спектрометрически идентифицированы кластеры вплоть до $(Mn\text{-}O)_{12}$, причем в этих же условиях образуются и другие кластеры $(Mn\text{-}O)_x$, где x = 1 – 13 [3].

Согласно [2], кластеры Mn_n окисляют воду до продуктов, обнаруживаемых в виде конечных молекул O_2 при n = 2, 4, 8, 16 и до O_3 при n = 6, 12, 18. Была высказана гипотеза, что это является следствием того, что первые кластеры имеют кубическую структуру, а вторые – гексагональную. В расчетной работе [4], однако, утверждается, что гексаядерные кластеры $(Mn\text{-}O)_6$ имеют скорее кубическую структуру, чем гексагональную, что противоречит выводам [2].

В [5, 6] на основании анализа пиков в масс-спектрах было найдено, что кластеры $(MnO)_n$ для n = 3, 6, 9, 12 могут быть необычайно стабильными и было высказано мнение, что $(MnO)_3$ кластер, имеющий структуру шестиугольника [7], является строительным блоком более крупных кластеров, которые растут шестиугольными стопками, в отличие от объемной фазы, где MnO имеет кубическую структуру [8]. В настоящей работе мы рассмотрели взаимодействие с водой гексагональных кластеров $(MnO)_3$, $(MnO)_6$ и $(MnSO_4)_3$ и теоретически исследовали возможность выделения озона из них при взаимодействии с водой.

В данной работе использован испробованный нами ранее [9-11] подход, основанный на применении функционала плотности с периодическими граничными условиями в рамках комплекса VASP [12-15] (Vienna ab-initio simulation program). В качестве базиса применены проектированные плоские волны PAW [16] с соответствующим псевдопотенциалом, и функционал PBE [17] (PBE/PAW). Предел по энергии (E_c), определяющий полноту базисного набора, был

принят равным 400 эВ. Для оптимизации электронного состояния использовался метод Метфесселя-Пакстона [18] с параметром размытия (σ) 0.2 и аппроксимацией энергий на величину σ = 0. Такой подход приводит к автоматическому определению количества неспаренных электронов (M) наиболее стабильного изомера исследуемой системы. После определения (на уровне PBE/PAW) числа неспаренных электронов в наиболее энергетически выгодной структуре проводился расчет геометрии наиболее стабильных структур, относительной энергии и эффективных зарядов на атомах (по Малликену) с использованием хорошо зарекомендовавшего себя в молекулярных расчетах гибридного функционала плотности B3LYP [19, 20] с базисами 6-31G* и 6-31G** (в рамках программного комплекса GAUSSIAN [21]).

В расчетах кластеров $(Mn\text{-}O)_n$, n = 1-12 показано, что полученные нами на уровне PBE/PAW результаты хорошо (в пределах 0.01-0.02 Å в валентных расстояниях и 1-5° в углах) согласуются с литературными расчетными данными и экспериментальными значениями.

Строение кластеров $(MnSO_4)_{3k}$ n(H_2O). Расчеты на уровне PBE/PAW (рис. 1) показывают, что для $(MnO)_6$ кубическая (M=15) структура расположена на энергетической шкале на 1.03 эВ выше гексагональной (M=13), поэтому в дальнейшем мы рассмотрели гексагональные структуры кластеров $(MnO)_n$ и сравнили их с аналогичными структурами с сульфатными противоионами $(MnSO_4)_n$.

Для кластеров $(MnO)_3$ и $(MnSO_4)$ наиболее стабильны структуры с M=13, однако структуры с M=15 расположены на энергетической шкале, соответственно, лишь на 0.4 и 0.1 эВ выше. Отсюда видно, что в кластерах $(MnA)_3$ (где A=O или SO_4) распаривание электронов происходит легко, при этом переход от кислорода к SO_4 еще больше облегчает этот процесс.

Из рис. 1 можно видеть, что энергия объединения трех молекул MnO с образованием кластера $(MnO)_3$ в пределах 0.4 эВ близка к аналогичному значению образования кластера $(MnSO_4)_3$ из трех молекул $MnSO_4$ (7.02 и 7.41 эВ, соответственно). В свою очередь, образование кластеров $(MnO)_6$ и $(MnSO_4)_6$, из двух молекул $(MnO)_3$ и $(MnSO_4)_3$ приводит к выделению еще более близких (в пределах 0.1 эВ) энергий (3.38 и 3.48 эВ, соответственно).

Выделение озона. На рис. 2 показаны последовательные структуры образования озона при взаимодействии трех молекул воды с кластером $(MnSO_4)_3$ $[(MnSO_4)_3 *3(H_2O)]$. Переход

$$(MnSO_4)_3 *3(H_2O) \rightarrow (MnSO_4)_3 +3H_2 + O_3$$

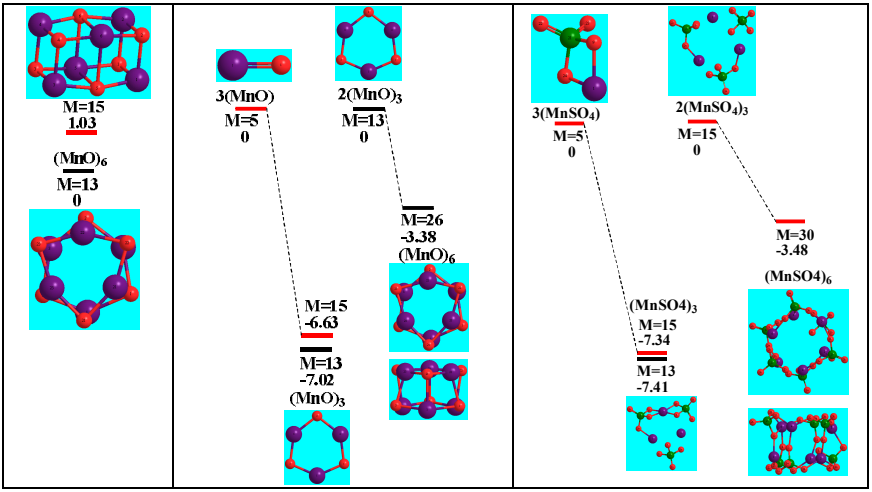


Рис. 1. Строение и относительные энергии кластеров $(MnO)_3$, $(MnO)_6$ и $(MnSO_4)_3$, $(MnSO_4)_6$

проходит в несколько этапов: 1) образование комплекса $(MnSO_4)_3$ *$3(H_2O)$; 2) отрыв первой молекулы водорода (H_2) и образование комплекса $(MnSO_4)_3(OH)_2$*(H_2O); 3) отрыв второй молекулы водорода ($2H_2$) и образование комплекса с пероксидным мостиком $(MnSO_4)_3(OH)$ (OOH); 4) отрыв третьей молекулы водорода ($3H_2$) и образование комплекса с озоновым мостиком $(MnSO_4)_3$(OOO); 5) отрыв озона с выделением начального кластера [$(MnSO_4)_3$+$3H_2$+O_3]. Более подробную оценку барьеров этих реакций приведем ниже, однако в целом можно сказать, что они не превышают 0.5 эВ.

Разница между структурами с M=13 и M=15 на разных этапах находится в интервале 0.1-0.8 эВ, при этом распаривание электронов не приводит к принципиальным изменениям геометрических параметров. Наибольшие отклонения наблюдаются на третьем и четвертом этапах, где в кластере присутствуют пероксидный или озоновый фрагменты, соответственно. Так, энергетическая разница на четвертом этапе между структурами с M=13 и M=15 составляет 0.75 эВ (в пользу структуры с M=13), что на 0.18 эВ меньше, чем для изолированного озона, где разница между синглетным и триплетным состояниями по расчетам составляет 0.93 эВ (экспериментально для O_2 это 0,98 эВ (в пользу триплета) [22], для O_3 экспериментально подтверждено синглетное состояние. Энергетическая разница между этапами реакции выделения озона находится в интервале 1,73 (этапы

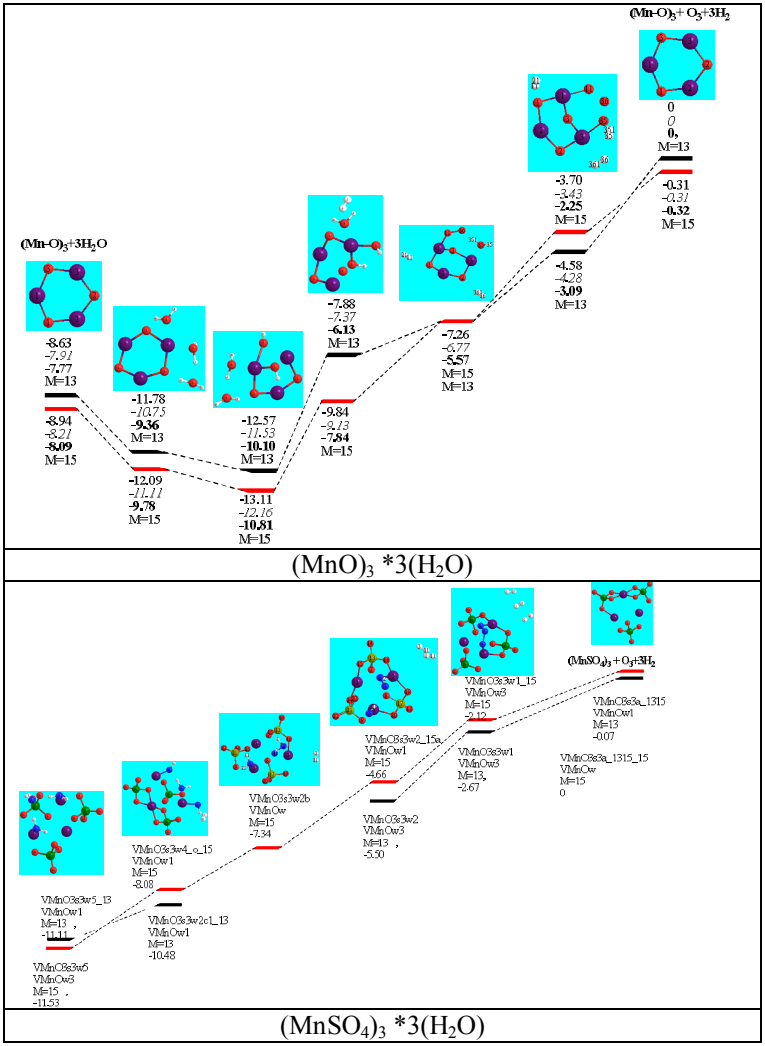


Рис. 2. Переход от комплекса $(MnA)_3$*3(H_2O) к $(MnA)_3$+3H_2+O_3

1-2), 4,3 (этапы 2-3), 2,83 (этапы 3-4), 2,67 (этапы 4-5). Видимый свет занимает в спектре узкую полоску длин волн от400 нм (фиолетовый, 3.1 eV) до 700 нм (красный,1.8 eV). Этот интервал включает в себя величины рассмотренных нами пошаговых реакций. Следовательно, переходы между соседними стадиями реакции могут осуществляться под воздействием солнечного освещения.

Барьеры. Адсорбция молекул воды на поверхность фрагмента $(Mn\text{-}A)_3$ с образованием комплекса $(Mn\text{-}A)_3*3H_2O$ (рис. 2) происходит безбарьерно. Миграция молекул воды вдоль MnO фрагментов кластера проходит практически безбарьерно. Достаточно легко происходит и обмен атомами водорода между молекулами воды и атомами кислорода, входящими в состав кластеров, в результате чего на поверхности кластера образуются OH фрагменты. Например, диссоциация воды с образованием двух OH фрагментов на поверхности кластера энергетически выгодна на 0.5 эВ и может происходить с барьерами, не превышающими 0.5 эВ.

Процесс диссоциации воды на поверхности комплексов проиллюстрирован на рис. 3 на примере комплексов $(Mn\text{-}O)_3*3H_2O$ (M=15) и $(MnO)_6*6H_2O$ (M=26): $(MnO)_3*3H_2O \rightarrow (Mn_3O_2(OH)_2)*2H_2O$ и $(MnO)_6*6H_2O \rightarrow (Mn_6O_5(OH)_2)*5H_2O$, соответственно. Отрыв озона на этапе 4-5 происходит безбарьерно и показан на рис. 4.

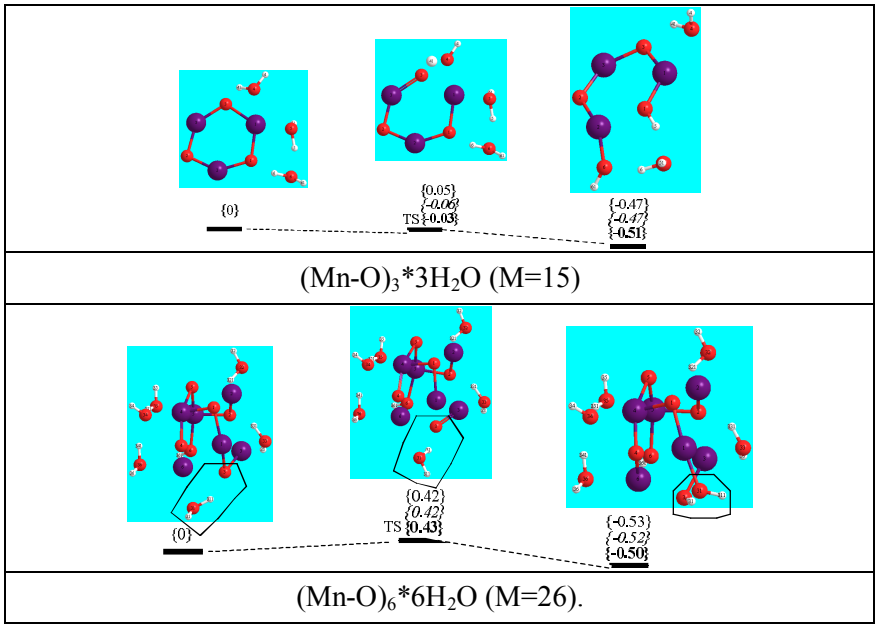


Рис. 3. Относительные энергии (в эВ) даны без учета энергии нулевых колебаний (HF), с учетом энергии нулевых колебаний (ZPE, курсив) и свободной энергии (FE, 298.1 K, 1 атм., жирный шрифт)

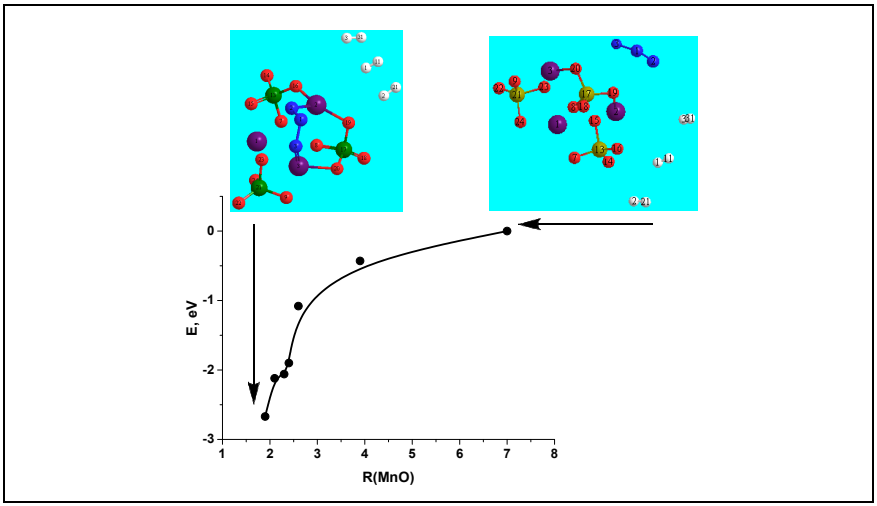


Рис. 4. Отрыв озона

Выводы. Таким образом, на основании расчетов можно сказать , что гексагональные структуры кластеров $(MnA)_{3k}$ (где A=O или SO_4, k=1,2) могут при взаимодействии с водой выделять озон под воздействием видимого света.

Литература

1. Джабиев Т.С., Моисеев Д.Н., Шилов А.Е. // Докл. Акад. Наук, 2005, Т.402, С. 555.

2. Т.С. Джабиев // Кинетика и катализ. 2010. Т. 51. № 6. С. 816.

3. P.J. Ziemann and A.W. Castleman, Jr. // Phys. Rev B. 1992. V. 46. # 20. P. 13480.

4. S.K. Nayak and P. Jena // J. Am. Chem. Soc. 1999. V. 121. P. 644.

5. Ziemann, P.; Castleman, A. W., Jr. // Phys. Rev. B 1992, *46*, 13480.

6. A. Kirilyuk, K. Demyk, G. von Helden, and G. Meijer, A. I. Poteryaev and A. I. Lichtenstein // J. Appl. Phys. 2003, 93(10)7379-7381

7. S. K. Nayak and P. Jena // J. Am. Chem. Soc. 1999, *121,* 644-652

8. Wyckoff, R. W. G. Crystal Structures; Interscience: New York, 1964.

9. Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, Ю.А. Добровольский, В.М. Волохов / Квантово-химическое моделирование наноструктурированного кремния Si_n (n=2÷308). Структуры типа снежный ком // Известия Академии наук. Серия химическая. 2016. № 3. С. 621-630.

10. Т. С. Зюбина, А. С. Зюбин, Ю. А. Добровольский, В. М. Волохов / Литирование–делитирование бесконечных нановолокон типа Si_nC_m как возможных перспективных анодных материалов для литий-ионных источников тока. Квантовохимическое моделирование // Электрохимия. 2016. Т.52. № 10. С. 1109–1112.

11. T.S. Zyubina, A.S. Zyubin, Yu.A. Dobrovol'skii, and V.M. Volokhov. Quantum-Chemical Modeling of Lithiation–Delithiation of Infinite Fibers [Si*n*C*m*] *k* (*k* = ∞) for *n* = 12–16 and *m* = 8–19 and Small Silicon Clusters // ISSN 0036-0236, Russian Journal of Inorganic Chemistry, 2016, Vol. 61, No. 13, pp. 1677–1687.

12. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1993. V.47. P. 558.

13. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1994. V.49. P. 14251.

14. Kresse G., Furthmüller J. // Comput. Mat. Science. 1996. V. 6. P. 15

15. Kresse G., Furthmüller J. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169.

16. Kresse G., Joubert D. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 1758.

17. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. // Phys. Rev. Letters. 1996. V.77. P.3865.

18. Methfessel M., Paxton A. T. // Phys. Rev. B. 1989, V. 40, 3616

19. Becke A.D. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. № 4. p.5648.

20. Johnson B.J., Gill P.M.W., Pople J.A. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. № 4. p.5612.

21. Gaussian 03, Revision C.02. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.

22. Mulliken, R.S. Interpretation of the atmospheric oxygen bands; electronic levels of the oxygen molecule. Nature, 1928, Vol. 122, P. 505.

$(MnO)_3$, $(MnO)_6$, $(Mn\ SO_4)_3$ HEXAGONAL STRUCTURES. INTERACTION WITH WATER AND OZONE FORMATION. SUPERCOMPUTER SIMULATION.

T.S. Zyubina, T.S. Dzhabiyev, A.S. Zyubin, Yu.A. Dobrovolsky

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

In the present work were calculated structures of clusters $(Mn\text{-}A)_n$ where A=O and SO_4, n=1-12, and theoretically investigated the possibility of separating ozone by $(MnO)_3$, $(MnO)_6$ and $(MnSO_4)_3$ hexagonal cluster when interacting with water. For calculations used the PBE density functional with a basis plane waves PAW and the hybrid functional B3LYP with the basis 6-31G* and 6-31G**. It is shown that the hexagonal structure of clusters $(MnA)_{3k}$ (where A=O or SO_4, k=1,2) can interact with water to allocate ozone under the influence of visible light

Keywords: manganese, oxidation of water to O_3, clusters $(MnO)_n$, $(MnSO_4)_n$

УДК 544.18

ДЕТАЛИ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ LI-ИОННЫХ ИСТОЧНИКОВ ТОКА НОВЫХ ТИПОВ

Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, Г.А. Покатович, Д.А. Варламов, Ю.А. Добровольский, В.М. Волохов, А.В. Волохов, Е.С. Амосова

Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка
zyubin@icp.ac.ru

В результате большого количества вычислительных экспериментов были разработаны квантово-химические модели различных компонент литий-ионных источников тока на основе кремний-углеродных композитов и наноструктур, перспективных для твердых электролитов. Были смоделированы транспортные, структурные и энергетические процессы, протекающие в литий-ионных источниках в ходе многочисленных циклов зарядки-разрядки. Используя методы молекулярной динамики, было оценено влияние различных температурных режимов на структуры наносистем и характеристики процессов зарядки-разрядки

Ключевые слова: компьютерное моделирование, углеродно-кремниевые нанокомпозиты, твердые электроды, Нафион, Li-ионные аккумуляторы, диметилсульфоксид, твердые и полимерные электролиты

Наиболее перспективными и распространенными типами аккумуляторов и батарей являются литий-ионные источники тока (ЛИА), основанные на переносе через среду жидкого или твердого электролита ионов лития с катода на анод. Необходимо создать электрохимические экологически безопасные ЛИА новых типов с повышенной (в 3-4 раза) энергоемкостью, числом циклов зарядка-разрядка, способностью работать в условиях низких и высоких температур, с высокими значениями удельной энергии. Главные области применения ЛИА – это компактные переносимые возобновляемые источники тока и экологически чистый авиа- и автотранспорт.

Численное моделирование элементарных процессов и различных механизмов химических реакций и транспортных процессов в ЛИА ведет к улучшению контроля над химическими реакциями внутри них и делает возможным создание наиболее оптимальных

наноматериалов с точки зрения энергоэффективности, устойчивости материалов в процессе циклов зарядки-разрядки, ценообразования конструктивных материалов и экологичности процессов утилизации.

Графит или графитоподобные углеродные структуры имеют емкость по литию до одного иона лития на 6 атомов углерода LiC_6, что дает емкость по заряду ~ 0.37 А·ч/г. Кристаллический Si дает емкость по литию (электрохимическую), превосходящую таковую для углерода более чем в 10 раз (4-9 А·ч/г для Si как $Li_{15}Si_4$ и $Li_{22}Si_5$). Увы, такое преимущество не удается полностью реализовать вследствие глубоких структурных изменений используемых модификаций кремния (в процессе литирования происходит резкое изменение объема кремния, приводящее к разрушению электрода). Необходимо моделирование поведения лития на поверхности и в объеме аморфного наноструктурированного кремниевого анода (структуры типа «снежный ком» и «ядро-оболочка», нановолокна и нанобумага и т.п.) для выяснения возможности включения его в состав анодной части литиевого источника тока.

В качестве первоочередной задачи мы поставили моделирование твердых и полимерных электролитов состава $Li_{10}GeP_2S_{12}$ и Li-*Nafion*™* n·ДМСО (n=0-18) с высокой проводимостью по ионам лития (Nafion™ – sulfonated tetrafluoroethylene based fluoropolymer-copolymer, ДМСО – Диметилсульфоксид), не реагирующих с Si-C нанокомпозитами и устойчивых к низким и высоким температурам. Необходимо также моделирование транспортных процессов перемещения лития между электродом и электролитом и структурных и энергетических характеристик этих процессов.

В исследовании проводилось моделирование основных стадий физико-химических процессов, происходящих в композитных наноструктуриро-ванных материалах электродов ЛИА на основе углерода и кремния (наночастицы, нанотрубки, нанопроволоки и кристаллические поверхности) и твердых электролитах. Моделирование проводилось с использованием пакетов VASP (MD-VASP) в рамках метода функционала плотности с учетом градиентной корреляции (DFT/PBE) и периодических граничных условий. Также были использованы ППП CPMD (http://www.cpmd.org) и Gaussian (http://www.gaussian.com).

ППП VASP предназначен для моделирования процессов в объеме и на поверхности твердых тел (прежде всего катализа и ионной

проводимости) в рамках неэмпирических подходов, основанных на применении функционалов плотности с использованием периодических граничных условий с базисами на плоских волнах. ППП VASP позволяет проводить оптимизацию структуры и выполнять моделирование в рамках молекулярной динамики. Метод основан на приближении локальной плотности (при конечных температурах), при этом свободная энергия считается вариационным параметром, и на каждом шаге выполняется точная оценка мгновенного электронного основного состояния. В программе VASP используется эффективные схемы диагонализации матриц и смешивания электронной плотности Pulay/Broyden, а также значительно улучшены процедуры сходимости процессов ССП и оптимизации. Обеспечивает хорошую точность описания систем до нескольких сотен атомов. Поддерживает CUDA™ (Compute Unified Device Architecture – программно-аппаратная архитектура параллельных вычислений).

Для моделирования транспортных процессов в рамках неэмпирической молекулярной динамики с периодическими граничными условиями были использованы два подхода – CPMD (приближение Кара-Паринелло), в котором рассчитанная для стартовой конфигурации волновая функция аппроксимируется набором классически движущихся частиц малой массы, и более точное, но и более медленное приближение MD-VASP (MD/PBE/PAW), где используются те же алгоритмы, что и при обычной оптимизации структур, но с более грубыми критериями точности расчета. Тем не менее, как правило, применение MD-VASP позволяет проводить моделирование существенно быстрее, чем в рамках CPMD. Для достижения аналогичной детальности глубины проникновения в рамках MD-VASP требовалось примерно в 6-8 раз меньше шагов вычислений.

Начиная с версии 5.4.1. (бета-версия – июнь 2015, final release – ноябрь-февраль 2015 года), прикладной пакет VASP (http://www.vasp.at) поддерживает использование CUDA технологий для расчетов методами стандартного и гибридного DFT (уравнения Hartree-Fock).

Для большей части задач, использующих DFT, на ускорителях Tesla C2075 достигается ускорение (сравнивая версии VASP с поддержкой и без поддержки GPU ускорения) от 1.6 до 6 раз в зависимости от размерности задачи и ее типа. Это дает перспективу значительного убыстрения расчетов для ППП VASP на «гибридных» вы-

числительных узлах (при обновлении VASP до версии выше 5.4), в том числе на существующих очередях СК «Ломоносов» и гибридных станциях ИПХФ. Помимо обновления версии VASP, требуется дополнительная перенастройка конфигурационного файла VASP, также весьма желательно обновление библиотек CUDA до версии не ниже 7.5.

Выполнено более 2000 вычислительных экспериментов длительностью от нескольких часов до месяцев на разнородных вычислительных ресурсах (суперкомпьютерные кластеры и высокопроизводительные гибридные установки ИПХФ РАН, СК «Ломоносов» СКЦ МГУ, МВС-100 МСЦ РАН). При проведении расчетов были использованы различные пулы процессоров, от 16 до 128 CPU (с различным количеством ядер на процессор), с обязательным наличием локальных дисков, при этом достаточное эффективное ускорение пакета VASP наблюдалось при кол-ве CPU до 40-48. Большее влияние оказывает наличие RAM > 2 Гб на ядро + SSD диски.

В упрощенном виде время расчета поведения средних/больших атомных кластеров Si_{7-350} определяется сутками (до 80 часов), а моделирование мезосистем $Si_nC_m(L_iN_j)$ в целом (с размерностью в тысячи атомов) оценивается ориентировочно вплоть до $n \cdot 10^6$ процессоро-часов (до месяцев расчетов)

Базовый кластер, на котором проводились расчеты, состоит из 176 двухпроцессорных узлов HP Proliant – всего 1472 ядра на основе 4- и 6-ядерных процессоров Intel Xeon 5450 и 5670 частотой 3 ГГц, с оперативной памятью 8 и 12 Гбайт на узел; коммуникационная сеть Infiniband DDR, транспортная и управляющая сети – Gigabit Ethernet; жесткие диски – не менее 36 Гбайт на узел)

GPU эксперименты : 1) 2 high-performance station (2 x 12 cores [2x6 3.46GHz Intel® Xeon® X5675], 48 Gb RAM, 3 Tb HDD/SSD, 2 GPU Nvidia Tesla C2075, 3 x Gigabit Ethernet, peak perfomance up to 1,3 Tflp double precision and 2.3 Tflp ordinary precision; 2) Workstation *Godwin* SB 460 – 2 x 12 core E5-2690V3, MB iC612, RAM 256Gb DDR4 Reg, SSD 480Gb + 4 Tb SATA, 2 GB Lan + Nvidia GTX 770 ; 3) «Ломоносов-1» – примерно 40-45% экспериментов (+«Чебышёв») ; 4) Кластер ИПХФ – 50% ; 5) Рабочие станции ИПХФ и ИЭМ РАН с поддержкой GPU Nvidia – 2-3% ; 6) МВС-100 – единичные эксперименты.

Сравнительное ускорение при увеличении числа процессоров при работе с программой VASP на «Чебышев» и «Ломоносов-1» приведены на рис. 1.

«Чебышёв»		«Ломоносов»	
Число CPU	Total CPU time (sec)	Число CPU	Total CPU time (sec)
16	30124.279	16	1642.455
24	25189.660	24	1482.387
32	19488.160	32	1160.043
40	17468.000	40	429.589
48	17255.580	48	413.821
64	17092.039	64	406.180

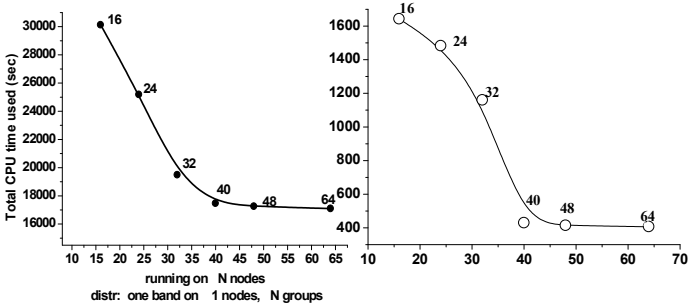


Рис. 1. Сравнительное ускорение при увеличении числа процессоров при работе с программой VASP на «Чебышев» и «Ломоносов-1»

Основные направления компьютерного моделирования компонентов ЛИА состоят в следующем:

- геометрия, энергетические и электронные характеристики нанокластеров Si_n (n=2÷350) и нанокомпозитных (Si-C) «коралов» с разветвленным углеродным;
- геометрия, энергетические и электронные характеристики обогащенных Si углеродных нановолокон, нанотрубок, «нанобумаги» с мономерной углеродной структурой;
- процессы литирования-делитирования электродных материалов на основе кремния и углерода;
- структура, энергетические и электронные характеристики твердых и полимерных электролитов с высокой проводимостью по ионам лития;
- процессы транспорта ионов лития в электролитах и на границе электрод-электролит;
- многократные циклы зарядки-разрядки в зависимости от степени насыщения литием и температурных условий.

В качестве примера на рис. 2 приведены структуры контактной области твердого $Li_{80}Ge_8P_{16}S_{96}$ (a) и полимерного LiNafion*8DMSO (b) электролитов с поверхностью электрода в виде кремний углеродной бумаги $Si_{32}C_{38}$.

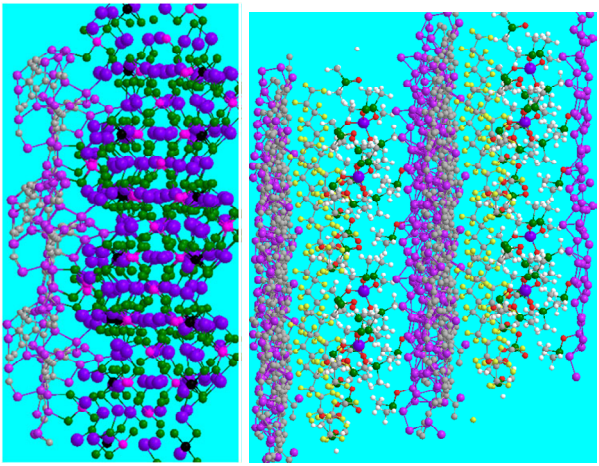


Рис. 2. Структуры контактной области твердого $Li_{80}Ge_8P_{16}S_{96}$ (a) и полимерного LiNafion*8DMSO (b) электролитов с поверхностью электрода в виде кремний углеродной бумаги $Si_{32}C_{38}$

Для оценки адекватности, достоверности и точности компьютерной модели проводился ряд испытаний ее различными методами. Расчетные модельные данные, получаемые в ходе эксплуатации модели при различных внешних параметрах и с различным составом ее компонентов, сопоставлялись с:

- наблюдаемыми или измеряемыми в экспериментах *аналитическими данными* (спектральные данные, рентгеноструктурные, электронно-микроскопические и рамановские измерения структурных параметров, тепловые эффекты, энергии связи в наноструктурах);
- *теоретическими данными*, полученными на основании строгих физико-химических расчетов;
- *данными моделирования*, проведенных другими способами или с построением других сторонних математических моделей и программных средств.

Примеры сравнения модельных и наблюдаемых данных приведены ниже.

1. Параметры ячеек Si-C агрегатов: для кластеров кристаллического кремния рассчитанный параметр a=5.47 Å всего на 1% превышает экспериментальную величину 5.43 Å, для прочих кристаллических параметров – не более 2%.

2. Рассчитанное значение средней энергии связи атомов в кристалле кремния 4.54 эВ/ат – это 98% от экспериментального значения 4.63 эВ/ат.

3. Разность модельных и экспериментальных равновесных валентных расстояний между ионами не превышает 0.05 Å.

4. Для теплот сублимации и энергии адсорбции – менее 12%.

5. Для относительных энергий и энергий активационных барьеров – менее 0.1 эВ.

6. Для рентгенофлюоресцентных спектров смещение расчетных пиков по сравнению с аналитическими менее 0.3 эВ.

Для оценки точности и адекватности физико-химической модели служат следующие критерии.

1. Реплицируемость результатов.

2. Внутренняя непротиворечивость.

3. Возможность применения на широком спектре моделируемых веществ (например, от малоатомных кластеров кремния до многоатомных мезоструктур $Si_nC_mLi_iN_j$).

4. Отсутствие явных противоречий наблюдаемым физико-химическим эффектам при эволюции реальных моделируемых систем (например, при нагреве-остывании).

5. Отсутствие в модели несоответствий физико-химическому состоянию моделируемых веществ (например, образованию металлического лития или разложению электролитов).

Основные выводы. Разработаная компьютерная модель ионного транспорта в литий-ионных аккумуляторах и батареях, предназначенная для прогнозирования количественных характеристик устройства и выявления лимитирующей стадии процесса позволяет с использованием передовых квантово-химических программ и высокоточных расчетов на молекулярном уровне (на основании анализа структуры и транспортных свойств электрода и электролита) оценить целевые свойства аккумулятора. Модель включает в себя ре-

зультаты компьютерного расчета процессов, протекающих на поверхности и в объеме ионпроводящих электродов и электролита.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы» проект выполняется при финансовой поддержке государства в лице МинОбрНауки России по Соглашению о предоставлении субсидии от 28 ноября 2014 г. № 14.607.21.0102 по теме: «Компьютерное моделирование абсорбционных и транспортных свойств твердых электролитов и наноструктурированных электродов на основе углерода и кремния в Li-ионных аккумуляторах и батареях» и Гранта РФФИ № 15-07-08399 «Создание эффективной среды компьютерного моделирования квантово-химических процессов и наноструктур на базе программного комплекса новейших вычислительных сервисов и высокоуровневых веб- и грид-интерфейсов к ним».

SUPERCOMPUTER SIMULATION PECULIARITY OF THE Li-ION POWER SOURCES OF NEW TYPES

T.S. Zyubina, A.S. Zyubin, G.A. Porfnovich, D.A. Varlamov, Yu.A. Dobrovolsky, V.M. Volohov, A.V. Volohov, E.S. Amosova

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

As a result of a large amount of computational experiments (more than two thousand) performed on a number of supercomputing resources, we have developed quantum-chemical models of various constituent components of Li-ion power sources based on silicon-carbon nanostructure composites and promising solid electrolytes. Transport, structural and energetic processes occurring in Li-ion power sources during numerous charge-discharge cycles have been simulated. Using methods of molecular dynamics, we estimated the e_ects of different temperature regimes on the nanosystem structure as well as the characteristics of these processes

Keywords: Nafion, Li-ion batteries, dimethylsulfoxide, silicon-carbon electrodes, and solid polymer electrolytes

УДК 004.94

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРОЛИЗА ТИОНИЛХЛОРИДА

М.А. Засовская

Ухтинский государственный технический университет
aspect51@yandex.ru

Современные исследования нельзя представить без использования современных информационных технологий. В настоящее время большой оборот и популярность набирают квантово-химические исследования на базе таких программ как Gaussian, Moltran и многих других.

Для теоретического изучения нейтральных молекулярных и ионных систем среднего размера с замкнутыми электронными оболочками, к которым относятся комплексы и кластеры воды с молекулами оксидов и галогенидов, наибольшее значение имеют методы, основанные на теории функционала плотности и теории возмущений, а также экстраполяционные методы, применяемые для высокоточной оценки термодинамических характеристик

Ключевые слова: тионилхлорид, кластеры воды, DFT, MP2, гидролиз, Gaussian, Moltran

Введение

Тионилхлорид – это промышленный реагент, производство которого в мире, достигает десятков тысяч тонн в год. $SOCl_2$ является очень мощным окислителем, и одно из его основных предназначений заключается в преобразовании спиртов и карбоновых кислот в соответствующие хлориды [1]. Тионилхлорид также рассматривается как потенциальное средство хлорирования кремнезема, в т.ч. при производстве хроматографических колонок [2]. В настоящее время $SOCl_2$ применяется при производстве литиевых источников тока (батарей), которые отличаются высокой энергетической плотностью и длительным сроком хранения.

При крупнотоннажном производстве большого количества тионилхлорида попадает в атмосферу, где протекает гидролиз и последующие фотореакции окисления и восстановления этого соединения до SO_2, SO_3, H_2SO_3, H_2SO_4, HCl, Cl_2, HOCl. Поэтому $SOCl_2$ является следовым загрязнителем атмосферы, реакции которого влияют на состав атмосферы, экологию и процессы формирования климата. Осознание этого факта привело к экспериментальным и теоретическим исследованиям кинетики гидролиза $SOCl_2$ во влажном воздухе [3].

Термодинамические и кинетические параметры гидролиза рассчитываются с помощью современных квантово–химических методов, в частности, теорией функционала плотности (DFT, B3LYP/6–311++G(2d,2p)); теорией возмущений Меллера–Плессета 2 порядка (MP2/6–311++G(3df,3pd) и MP2/aug–cc–pVTZ), высокоточным экстраполяционным методом для оценки термодинамических параметров G4; теорией связанных кластеров (CCSD(T)/CC–pVDZ и CCSD(T)/aug–CC–pVTZ)). Для всех изученных молекулярных структур и переходных состояний проведена полная оптимизация геометрии с последующим расчетом колебательных частот. Для всех оптимизированных структур в рамках гармонического приближения рассчитаны термодинамические функции. Для всех изученных элементарных реакций построены непрерывные пути реакции минимальной энергии. На основе этого, установлен полный, непрерывный путь реакции минимальной энергии, наиболее выгодного канала реакции, от реагентов до продуктов. Константы скорости ключевых элементарных стадий рассчитаны в рамках стандартной теории переходного состояния с учетом туннельных поправок по методам Вигнера, параболического барьера и теории туннелирования Скодье-Трулара.

Методика исследования

Геометрические конфигурации стационарных точек на поверхности потенциальной энергии системы $SOCl_2+2H_2O$ рассчитывались методом функционала плотности (DFT) с использованием обменного функционала B3LYP с базисом 6–311++G(2d,2p) и при помощи теории возмущений с базисом более высокой точности 6–311++G(3df,3pd)) и aug–cc–pVTZ. Также для высокоточного расчета термодинамических параметров использовалась неэмпирическая экстраполяционная схема G4 [4], но в случае комплексов большого размера использование данного метода было невозможно. Для комплексов $SOCl_2 \cdot H_2O$ (RC1–2) и $SOCl_2 \cdot 2H_2O$ (RC2–2), которые являются ключевыми интермедиатами гидролиза, полная оптимизация проводилась на высокоточных уровнях CCSD(T)/CC–pVDZ и CCSD(T)/aug–CC–pVTZ. Расчеты на уровнях DFT и MP2 проводились с помощью программ Gaussian03 [5], а для расчетов G4 использовался пакет программ Gaussian09 [6]. Программа CFOUR [7] использовалась для более высокого уровня расчета – CCSD(T).

Структура простых молекул описывалась координатами Z-матрицы, которые задавались с помощью длин связей и межатомных

углов. Z-матрица – это набор записей, которые содержат информацию о химическом типе атомов, расстояний между атомами и углах между ними.

Для более сложных структур комплексов начальная геометрия задавалась с помощью декартовых координат, выбранных на основе предварительно выполненных расчетов более простых молекул.

Оптимизация молекулярной геометрии выполнялась в программе Gaussian. Оптимизация и расчет структур продолжались до идентификации стационарной точки, после чего для найденных стационарных точек выполнялся расчет колебательных частот на том же уровне теории. В случае структур, которые отвечают минимумам на поверхности потенциальной энергии, не было найдено мнимых частот, и только одна мнимая частота была найдена для всех точек, соответствующих переходным состояниям.

Для всех переходных состояний (ПС) проводилась процедура следования по внутренней координате реакции IRC(internal reaction coordinate, IRC) [8]. Эта процедура состоит в бесконечно медленном спуске из точки ПС в точки локальных минимумов, которые разделяет данное переходное состояние. Два локальных минимума ППЭ всегда отделены друг от друга одним и только одним переходным состоянием, поэтому применение процедуры IRC является способом однозначно установить элементарную реакцию, в которой принимает участие данное переходное состояние.

Термодинамические данные и другие результаты, полученные после расчета, анализировались с помощью программы Moltran [9]. Эта программа используется для проверки результатов, полученных после квантово–химических расчетов, выполненных различными квантово–химическими пакетами, включая Gaussian и GAMESS. Она также позволяет редактировать молекулярные структуры, работая в качестве «молекулярного редактора». При молекулярном редактировании есть возможность сохранять и восстанавливать молекулярные фрагменты в базу данных и использовать их позднее для создания более сложных структур. Особенностью программы Moltran является возможность выполнять различные термодинамические расчеты (с широким изменением параметров модели),учитывая вклады внутренних вращений, если они присутствуют в молекуле.

Расчеты кинетических параметров реакции проводились с помощью программы KinTran [10], которая является дополнением к

программе Moltran. С помощью KinTran можно рассчитать термодинамические параметры реакции, ее кинетические параметры, константы скорости на основе стандартной теории переходного состояния СТПС (*conventional transition state theory, CTST*) и вклады квантового туннелирования в константу скорости.

Основные результаты и обсуждение

Термодинамические параметры реакции гидролиза

Полученные данные [11] подтверждают сделанные ранее выводы о том, что гидролиз в межмолекулярных комплексах имеет более низкие барьеры активации как с точки зрения энергии активации, так и энергии Гиббса. В этом случае энергия активации на 56,3 кДж·моль$^{-1}$ ниже, чем энергия активации для бимолекулярной реакции по данным расчета MP2 и 48,9 кДж·моль$^{-1}$ в соответствии с расчетными данными B3LYP. Лимитирующей стадией гидролиза в системе $SOCl_2$+2H_2O является гидролиз по первой связи S–Cl. Ее энергия активации по отношению к $SOCl_2$+2H_2O равна 56,3кДж·моль$^{-1}$ по данным расчета MP2 и 77,5 (B3LYP) кДж·моль$^{-1}$. Аналогичным образом, энергии активации Гиббса 140,4 (MP2) и 160,4 кДж·моль$^{-1}$ (B3LYP).

Было установлено, что гидролиз первой связи S–Cl проходит через последовательность двух элементарных стадий и промежуточный комплекс RC2–2, в котором $SOCl_2$ координируется с водой и имеет практически плоскую структуру. Этот комплекс, как и другие интермедиаты, структура которых найдена в этом исследовании, в принципе, могут быть зарегистрированы в эксперименте с использованием, например, метода матричной изоляции и вычисленных ИК спектров. Этот факт может быть использован для экспериментальной верификации результатов данной работы.

По сравнению с бимолекулярной стадией гидролиза, гидролиз в комплексе $SOCl_2(H_2O)_2$ имеет различное распределение продуктов гидролиза по первой и второй связи S–Cl, которые могут быть так же зарегистрированы в эксперименте.

Кинетика реакции

Координация дополнительной молекулы воды имеет существенное влияние на энергию активации гидролиза. Дополнительные расчеты на уровнях MP2(full)/aug–cc–pVTZ и CCSD(T)/aug–cc–pVTZ приводят к значениям энергии активации, которые находятся в хорошем согласии с предварительными значениями MP2/6–311++G(3df,

3pd). Однако, понижение свободной энергии активации Гиббса значительно менее заметно. Это связано с тем, что выгода энергии при координации существенно компенсируется потерями поступательной энтропии за счет координации дополнительной молекулы воды в тримолекулярном комплексе. Ускорение кажущейся константы скорости бимолекулярного гидролиза можно оценить как

$$\frac{k_3(298)[H_2O]}{k_2(298)} = \exp\left(-\frac{\Delta\Delta G^{\neq}(298)}{RT}\right),$$

где k_3 и k_2 являются кинетическими константами скорости реакции $SOCl_2$ в ди- и моногидратных комплексах, соответственно; $\Delta\Delta G^{\neq}(298)$ представляет собой разницу между энергиям активации Гиббса этих реакций; $[H_2O]$ – типичная концентрация воды в экспериментальных условиях, оценивается, как $5\cdot10^{17}$ молекул·см$^{-3}$.

Записанное выше выражение оценивает увеличение скорости на различных уровнях теории, примерно как 10^1 (B3LYP/6–311++G(2d,2p)), 10^{-1} (MP2/6–311++G(3df,3pd)), 10^1 (CCSD(T)/aug–cc–pVTZ). В таблице приведены константы скорости для реакции $SOCl_2$ с дигидратными комплексами для каждой элементарной реакции. В таблице приведены эффективные и кажущиеся константы гидролиза $SOCl_2 + 2H_2O$ для всех найденных переходных состояний с учетом эффекта туннелирования. Таким образом, ускорение реакции за счет образования дигидратных комплексов, оцененных на разных уровнях теории, оказывается не больше, чем на порядок величины. Тем не менее, этого ускорения реакции недостаточно, чтобы объяснить расхождение на 6–10 порядков между расчетными значениями бимолекулярной константы и экспериментальным значением.

Часто предполагается, что эффект туннелирования атомов водорода может ускорить скорость реакции. Чтобы оценить этот эффект, мы рассчитали коэффициент туннелирования, используя два различных подхода – формулу Вигнера [12] и метод Скодье–Трулара [13-14]. Для обоих теорий расчетные коэффициенты передачи при T = 298,15K составляют всего 1,00, что приводит к пренебрежимо малому ускорению за счет туннелирования протона. Такой результат не удивителен, если принимать во внимание, что реакция характеризуется низкой абсолютной величиной мнимой частоты, что означает, что кинетическая барьер является достаточно широким. Это также говорит о том, что более сложные подходы к оценке коэффициента туннелирования, учитывающих кривизну пути реакции в пространстве молекулярных координат (см.например, [15] для сравнения ре-

зультатов различных методов оценки туннельного эффекта) не могут привести к значительному повышению коэффициента, поскольку в случае широкого барьера не наблюдается сильного укорочения длин связей в структуре переходного состояния, которые могут привести к значительной кривизне пути реакции.

Рассчитанные константы скорости, коэффициенты туннелирования и кажущиеся бимолекулярные константы для лимитирующих стадий гидролиза в составе моно- и дигидратных комплексов

Лимитирующая стадия гидролиза с участием моно- и дигидратных комплексов	*k*(298), рассчитанная методом CTST ($см^3$/(молекул·с) или $см^6$/(молекул·с))	Максимальный коэффициент туннелирования	Кажущаяся бимолекулярная константа с учетом туннелирования, $см^3$/(молекул·с)[a)]	Увеличение кажущейся константы за счет координации второй молекулы воды
B3LYP/6-311++G(2d,2p)				
$SOCl_2+H_2O \rightarrow$ [TS1–1a] → RC1–2	$1{,}42 \cdot 10^{-31}$	1,01	$1{,}43 \cdot 10^{-31}$	6,03
$SOCl_2+2H_2O \rightarrow$ [TS2–1a] → RC2–2	$1{,}38 \cdot 10^{-48}$	1,25	$8{,}63 \cdot 10^{-31}$	
CCSD(T,full)/aug–cc–pVTZ// B3LYP/6-311++G(2d,2p)				
$SOCl_2+H_2O \rightarrow$ [TS1–1a] → RC1–2	$2{,}12 \cdot 10^{-35}$	1,01	$2{,}14 \cdot 10^{-35}$	36,6
$SOCl_2+2H_2O \rightarrow$ [TS2–1a] → RC2–2	$1{,}25 \cdot 10^{-51}$	1,25	$7{,}84 \cdot 10^{-34}$	

Ранее было показано [16], что туннелирование протона в системе $SO_3 + (H_2O)_2$ имеет решающее влияние на скорость гидратации SO_3. В результате проведенного нами исследования мы приходим к выводу, что в отличие от оксидасеры (VI), гидролиз оксигалогенидов

серы (IV) не имеет такой особенности. Возможно, это обусловлено тем, что сродство атомов хлора при образовании водородной связи значительно меньше по сравнению с водородными связями с атомами кислорода.

Выводы

С помощью пакета программ Gaussian, Moltran выполнено квантово-химическое моделирование процесса гидролиза тионилхлорида в газовой фазе с моно- и диаква комплексами.

Был впервые установлен механизм гидролиза тионилхлорида в газовой фазе, протекающий в составе нейтральных дигидратных комплексов различного строения, определены структурные, термодинамические и спектральные характеристики предреакционных комплексов, интермедиатов, термодинамические характеристики всех элементарных стадий, их кинетические параметры с учетом коэффициентов туннелирования.

Также было установлено, что механизм гидролиза, который проходит с участием нейтральных водных комплексов и кластеров (по крайней мере в комплексах с $n = 1,2$, как показано в настоящей работе) не позволяет полностью объяснить экспериментально наблюдаемую аномально высокую скорость этого процесса в газовой фазе и свидетельствует о протекании параллельных реакций по иному механизму.

Литература

1. B. J. Finlayson-Pitts, J. N. Jr. Pitts, Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere / 1999: Academic Press: New York.

2. G. G. Devyatykh, A.D. Bulanov., A. V. Gusev, P. G. Sennikov, A. M. Prokhorov, E. M. Dianov, H.-J. Pohl, Synthesis of High-Purity Monoisotope Silicon-28.// Dokl. Chem. (Engl. Transl.), 2001. 376.

3. T. J. Johnson, R.S. Disselkamp., Y.-F. Su, R. J. Fellows, M. L. Alexander, C. J. Driver, Gas-phase Hydrolysis of SOCl2.// J. Phys. Chem. A, 2003. 107.

4. L. A. Curtiss, P.C. Redfern, K. Raghavachari, Gaussian-4 theory.// J. Chem. Phys., 2007. 126: p. 84 - 108.

5. M. J. Frisch, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, Gaussian 03, 2003.

6. M.J. Frisch, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, Gaussian 09, G. Inc., Editor 2010, Wallingford CT.

7. J.F. Stanton, M.E. Harding, P.G. Szalay with contributions from A.A. Auer, R.J. Bartlett, U. Benedikt, C. Berger, D.E. Bernholdt, Y.J. Bomble, L. Cheng, O. Christiansen, M. Heckert, O. Heun, C. Huber, T.-C. Jagau, D. Jonsson, J. Jusélius, K. Klein, W.J. Lauderdale, D.A. Matthews, T. Metzroth, L.A. Mück, D.P. O'Neill, D.R. Price, E. Prochnow, C. Puzzarini, K. Ruud, F. Schiffmann, W. Schwalbach, C. Simmons, S. Stopkowicz, A. Tajti, J. Vázquez, F. Wang, J.D. Watts and the integral packages MOLECULE (J. Almlöf and P.R. Taylor), PROPS

(P.R. Taylor), ABACUS (T. Helgaker, H.J. Aa. Jensen, P. Jørgensen, and J. Olsen), and ECP routines by A.V. Mitin and C. van Wüllen., CFOUR, http://www.cfour.de.

8. C. Gonzalez, H.B.Schlegel, Reaction Path Following in Mass-Weighted Internal Coordinates.// J. Phys. Chem., 1990. 94: p. 5523-5527.

9. S.K. Ignatov, Moltran v.2.5 - Program for molecular visualization and thermodynamic calculations, 2004, http://www.unn.ru/chem/moltran: University of Nizhny Novgorod.

10. S.K. Ignatov, Kintran - Program for kinetic calculations, 2015, http://www.unn.ru/chem/moltran/kintran: University of Nizhny Novgorod.

11. Засовская М. А. Квантово-химическое моделирование кластерного процесса гидролиза SOCl2 димерами воды с помощью пакета программ Gaussian и Moltran // Ресурсы Европейского Севера. Технологии и экономика освоения. 2015. № 1. URL: http://resteo.ru/zasovskaya-1/.

12. E.P. Wigner., Uber das Uberschreiten von Potential schwellen beichemischenReactionen, Zeitschrift fur physikalischeChemie B. Z. // Phys.Chem.B, 1932. 19: p. 203-216.

13. R. T. Skodje, D.G. Truhlar, B. C. Garrett, A General Small-Curvature Approximation for Transition-State-Theory Transmission Coefficients.// The Journal of Physical Chemistry, 1981. 85,22: p. 3019-3023.

14. R.T. Skodje, D.G. Truhlar, Parabolic Tunneling Calculations.// J. Phys. Chem., 1981. 85: p. 624-628.

15. A.G. Vandeputte, M.K. Sabbe, M.-F. Reyniers, V. V. Speybroeck, M. Waroquier, G.B. Marin, Theoretical Study of the Thermodynamics and Kinetics of Hydrogen Abstractions fromHydrocarbons.// J. Phys. Chem. A 2007. 111: p. 11771 – 11786.

16. E.R. Lovejoy, D.R. Hanson, Kinetics and Products of the Reaction SO3 + NH3 + N2.// J. Phys. Chem., 1996. 100(11): p. 4459-4465.

THE MODELING OF THE HYDROLYSIS OF THE THIONYL CHLORIDE

M.A. Zasovskaya

Ukhta State Technical University

The modern researches cannot be presented without use of the modern informational technologies. Now a big turn and popularity gather quantum and chemical researches on the basis of such programs as Gaussian, Moltran and ext.

For theoretical studying of neutral molecular and ionic systems of the average size with self-contained electronic shells to which complexes and clusters of water with molecules of oxides and halogenids belong the methods based on theories of a functional of density and a perturbation theory, and also the extrapolation methods applied to a high-precision assessment of thermodynamic characteristics have the greatest value

Keywords: thionyl chloride, water clusters, DFT, MP2, hydrolysis, Gaussian, Moltran

УДК 519.684, 004.42

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА СВЕРХРЕШЕТКИ, СОСТОЯЩЕЙ ИЗ ЧЕРЕДУЮЩИХСЯ ПОЛОСОК ОДНОСЛОЙНОГО И ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА

С.О. Джимох[1], Д.В. Завьялов[1], В.И. Конченков[1], С.В. Крючков[1,2]

[1]Волгоградский государственный технический университет
[2] Волгоградский государственный социально-педагогический университет
kontchenkov@yandex.ru

Предложена модель сверхрешетки, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена. С использованием метода матрицы переноса выведено дисперсионное соотношение. На основе численного анализа дисперсионного соотношения построены графики зависимости энергии электрона от компонент его квазиимпульса

Ключевые слова: двухслойный графен, модель Кронига-Пенни, метод матрицы переноса

Сверхрешетки на основе графена (СРГ) привлекают внимание исследователей [1-3] в связи возможностью создания на их основе устройств, в которых используются эффекты, связанные с неквадратичностью энергетического спектра и конечной шириной зоны проводимости, а также со взаимной зависимостью движений в носителей тока в направлении чередования слоев сверхрешетки и в поперечном направлении, возникающей в силу неаддитивности энергетического спектра графена [4]. В настоящей работе рассматривается сверхрешетка, состоящая из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена (рис. 1). Будем рассматривать так называемый bias bilayer graphene [4], в котором за счет действия постоянного электрического поля, прикладываемого перпендикулярно поверхности образца, формируется запрещенная зона. Энергетический спектр этого материала определяется следующим выражением:

$$\varepsilon_\alpha = \pm\sqrt{\Delta^2 + \hbar^2 v_F^2 k^2 + \frac{t_\perp^2}{2} \pm \sqrt{\hbar^2 \mathrm{v}_F^2 k^2 \left(4\Delta^2 + t_\perp^2\right) + \frac{t_\perp^4}{4}}} \,. \qquad (1)$$

Здесь $v_F \sim 10^8$ см/с - скорость на поверхности Ферми в графене, $\hbar\mathbf{k}$ - квазиимпульс электрона, $t_\perp \approx 0.4$ эВ - интеграл перекрытия между слоями двухслойного графена, $\Delta \sim 0.1...0.3 t_\perp$ - параметр, определяющий ширину запрещенной зоны (полуширина запрещенной зоны $\Delta' = \Delta / \sqrt{4\left(\Delta / t_\perp\right)^2 + 1} \approx \Delta$). Величину Δ можно менять путем изменения внешнего поперечного поля, что дает возможность регулирования параметров структуры.

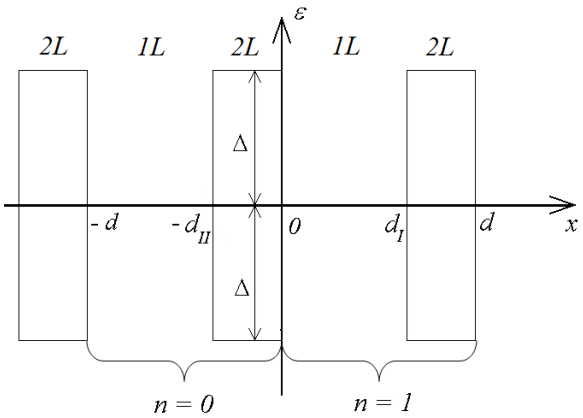


Рис. 1. Схема расположения слоев сверхрешетки: 1L – полоска однослойного графена, 2L – полоска двухслойного графена

Для получения дисперсионного соотношения воспользуемся подходом, основанным на модели Кронига-Пенни, развитым в [1].

Гамильтониан двухслойного графена имеет вид:

$$H_{II} = \begin{pmatrix} \Delta & \hbar v_F\left(-i\dfrac{\partial}{\partial x} - \dfrac{\partial}{\partial y}\right) & t_\perp & 0 \\ \hbar v_F\left(-i\dfrac{\partial}{\partial x} + \dfrac{\partial}{\partial y}\right) & \Delta & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & -\Delta & \hbar v_F\left(-i\dfrac{\partial}{\partial x} + \dfrac{\partial}{\partial y}\right) \\ 0 & 0 & \hbar v_F\left(-i\dfrac{\partial}{\partial x} - \dfrac{\partial}{\partial y}\right) & -\Delta \end{pmatrix}.$$

Решением уравнения Шредингера будет четырехкомпонентный спинор $\Psi^{II} = (\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4)^T$. Компоненты ψ_1, ψ_2 соответствуют состояниям на подрешетках A_1 и B_1 одного листа, а компоненты ψ_3, ψ_4 - состояниям на подрешетках A_2 и B_2 другого листа графена. В целом гамильтониан записан вблизи одной из дираковских точек. Поскольку для получения трансляционной матрицы необходимо потребовать выполнения условий сшивки волновой функции [1]:

$$\Psi_n^I(d_I - 0) = \Psi_n^{II}(d_I + 0),\ \Psi_n^{II}(d - 0) = \Psi_{n+1}^I(+0), \qquad (2)$$

необходимо записать гамильтониан однослойного графена также в виде матрицы размером 4×4. Формально это можно сделать, положив в (1) $t_\perp = \Delta = 0$ - в этом случае собственные значения гамильтониана будут равны $E_I = \pm v_F \hbar\sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, что соответствует спектру однослойного графена в низкоэнергетическом приближении (именно такой подход используется в [4], где в рассмотрена СРГ, состоящая из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена (unbiased bilayer graphene), для которого полагают $\Delta = 0$). С другой стороны, при таком подходе компоненты спинора, являющегося решением уравнения Шредингера $H_I\Psi^I = E_I\Psi^I$, имеют другой смысл: ψ_1, ψ_2 соответствуют состояниям на подрешетках A_1 и B_1 для электрона вблизи дираковской точки K_1, ψ_3, ψ_4 - состояниям на тех же подрешетках, но соответствующим дираковской точке K_2. В низкоэнергетическом приближении в отсутствии переброса электронов между долинами эти состояния независимы друг от друга. Именно независимость состояний позволяет отсчитывать значения квазиимпульса от ближайшей дираковкой точки, что дает возможность расширить двухстрочную матрицу гамильтониана однослойного графена до четырехстрочной путем простой добавки комплексно сопряженной матрицы в качестве второго блока блочно-диагональной матрицы размером 4×4. Следует отметить, что наиболее корректно в качестве условия сшивки решения требовать непрерывности плотности потока вероятности, но нахождение выражения для дисперсионного соотношения при таком условии – предмет дальнейшего исследования. Итак, гамильтониан однослойного графена запишем в виде

$$H_I = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F\left(-i\dfrac{\partial}{\partial x}-\dfrac{\partial}{\partial y}\right) & 0 & 0 \\ \hbar v_F\left(-i\dfrac{\partial}{\partial x}+\dfrac{\partial}{\partial y}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hbar v_F\left(-i\dfrac{\partial}{\partial x}+\dfrac{\partial}{\partial y}\right) \\ 0 & 0 & \hbar v_F\left(-i\dfrac{\partial}{\partial x}-\dfrac{\partial}{\partial y}\right) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Решение уравнения Шредингера в области ямы (1L на рис. 1) будем искать в виде

$$\Psi^I = A\psi^I \exp\left(ik_y y\right) = A\left(\begin{pmatrix}\varphi_{1p}\\ \varphi_{2p}\\ \varphi_{3p}\\ \varphi_{4p}\end{pmatrix}\exp\left(ik_1 x\right)+\begin{pmatrix}\varphi_{1n}\\ \varphi_{2n}\\ \varphi_{3n}\\ \varphi_{4n}\end{pmatrix}\exp\left(-ik_1 x\right)\right)\exp\left(ik_y y\right). \quad (4)$$

Подставляя (4) в (3), получаем следующее выражение для волновой функции

$$\psi^I = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \dfrac{\lambda_+}{E} & -\dfrac{\lambda_-}{E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & \dfrac{\lambda_-}{E} & -\dfrac{\lambda_+}{E} \end{pmatrix}}_{G}\begin{pmatrix} e^{ik_1 x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1 x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_1 x} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi_{1p}\\ \varphi_{1n}\\ \varphi_{3p}\\ \varphi_{3n}\end{pmatrix}. \quad (5)$$

Здесь введены обозначения $\lambda_\pm = \hbar v_F\left(k_1 \pm ik_y\right)$, значение k_1 может быть найдено из условия $E^2 = \hbar^2 v_F^2\left(k_1^2 + k_y^2\right)$. Из (4) видно, что пары компонент $\varphi_{1p}, \varphi_{1n}$ и $\varphi_{3p}, \varphi_{3n}$ независимы друг от друга.

В области барьера нужно рассмотреть две ситуации: когда энергия электрона на границы ямы и барьера меньше Δ - в этом случае решение затухающее $\psi^{II} = B_1 \exp\left(k_2 x\right) + B_2 \exp\left(-k_2 x\right)$, и случай, когда энергия больше Δ - в этом решение осциллирующее: $\psi^{II} = C_1 \exp\left(ik_2 x\right) + C_2 \exp\left(-ik_2 x\right)$. В первом случае имеем

$$\psi^{II}=\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \dfrac{\tilde{\lambda}_-}{\Delta-E} & -\dfrac{\tilde{\lambda}_+}{\Delta-E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & b \\ 0 & 0 & -\dfrac{\tilde{\lambda}_+ b}{\Delta+E} & \dfrac{\tilde{\lambda}_- b}{\Delta+E} \end{pmatrix}}_{J} \begin{pmatrix} e^{kx} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2 x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2 x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2 x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{1p} \\ \psi_{1n} \\ \psi_{1p} \\ \psi_{1n} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$b=-\dfrac{\left(\Delta-E\right)^2-\tilde{\lambda}_+\tilde{\lambda}_-}{\left(\Delta-E\right)t_\perp}$, $\tilde{\lambda}_{\pm}=i\hbar v_F\left(k_2\pm k_y\right)$. Это выражение справедливо при выполнении условия

$$\left(4\Delta^2+t_\perp^2\right)E^2-\Delta^2 t_\perp^2>0\,, \quad (7)$$

а также условия

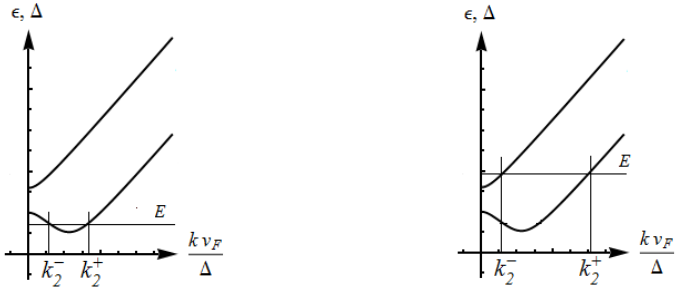
$$k_y^2-\frac{\left(\Delta^2+E^2\right)}{\hbar^2 v_F^2}+\frac{\sqrt{\left(4\Delta^2+t_\perp^2\right)E^2-\Delta^2 t_\perp^2}}{\hbar^2 v_F^2}\geq 0\,, \quad (8)$$

при этом $k_2=k_2^+=\sqrt{k_y^2-\dfrac{\left(\Delta^2+E^2\right)}{\hbar^2 v_F^2}+\dfrac{\sqrt{\left(4\Delta^2+t_\perp^2\right)E^2-\Delta^2 t_\perp^2}}{\hbar^2 v_F^2}}$ или условия

$$k_y^2-\frac{\left(\Delta^2+E^2\right)}{\hbar^2 v_F^2}-\frac{\sqrt{\left(4\Delta^2+t_\perp^2\right)E^2-\Delta^2 t_\perp^2}}{\hbar^2 v_F^2}\geq 0\,, \quad (9)$$

при этом $k_2=k_2^-=\sqrt{k_y^2-\dfrac{\left(\Delta^2+E^2\right)}{\hbar^2 v_F^2}-\dfrac{\sqrt{\left(4\Delta^2+t_\perp^2\right)E^2-\Delta^2 t_\perp^2}}{\hbar^2 v_F^2}}$. Наличие двух различных выражений для k_2 связано с тем, что одному значение энергии могут соответствовать два значения модуля квазиимпульса, отвечающие либо одной нижней подзоне из-за наличия области отрицательной эффективной массы (рис. 2а), либо разным подзонам (рис. 2б).

Осциллирующее решение может быть получено из (6) путем формальной замены $k_2\to i\kappa_2$.



а) б)

Рис. 2. Зависимость энергии электрона в двухслойном графене от модуля его квазиимпульса в зоне проводимости

Для вывода дисперсионного соотношения воспользуемся методом матрицы переноса (Т-матрицы), которая связывает значения компонент спинора для l-й сверхъячейки с компонентами спинора для $(l+1)$-й сверхъячейки:

$$\begin{pmatrix} \varphi_{1p}(l+1) \\ \varphi_{1n}(l+1) \\ \varphi_{3p}(l+1) \\ \varphi_{3n}(l+1) \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \varphi_{1p}(l) \\ \varphi_{1n}(l) \\ \varphi_{3p}(l) \\ \varphi_{3n}(l) \end{pmatrix}. \qquad (10)$$

Воспользовавшись методикой, подробно описанной в [1], получаем в случае затухающего решения в области барьера

$$T = G^{-1} J \begin{pmatrix} e^{k_2 d_{II}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-k_2 d_{II}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_2 d_{II}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-k_2 d_{II}} \end{pmatrix} J^{-1} G \begin{pmatrix} e^{ik_1 d_I} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 d_I} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{ik_1 d_I} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-ik_1 d_I} \end{pmatrix}. \qquad (11)$$

Согласно [1], дисперсионное соотношение имеет вид

$$Tr\,T = 2\cos k_x d\,, \qquad (12)$$

где $Tr\,T$ – след матрицы Т (сумма элементов, стоящих на главной диагонали). Дисперсионное соотношение принимает вид:

$$\cos q_x = 2\cos q_1 a_I \ \mathrm{ch}\, q_2 a_{II} + \frac{E^2\left(q_1^2 - q_2^2\right) + \Delta\left(q_y^2 - q_1^2\right)}{\left(\Delta^2 - E^2\right) q_1 q_2} \sin q_1 a_I \ \mathrm{sh}\, q_2 a_{II}\,, \qquad (13)$$

$q_x = k_x d$, $q_y = k_y d$, $q_{1,2} = k_{1,2} d$, $a_I = d_I / d$, $a_{II} = d_{II} / d$, величины E и Δ измеряются в единицах $t_\perp$, $q_1 = \sqrt{E^2 / B^2 - q_y^2}$, $B = \hbar v_F / \left(t_\perp d\right)$, $q_2 = \sqrt{q_y^2 - \frac{\Delta^2 + E^2}{B^2} + \frac{\sqrt{\left(4\Delta^2 + 1\right)E^2 - \Delta^2}}{B^2}}$ при выполнении условия (8) и $q_2 = \sqrt{q_y^2 - \frac{\Delta^2 + E^2}{B^2} - \frac{\sqrt{\left(4\Delta^2 + 1\right)E^2 - \Delta^2}}{B^2}}$ при выполнении условия (9).

В случае, противоположном условию (8) $q_2 = \kappa_2 d = \sqrt{-q_y^2 + \frac{\Delta^2 + E^2}{B^2} - \frac{\sqrt{\left(4\Delta^2 + 1\right)E^2 - \Delta^2}}{B^2}}$, в случае, противоположном условию (9) $q_2 = \sqrt{-q_y^2 + \frac{\Delta^2 + E^2}{B^2} + \frac{\sqrt{\left(4\Delta^2 + 1\right)E^2 - \Delta^2}}{B^2}}$, а дисперсионное соотношение имеет вид

$$\cos q_x = 2\cos q_1 a_I \cos q_2 a_{II} + \frac{E^2\left(q_1^2 + q_2^2\right) + \Delta\left(q_y^2 - q_1^2\right)}{\left(\Delta^2 - E^2\right)q_1 q_2}\sin q_1 a_I \sin q_2 a_{II}. \quad (14)$$

Для вычисления явной зависимости энергии от компонент квазиимпульса $E\left(q_x, q_y\right)$ на основе уравнений (13), (14) используется Wolfram Mathematica, в частности, функция FindRoot[] с опцией Method->”Brent”, которая позволяет находить решение уравнения на заданном промежутке $[q_{xn}, q_{xn+1}]$. На рис. 3 приведен график энергии электрона в двух нижних минизонах. Видно, что зависимость энергии от одной из компоненты (q_x) носит периодический характер. Графики построены при $d \sim 10^{-6} см$, $\Delta \sim 0.1 t_\perp$, $a_1 = a_{II} = 0.5$. Ширина запрещенных зон составляет порядка 0.1 электрон-вольта, что приблизительно совпадает со значениями ширины запрещенных зон в других полупроводниковых материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России на выполнение государственных работ в сфере научной деятельности в рамках проектной части государственного задания, код проекта: 3.2797.2017/4.6, и базовой части государственного задания, код проекта 3.8329.2017/8.9.

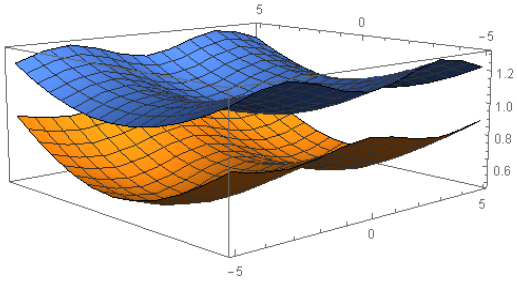


Рис. 3. График энергии электрона в первых двух минизонах

Литература

1. Ратников, П.В. Сверхрешётка на основе графена на полосчатой подложке / П.В. Ратников // ПЖЭТФ. 2009. Т. 90. – Вып. 6. – С. 515.

2. Завьялов, Д.В. Выпрямление поперечного тока в сверхрешетке на основе графена / Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // ФТП. - 2012. - Т. 46. - Вып. 1. - С. 113-120.

3. Fan, X. Electronic band gaps and transport properties in periodically alternating mono- and bi-layer graphene superlattices / X. Fan, W. Huang, T. Ma, L.-G. Wang and H.-Q. Lin // EPL – 2015. – V. 112. - 58003.

4. Nilsson, J. Electronic properties of bilayer and multilayer graphene / J. Nilsson, A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres // Physical Review B. - 2008. – V. 78. – Is. 4. – P. 045405.

INVESTIGATION OF THE ENERGY SPECTRUM OF THE SUPERLATTICE CONSISTING OF THE ALTERNANT STRIPS OF ONE-LAYER AND TWO-LAYER GRAPHENE

S.O. Jimoh[1], D.V. Zav`yalov[1], V.I. Konchenkov[1], S.V. Kryuchkov[1,2]

[1]Volgograd State Technical University
[2]Volgograd State Socio Pedagogical University

A superlattice model consisting of alternating strips of single-layer and two-layer graphene is proposed. Using the transfer matrix method, a dispersion relation is derived. Based on the numerical analysis of the dispersion relation, graphs of the dependence of the electron energy on the components of its quasi-momentum are plotted

Keywords: bias bilayer graphene, Kronig-Penny model, transfer matrix method

УДК 621.8

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УПРУГОГО ЭЛЕМЕНТА В КВАДРАТИЧНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ПО СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ

Д.А. Романюк, С.А. Корнеев, В.С. Корнеев

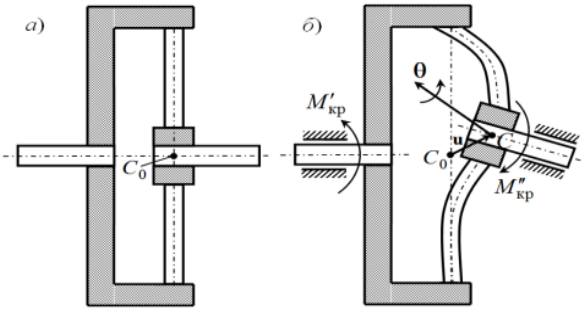
Омский государственный технический университет
bobobadze@yandex.ru

В статье предложен общий подход расчета плоской высокоэластичной муфты при сложном смещении валов в пространстве с учетом кинематики, силового воздействия и диссипации энергии с использованием основных законов механики и термодинамики. Приведены рекомендации по дальнейшему использованию полученных результатов

Ключевые слова: эластичная муфта, тензор, главный вектор, главный момент, диссипация, термодинамика

Одной из перспективных конструкций высокоэластичных муфт является конструкция резинокордной плоской муфты (РКПМ), которая разработана в «НПО «Прогресс».

В классической теории упругости широко применяется метод, по которому свободная энергия (упругий потенциал) представляется как квадратичная функция компонент тензора напряжений [1].



РКПМ с одним упругим элементом: а – отсчётная (начальная, недеформированная) конфигурация; б – актуальная (текущая, деформированная) конфигурация **u** – вектор перемещения полюса C, **θ** – вектор поворота малой полумуфты вокруг полюса C

Разложим свободную энергию, определенную для упругой муфты [3] $F(\mathbf{u},\boldsymbol{\theta},T)$ в ряд Тейлора по векторным аргументам $\mathbf{u}$, и $\boldsymbol{\theta}$ ограничимся квадратичными слагаемыми:

$$F(\mathbf{u},\boldsymbol{\theta},T) \cong F_0 + \left(\frac{\partial F}{\partial \mathbf{u}}\right)_0 \cdot \mathbf{u} + \left(\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\theta}}\right)_0 \cdot \boldsymbol{\theta} + \frac{1}{2}\Big[\mathbf{u} \cdot \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{u}\partial \mathbf{u}}\right)_0 \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\theta} \cdot \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{\theta}\partial \boldsymbol{\theta}}\right)_0 \cdot \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\theta} \cdot \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{\theta}\partial \mathbf{u}}\right)_0 \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{u}\partial \boldsymbol{\theta}}\right)_0 \cdot \boldsymbol{\theta}\Big]. \quad (1)$$

Здесь нижний индекс «0» указывает на значение соответствующей величины при $\mathbf{u} = 0, \boldsymbol{\theta} = 0$ и некоторой температуре T. Исходя из известных выражений для плоской эластичной муфты [3]

$$\mathrm{P} = \left(\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{u}}\right)_{\theta,\mathrm{T}}, \mathrm{M_C} = \left(\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \theta}\right)_{\mathrm{u},\mathrm{T}}, S = -\left(\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{T}}\right)_{\mathrm{u},\theta} \quad (2)$$

имеем

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \mathbf{u}}\right)_0 \equiv \left(\frac{\partial F}{\partial \mathbf{u}}\right)_{\boldsymbol{\theta},T}\Bigg|_{\substack{\mathbf{u}=\mathbf{0}\\ \boldsymbol{\theta}=\mathbf{0}}} = \mathbf{P}(\mathbf{u}=\mathbf{0},\mathbf{u}=\mathbf{0},\boldsymbol{T}) = 0,$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\theta}}\right)_0 \equiv \left(\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\theta}}\right)_{\boldsymbol{\theta},T}\Bigg|_{\substack{\mathbf{u}=\mathbf{0}\\ \boldsymbol{\theta}=\mathbf{0}}} = \mathbf{M_C}(\mathbf{u}=\mathbf{0},\mathbf{u}=\mathbf{0},\boldsymbol{T}) = 0,$$

где $\mathbf{M_C}$ – приведённый главный момент, P – приведённый главный вектор силы [3], S– энтропия.

Поэтому разложение (1) можно представить в виде

$$F(\mathbf{u},\boldsymbol{\theta},T) = F_0 + \frac{1}{2}[\mathbf{u} \cdot \mathbf{K} \cdot \mathbf{u} + \boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\theta} + +2\mathbf{u} \cdot \mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\theta}]. \quad (3)$$

Здесь введены обозначения

$$\mathbf{K} = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{u}\partial \mathbf{u}}\right)_0, \ \boldsymbol{\Omega} = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{\theta}\partial \boldsymbol{\theta}}\right)_0, \ \mathbf{C} = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{u}\partial \boldsymbol{\theta}}\right)_0 = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{\theta}\partial \mathbf{u}}\right)_0^T \quad (4)$$

для тензоров второго ранга, которые по примеру будем называть *трансляционным*, *ротационным* и *смешанным тензорами* соответственно. Все три тензора $\mathbf{K}$, $\boldsymbol{\Omega}$, $\mathbf{C}$ зависят от температуры T, как и свободный член F_0 в (3).

Трансляционный тензор $\mathbf{K}$ и ротационный тензор $\boldsymbol{\Omega}$ являются симметричными, положительно определёнными тензорами (все три собственных числа данных тензоров положительны). Положительная определённость тензоров $\mathbf{K}$, $\boldsymbol{\Omega}$ вытекает из условия не отрицательности изотермического приращения свободной энергии $\Delta F_T = F(\mathbf{u},\boldsymbol{\theta},T) - F_0(T)$ при любых значениях вектора перемещения $\mathbf{u}$ и

вектора поворота $\boldsymbol{\theta}$. Действительно, согласно выражениям [5] $dA^{ext} = \mathbf{P} \cdot \mathrm{d}\mathbf{u} + \mathbf{M_C} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{\theta}$, $d(F) = \mathbf{P} \cdot \mathrm{d}\mathbf{u} + \mathbf{M_C} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{\theta} - SdT$ элементарная свободная энергия будет иметь вид $dF = dA^{ext} - SdT$.

Для изотермического процесса деформирования упругого элемента муфты, в ходе которого вектор перемещения $\mathbf{u}$ и вектор поворота $\boldsymbol{\theta}$ меняются от нуля до некоторого произвольного значения, имеет место интегральное соотношение

$$\Delta F_T = \int dF = F(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, T) - F_0(T) = \int dA^{ext} = A^{ext}.$$

Работа внешних сил A^{ext}, затрачиваемая на деформацию упругого элемента муфты, принимает только положительные значения, если только $|\mathbf{u}| \neq \mathbf{0}$ и (или) $|\boldsymbol{\theta}| \neq \mathbf{0}$. Отсюда приходим к искомому результату

$$\Delta F_T = F(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, T) - F_0(T) \geq 0 \qquad (5)$$

Знак равенства в (5) имеет место тогда и только тогда, когда $\mathbf{u} = 0, \boldsymbol{\theta} = 0$

Смешанный тензор $\mathbf{C}$ в общем случае произволен. В силу (5) он должен удовлетворять ряду ограничений. Чтобы найти их, положим в (3) $\mathbf{u} = u_\propto \mathbf{e}_\alpha$, $\boldsymbol{\theta} = \theta_\beta \mathbf{e}_\beta$, где $\mathbf{e}_\alpha, \mathbf{e}_\beta$ – орты декартовой системы координат (α, β = 1, 2, 3). С учётом (5) получаем

$$2\Delta F_T = K_{\alpha\alpha}(u_\propto)^2 + \Omega_{\beta\beta}\left(\theta_\beta\right)^2 + 2C_{\alpha\beta}\theta_\beta u_\propto \geq 0. \qquad (6)$$

Приняв поочерёдно $u_\propto \neq 0$, $\theta_\beta = 0$ и $u_\propto = 0$, $\theta_\beta \neq 0$, приходим к выводу, что все элементы матриц $[K_{ij}]$, $[\Omega_{ij}]$ на главной диагонали положительные

$$K_{\alpha\alpha} > 0, \Omega_{\beta\beta} > 0. \qquad (7)$$

Положив после этого в (6) $u_\propto = \frac{\cos\psi}{\sqrt{K_{\alpha\alpha}}}$, $\theta_\propto = \frac{\sin\psi}{\sqrt{\Omega_{\beta\beta}}}$, получим

$$1 + \frac{C_{\alpha\beta}}{\sqrt{K_{\alpha\alpha}}\sqrt{\Omega_{\beta\beta}}}\sin 2\psi \geq 0.$$

Взяв $\psi = -\pi/4$, если $C_{\alpha\beta} > 0$, или $\psi = \pi/4$, если $C_{\alpha\beta} < 0$ имеем

$$1 - \frac{|C_{\alpha\beta}|}{\sqrt{K_{\alpha\alpha}}\sqrt{\Omega_{\beta\beta}}} > 0.$$

Следовательно, справедливым является неравенство

$$K_{\alpha\alpha}\Omega_{\beta\beta} > {C_{\alpha\beta}}^2, \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3). \qquad (8)$$

Обратимся теперь к термодинамическим соотношениям (2). Подставив в них (3), получим

$$\mathrm{P} = \left(\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{u}}\right)_{\theta,\mathrm{T}} = \mathbf{K}\cdot\mathbf{u} + \mathbf{C}\cdot\boldsymbol{\theta}, \quad (9)$$

$$\mathrm{M_C} = \left(\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \theta}\right)_{\mathrm{u,T}} = \boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{\theta} + \mathbf{C}^T\cdot\mathbf{u}, \quad (10)$$

$$\mathrm{S} = -\left(\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{T}}\right)_{\mathrm{u},\theta} = S_0 + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}[\mathbf{u}\cdot\mathbf{K}'\cdot\mathbf{u} + \boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\Omega}'\cdot\boldsymbol{\theta} + \mathbf{2u}\cdot\mathbf{C}'\cdot\boldsymbol{\theta}]. \quad (11)$$

Здесь введены обозначения

$$S_0(T) = -\frac{\mathrm{d}F_0(T)}{\mathrm{d}T},\ \mathbf{K}'(T) = -\frac{\mathrm{d}\mathbf{K}(T)}{\mathrm{d}T},$$
$$\boldsymbol{\Omega}'(T) = -\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}(T)}{\mathrm{d}T},\ \mathbf{C}'(T) = -\frac{\mathrm{d}\mathbf{C}(T)}{\mathrm{d}T}. \quad (12)$$

Выражение для внутренней энергии упругого элемента муфты можно найти с помощью определения [3]

$$F = U - TS: \quad (13)$$

$$U = F + TS = U_0 + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}[\mathbf{u}\cdot(\mathbf{K} - T\mathbf{K}')\cdot\mathbf{u} + \boldsymbol{\theta}\cdot(\boldsymbol{\Omega} - T\boldsymbol{\Omega}')\cdot\boldsymbol{\theta} + \mathbf{2u}\cdot(\mathbf{C} - T\mathbf{C}')\cdot\boldsymbol{\theta}], \quad (14)$$

где

$$U_0(T) = F_0(T) + TS_0. \quad (15)$$

Чтобы завершить конкретизацию термодинамических соотношений, обратимся к понятию теплоёмкости C упругого элемента муфты при неподвижной малой полумуфте:

$$C = \left(\frac{\mathrm{d}Q^{ext}}{\mathrm{d}T}\right)_{\mathbf{u},\boldsymbol{\theta}}. \quad (16)$$

На основании [5]

$\mathrm{d}E = \mathrm{d}A^{ext} + \mathrm{d}Q^{ext}$, $dA^{ext} = \mathbf{P}\cdot\mathrm{d}\mathbf{u} + \mathbf{M_C}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{\theta}$, $dQ^{ext} = TdS$,

для теплоёмкости (16) имеем

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{u,\theta}. \quad (17)$$

С достаточной точностью теплоёмкость (16) можно считать константой. Тогда, полагая для простоты выкладок $\mathbf{u} = 0$, $\boldsymbol{\theta} = 0$ и принимая во внимание (11), (14), (13) получим

$$U_0(T) = U_\phi + C(T - T_\phi). \quad (18)$$

$$S_0(T) = S_\phi + C\int_{T_\phi}^{T}\frac{\mathrm{d}T}{T} = S_\phi + C\ln\frac{\mathrm{d}T}{T}, \quad (19)$$

$$F_0(T) = U_0(T) + TS_0(T) = F_\phi - S_\phi(T - T_\phi) + C(T - T_\phi) - C\ln\frac{\mathrm{d}T}{T}. \quad (20)$$

Здесь T_ϕ – некоторая фиксированная температура (например, комнатная),

$$U_\phi = U_0(T_\phi) = U(\mathbf{u} = 0, \boldsymbol{\theta} = 0, T = T_\phi),$$

$$S_\phi = S_0(T_\phi) = S(\mathbf{u}=0, \boldsymbol{\theta}=0, T=T_\phi),$$
$$F_\phi = U_\phi + T_\phi S_\phi = F_0(T_\phi) = F(\mathbf{u}=0, \boldsymbol{\theta}=0, T=T_\phi).$$

Калибровка по опытным данным

Определение численных значений компонент трансляционного $\mathbf{K}$, ротационного $\boldsymbol{\Omega}$ и смешанного $\mathbf{C}$ тензоров при фиксированной температуре T осуществляется на основании соотношений(9) и [3] $\mathbf{P}=\mathbf{P}''$, $\mathbf{M_C}=\mathbf{M_C}''\cdot\mathbf{Z^{-1}}(\boldsymbol{\theta})$, которые в совместной записи имеют следующий вид:

$$\mathbf{K}\cdot\mathbf{u}+\mathbf{C}\cdot\boldsymbol{\theta}=\mathbf{P}'', \boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{\theta}+\mathbf{C}^T\cdot\mathbf{u}=\mathbf{M_C}''\cdot\mathbf{Z^{-1}}(\boldsymbol{\theta}), \quad (21)$$

где в соответствии с известными выражениями для плоской эластичной муфты [3]

$$\mathrm{d}\varphi = \left[\mathrm{I}+\frac{1-\cos|\theta|}{|\theta|^2}\theta\times\mathrm{I}+\frac{|\theta|-\sin|\theta|}{|\theta|^3}(\theta\times\mathrm{I})^2\right]\cdot\mathrm{d}\theta,$$
$$\mathrm{d}\theta = \left[\mathrm{I}-\frac{1}{2}\theta\times\mathrm{I}+\frac{1-g}{|\theta|^2}(\theta\times\mathrm{I})^2\right]\mathrm{d}\varphi,$$
$$\mathrm{Z}(\theta) = \mathrm{I}-\frac{1}{2}\theta\times\mathrm{I}+\frac{1-g}{|\theta|^2}(\theta\times\mathrm{I})^2,$$

Получим

$$\mathbf{Z^{-1}}(\boldsymbol{\theta}) = \mathrm{I}+\frac{1-\cos|\theta|}{|\theta|^2}\theta\times\mathrm{I}+\frac{|\theta|-\sin|\theta|}{|\theta|^3}(\theta\times\mathrm{I})^2 = \mathrm{I}+\frac{1-\cos|\theta|}{|\theta|^2}\mathrm{I}\times\theta+$$
$$+\frac{|\theta|-\sin|\theta|}{|\theta|^3}(\mathrm{I}\times\theta)^2. \quad (22)$$

В имеющихся опытах на чистое кручение [2]

$$\mathbf{u}=0, \boldsymbol{\theta}=\Theta\mathbf{e}_\mathrm{z}, \mathbf{P}''=0, \mathbf{M_C}''=M_{\text{кр}}(\Theta)\mathbf{e}_\mathrm{z}. \quad (23)$$

Подставляя (23) в (21), со ссылкой на (22) получаем

$$\Theta(C_{xz}\mathbf{e}_\mathrm{x}+C_{yz}\mathbf{e}_\mathrm{y}+C_{zz}\mathbf{e}_\mathrm{z})=0, \Theta(\Omega_{xz}\mathbf{e}_\mathrm{x}+\Omega_{yz}\mathbf{e}_\mathrm{y}+\Omega_{zz}\mathbf{e}_\mathrm{z}) =$$
$$= M_{\text{кр}}(\Theta)\mathbf{e}_\mathrm{z}, \quad (24)$$

так как при $\Theta \geq 0$

$$\mathbf{M_C}''\cdot\mathbf{Z^{-1}} = \mathrm{M}_{\text{кр}}(\Theta)\left[\mathbf{e}_\mathrm{z}+\frac{1-\cos\Theta}{\Theta}\mathbf{e}_\mathrm{z}\times\mathbf{e}_\mathrm{z}+\frac{\Theta-\sin\Theta}{\Theta}(\mathbf{e}_\mathrm{z}\times\mathbf{e}_\mathrm{z})\times\right.$$
$$\left.\times\,\mathbf{e}_\mathrm{z}\right] = M_{\text{кр}}(\Theta)\mathbf{e}_\mathrm{z}. \quad (25)$$

Из (24) следует, что

$$C_{xz}=C_{yz}=C_{zz}=0, \Omega_{xz}=\Omega_{zx}=0,$$
$$\Omega_{yz}=\Omega_{zy}=0, \Omega_{zz}=\frac{M_{\text{кр}}(\Theta)}{\Theta}. \quad (26)$$

В опытах на изгиб [2]

$$\mathbf{u}=0, \boldsymbol{\theta}=\gamma\mathbf{e}_\mathrm{x}, \mathbf{P}''=0, \mathbf{M_C}''=M_{\text{изг}}(\gamma)\mathbf{e}_\mathrm{x}. \quad (27)$$

На основании (27), (21), (22) имеем

$$\gamma(C_{xx}\mathbf{e}_\mathrm{x}+C_{yx}\mathbf{e}_\mathrm{y}+C_{zx}\mathbf{e}_\mathrm{z})=0,$$

$$\gamma\left(\Omega_{xx}\mathbf{e}_{\mathrm{x}}+\Omega_{yx}\mathbf{e}_{\mathrm{y}}+\Omega_{zx}\mathbf{e}_{\mathrm{z}}\right)=M_{\text{изг}}(\gamma)\mathbf{e}_{\mathrm{x}}, \tag{28}$$

так как при $\gamma \geq 0$

$$\mathbf{M_C}'' \cdot \mathbf{Z^{-1}} = \mathrm{M}_{\text{изг}}(\gamma)\left[\mathbf{e}_{\mathrm{x}}+\frac{1-\cos\gamma}{\gamma}\mathbf{e}_{\mathrm{x}}\times\mathbf{e}_{\mathrm{x}}+\frac{\gamma-\sin\gamma}{\gamma}(\mathbf{e}_{\mathrm{x}}\times\mathbf{e}_{\mathrm{x}})\times\right.$$

$$\left.\times\,\mathbf{e}_{\mathrm{x}}\right]=M_{\text{изг}}(\gamma)\mathbf{e}_{\mathrm{x}}. \tag{29}$$

Из (28) вытекает, что

$$C_{xx}=C_{yx}=C_{zx}=0,\ \Omega_{xy}=\Omega_{yx}=0,\ \Omega_{xz}=\Omega_{zx}=0,$$

$$\Omega_{xx}=\frac{M_{\text{изг}}(\gamma)}{\gamma}. \tag{30}$$

Благодаря осевой симметрии упругого элемента муфты допустима другая интерпретация условий проведения опытов на изгиб, а именно:

$$\mathbf{u}=0,\ \boldsymbol{\theta}=\gamma\mathbf{e}_{\mathrm{y}},\ \mathbf{P}''=0,\ \mathbf{M_C}''=M_{\text{изг}}(\gamma)\mathbf{e}_{\mathrm{y}}. \tag{31}$$

Условия (31) получаются из условий (27) заменой индекса x индексом y. Поэтому уравнения (28) аналогичным образом преобразуются в уравнения

$$\gamma\left(C_{xy}\mathbf{e}_{\mathrm{x}}+C_{yy}\mathbf{e}_{\mathrm{y}}+C_{zy}\mathbf{e}_{\mathrm{z}}\right)=0,\ \gamma\left(\Omega_{xy}\mathbf{e}_{\mathrm{x}}+\Omega_{yy}\mathbf{e}_{\mathrm{y}}+\Omega_{zy}\mathbf{e}_{\mathrm{z}}\right)=$$

$$=M_{\text{изг}}(\gamma)\mathbf{e}_{\mathrm{y}}, \tag{32}$$

вследствие чего имеем

$$C_{xy}=C_{yy}=C_{zy}=0,\ \Omega_{xy}=\Omega_{yx}=0,$$

$$\Omega_{yz}=\Omega_{zy}=0,\ \Omega_{yy}=\frac{M_{\text{изг}}(\gamma)}{\gamma}. \tag{33}$$

Полученные результаты (26), (30), (33) полностью определяют все компоненты ротационного и смешанного тензоров:

$$\begin{bmatrix}\Omega_{xx} & \Omega_{xy} & \Omega_{xz}\\ \Omega_{xy} & \Omega_{yy} & \Omega_{yz}\\ \Omega_{xz} & \Omega_{yz} & \Omega_{zz}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{M_{\text{изг}}(\gamma)}{\gamma} & 0 & 0\\ 0 & \frac{M_{\text{изг}}(\gamma)}{\gamma} & 0\\ 0 & 0 & \frac{M_{\text{кр}}(\Theta)}{\Theta}\end{bmatrix}, \tag{34}$$

$$\begin{bmatrix}C_{xx} & C_{xy} & C_{xz}\\ C_{yx} & C_{yy} & C_{yz}\\ C_{zx} & C_{zy} & C_{zz}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}. \tag{35}$$

Равенство $\Omega_{xx}=\Omega_{yy}$ для осесимметричного тела является вполне ожидаемым.

Опыты на радиальное смещение [2]

В силу осевой симметрии упругого элемента опыты на радиальное смещение можно интерпретировать двояко, либо в виде условий

$$\mathbf{u} = \Delta\mathbf{e}_{\mathrm{x}},\ \boldsymbol{\theta} = 0,\ \mathbf{P}'' = P_{\text{рад}}(\Delta)\mathbf{e}_{\mathrm{x}},\ \mathbf{M_C}'' = 0, \tag{36}$$

либо в виде условий

$$\mathbf{u} = \Delta\mathbf{e}_{y},\ \boldsymbol{\theta} = 0,\ \mathbf{P}'' = P_{\text{рад}}(\Delta)\mathbf{e}_{\mathrm{y}},\ \mathbf{M_C}'' = 0. \tag{37}$$

В случае (36) на основании первого уравнения (21) получаем

$$\Delta\left(K_{xy}\mathbf{e}_{\mathrm{x}} + K_{yy}\mathbf{e}_{\mathrm{y}} + K_{zy}\mathbf{e}_{\mathrm{z}}\right) = P_{\text{рад}}(\Delta)\mathbf{e}_{\mathrm{x}}.$$

Откуда следует, что

$$K_{xy} = K_{yx} = 0,\ K_{xz} = K_{zx} = 0,\ K_{xx} = \frac{P_{\text{рад}}(\Delta)}{\Delta}. \tag{38}$$

Аналогичным образом на основании (37), (21) находим

$$\Delta\left(K_{xy}\mathbf{e}_{\mathrm{x}} + K_{yy}\mathbf{e}_{\mathrm{y}} + K_{zy}\mathbf{e}_{\mathrm{z}}\right) = P_{\text{рад}}(\Delta)\mathbf{e}_{\mathrm{y}}.$$

Значит,

$$K_{xy} = K_{yx} = 0,\ K_{yz} = K_{zy} = 0,\ K_{yy} = \frac{P_{\text{рад}}(\Delta)}{\Delta}. \tag{39}$$

Как и ожидалось, формулы (38), (39) приводят к равенству $K_{xx} = K_{yy}$.

Опыты на осевое смещение без кручения [2]

В опытах на осевое смещение без кручения

$$\mathbf{u} = s\mathbf{e}_{\mathrm{z}},\ \boldsymbol{\theta} = 0,\ \mathbf{P}'' = P_{\text{ос}}(s)\mathbf{e}_{\mathrm{z}},\ \mathbf{M_C}'' = 0. \tag{40}$$

Подставляя (40) в первое уравнение (21), получаем

$$s\left(K_{xz}\mathbf{e}_{\mathrm{x}} + K_{yz}\mathbf{e}_{\mathrm{y}} + K_{zy}\mathbf{e}_{\mathrm{z}}\right) = P_{\text{ос}}(s)(\Delta)\mathbf{e}_{\mathrm{z}}. \tag{41}$$

Отсюда находим

$$K_{xz} = K_{zx} = 0,\ K_{yz} = K_{zy} = 0,\ K_{zz} = \frac{P_{\text{ос}}(s)}{s}. \tag{42}$$

Таким образом, по данным (38), (39), (42) компоненты трансляционного тензора определяются полностью:

$$\begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{xy} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{xz} & K_{yz} & K_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{P_{\text{рад}}(\Delta)}{\Delta} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{P_{\text{рад}}(\Delta)}{\Delta} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{P_{\text{ос}}(s)}{s} \end{bmatrix}. \tag{43}$$

Опыты на осевое смещение при постоянном крутящем моменте [2]

Поскольку компоненты тензоров **K, Ω, C,** определены, опыты на осевое смещение при постоянном крутящем моменте служат для проверки адекватности построенной математической модели. В данных опытах

$$\mathbf{u} = s\mathbf{e}_{\mathrm{z}},\ \boldsymbol{\theta} = \widetilde{\Theta}(s)\mathbf{e}_{\mathrm{z}},\ \mathbf{P}'' = \tilde{P}_{\text{ос}}(s)\mathbf{e}_{\mathrm{z}},\ \mathbf{M_C}'' = \widetilde{M}_{\text{кр}}\mathbf{e}_{\mathrm{z}}. \tag{44}$$

Подставляя (44) в (21) и учитывая (22), (35), (43) получаем

$$K_{zz}(s) = \tilde{P}_{\text{ос}}(s),\ \Omega_{zz}\widetilde{\Theta}(s) = \widetilde{M}_{\text{кр}}. \qquad (45)$$

Оба уравнения (45) противоречат имеющимся опытным данным [2]. По первому уравнению (45) с учетом (43) силовая характеристика при осевом смещении полумуфты не должна зависеть от величины приложенного крутящего момента, в частности, должно быть $P_{\text{ос}}(s) = \tilde{P}_{\text{ос}}(s)$. По второму уравнению (45) под действием постоянного крутящего момента $\widetilde{M}_{\text{кр}}$ угол закрутки $\widetilde{\Theta}(s)$ должен оставаться постоянным, несмотря на действие осевой силы. Причиной такого несоответствия данных опыта и предсказаний математической модели, построенной на основе квадратичного приближения по свободной энергии, является равенство нулю сопряжённого тензора (35). Для устранения отмеченных несоответствий требуется приближение более высокого порядка.

Литература

1. Демидов, С.П. Теория упругости / С.П. Демидов. – М.: Высш. шк., 1979. – 432 с.

2. Протокол № 14-91-84 рассмотрения результатов стендовых статических испытаний упругих элементов, изготовленных НПО «Прогресс» в мае-июне 1991 г. с использованием технологии шинного производства [Текст] / Всесоюзный научно-исследовательский тепловозный институт (ВНИТИ»). – Коломна, 1991. – 8 с.

3. Романюк, Д.А. Общий термодинамический анализ процессов деформирования упругого элемента плоской муфты / Д.А. Романюк, С.А. Корнеев, В.С. Корнеев // Физико-математическое моделирование систем: материалы XVII Междунар. семинара. – Воронеж: ВГТУ, – 2016. Ч. 1. С. 67-74.

THERMODYNAMIC DESCRIPTION OF THERMOMECHANICAL PROPERTIES OF THE ELASTIC ELEMENT IN QUADRATIC-DIMENSIONAL APPROXIMATION FOR THE FREE ENERGY

D.A. Romanyuk, S.A. Korneyev, V.S. Korneev

Omsk State Technical University

The paper proposed a General approach calculation of the flat, viscoelastic-Noah clutch for complex shaft displacement in space with respect to the kinematics, the power of influence and energy dissipation using the basic laws of mechanics and thermodynamics. Recommendations for further use of the results are given

Keywords: elastic coupling tensor, the main vector, the main point, dissipation, thermodynamics

УДК 004.942

ПЕТРОФИЗИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В НЕФТЕГАЗОПРОМЫСЛОВОЙ ГЕОЛОГИИ

П.В. Кожевникова

Ухтинский государственный технический университет
aira_dark@list.ru

Особенностями реальных геолого-геофизических данных, являющихся основой для формирования математических моделей геологических объектов, являются фрагментарность, неоднородность и неопределенность. Данная неопределенность наследуется в конечных построениях. Традиционно для построения петрофизических моделей применяются методы статистической обработки информации, не учитывающие неопределенности в данных

Ключевые слова: физико-геологические параметры, свойства коллекторов, петрофизическое моделирование

Под петрофизическим моделированием подразумевается моделирование связей между физико-геологическими параметрами нефтегазоностных коллекторов.

Коллектор – пласт, имеющий пустоты, который может содержать флюиды (газ, нефть, воду). Коллектора нефти и газа подразделяются в основном на три типа: терригенные, карбонатные и смешанные. К терригенным коллекторам относятся породы, состоящие из зерен минералов. Литологически, данный тип коллектора характеризуется размером зерен. Размер алевролитов составляет от 0,05 до 0,1 мм, мелкозернистых песков – от 0,1 до 0,25 мм, крупнозернистых песков – от 0,25 до 1 мм. Примерами терригенных коллекторов являются осадочные породы: пески, песчаники, глины. Около 60% месторождений нефти в мире, и 80% всех месторождений углеводородов России, относятся к терригенному типу (практически все коллектора нефти и газа Западно-Сибирского бассейна).

В коллекторах карбонатного типа породы образуются за счет двух основных минерала – кальцита и доломита. Поровое пространство образуется за счет трещин, каверн. Основными процессами, формирующими пустотное пространство в карбонатах, являются биогенные накопления с выщелачиванием и карстообразованием или

с тектоническими напряжениями, которые привели к образованию сети каверн, трещин, микротрещин и т.д. К коллекторам карбонатного типа относится около 69% месторождений нефти в мире (Волго-Уральская область и Тимано-Печорская провинция, Прикаспийская впадина).

На практике достаточно часто встречаются смешанные коллектора – трещиноватые породы, поровое пространство которых включает как систему трещин, так и поровое пространство блоков, а также каверны и карст.

На рис. 1 представлены примеры пород терригенного типа: пески, песчаники, глины (а, б, в); и карбонатного типа: трещинные (в, г) и трещинно-кавернозные (д) [1].

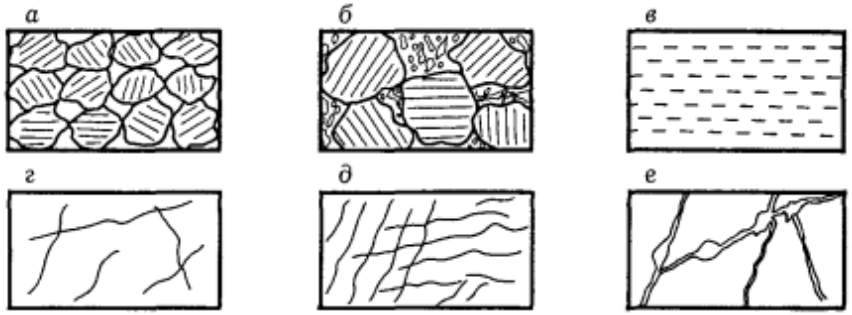


Рис. 1. Примеры пористости в обломочных и глинистых породах: а – хорошо отсортированный высокопористый песчаник, б – плохо отсортированный песчаник с пониженной пористостью, в – глины, г – трещиноватая порода ($k_т \approx 0.15\%$), д – трещиноватая порода ($k_т \approx 0.3\%$), е – трещинно-кавернозная порода ($k_т + k_{кав} \approx 5\%$)

Свойствами коллектора вмещать (пористость) и пропускать (проницаемость) жидкость и газ являются фильтрационно-емкостные. К фильтрационно-емкостным свойствам коллектора относятся:

– пористость;

– проницаемость;

– насыщенность породы водой.

Пористость – свойство горных пород, отображающее объем пустот, способных вмещать в себя газ и жидкости.

Рассмотрим изменение значения пористости с глубиной для разных типов коллектора. На рис. 2 и 3 представлены отношения

«коэффициент открытой пористости – глубина» для терригенных и карбонатных типов коллекторов соответственно.

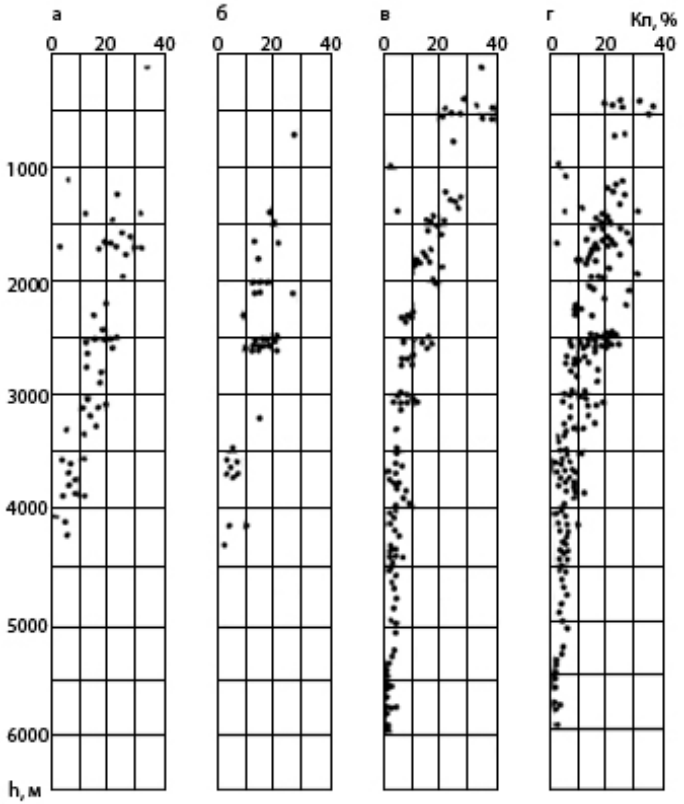


Рис. 2. Изменение открытой пористости песчано-глинистых пород с глубиной (скв СГ-1 Аралсорская): а – песчаники, б – алевролиты, в – аргиллиты и глинисто-алевритовые породы, г – сводная зависимость

На рис. 2 отображена динамика изменения коэффициента открытой пористости с глубиной песчано-глинистых пород по данным кернового материала Аларсоркой скважины, расположенной в Прикаспийской низменности. Значение открытой пористости с глубиной уменьшается, что можно объяснить возрастающим давлением при погружении осадочных пород [1].

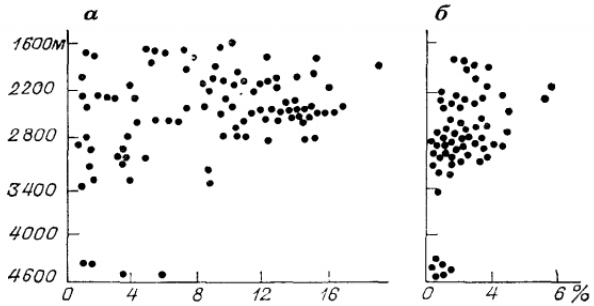


Рис. 3. Изменение открытой пористости известняков с глубиной залегания: а – для «скелетных», б – для «бесскелетных» известняков

На рис. 3 изображено изменение значения коэффициента открытой пористости известняков с увеличением глубины Оренбургского свода на примере «скелетных» и «бесскелетных» известняков. «Скелетные» известняки отличаются преобладанием форменных компонентов над цементирующим материалом, а «бесскелетные» – базальной перекристаллизованной карбонатной массой. В первом случае изменение пористости с глубиной не существенно, так как твердые частицы, соприкасаясь, создают устойчивый каркас, неподдающийся уплотнению. В осадках второй группы жесткий скелет отсутствует, из-за чего происходит уплотнение, поэтому значение пористости с глубиной уменьшается. На глубине 4,5 км в данных видах известняка отмечаются лишь единичные поры [2, 3].

Как мы видим, зависимость пористости от глубины, вне зависимости от типа коллектора, имеет размытый, неоднородный характер, чаще всего связанный с внутренней неоднородностью среды, что ведет к ряду существенных проблем.

Традиционно, для построения петрофизических моделей, применяются методы статистической обработки информации, и выполняется замена экспериментального материала рассчитанными законами и определенной интегральной оценкой меры тесноты зависимости. Далее, полученный закон в форме уравнений зависимости между параметрами переносится на исследуемый объект. При этом важно знать: какова неопределенность конечного прогноза, включающая всю цепочку участвующих в прогнозе преобразований. Данная информация является необходимой для снижения технико-

экономических рисков, связанных с формированием проекта разработки месторождения. Необходимо пересчитывать неопределенности в данных и зависимостях в итоговую неопределенность прогнозных параметров. Статистические методы построения петрофизических моделей не дают такой возможности, поэтому данный путь нередко считается основой ошибочных геологических заключений о ресурсах и запасах углеводородного сырья регионов [4].

В связи с этим, выявляется направление, связанное с использованием принципов нечеткого моделирования, которые основаны на представлении данных и зависимостей в форме нечетких величин и нечетких отношений.

Литература

1. Добрынин В. М., Вендельштейн Б. Ю., Кожевников Д. А. Петрофизика (физика горных пород): Учебник для вузов. 2-е изд./Под ред. Д. А. Кожевникова.– М.: Изд. «Нефть и газ» РГУ нефти и газа им. И. М. Губкина.– 2004.– 368 с.

2. Киркинская В. Н. и Смехов Е. М. Карбонатные породы-коллекторы нефти и газа.– Л:Недра.– 1981.– 255 с.

3. Безбородова И. В. Изменение пористости известняков с увеличением глубины из залегания.– Тр.:МИНХиГП.– 1997, вып. 127.– С. 90-94.

4. Кобрунов А. И., Дорогобед А. Н., Кожевникова П. В. Метод нечеткого логического вывода и информационная обеспеченность результатов моделирования в нефтегазовой геологии // Геоинформатика. – 2016. – №2. – С. 35–40

PETROPHYSICAL MODELING

P.V. Kozhevnikova

Ukhta State Technical University

Features of real geological and geophysical data, which form the basis for the formation of mathematical models of geological objects, are fragmentarity, heterogeneity and uncertainty. This uncertainty is inherited in finite constructions. Traditionally, for the construction of petrophysical models, the methods of statistical processing of information are applied, not taking into account the uncertainties in the data

Keywords: physico-geological parameters, reservoir properties, petrophysical modeling

УДК 544.421.032.76

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ИЗОМЕРОВ k,k-ДИФТОРОКТАНОВ

А.В. Котомкин[1], Н.П. Русакова[1], В.В. Туровцев[1,2], Ю.Д. Орлов[1]

[1]Тверской государственный университет
[2]Тверской государственный медицинский университет
prospectpobedy@mail.ru

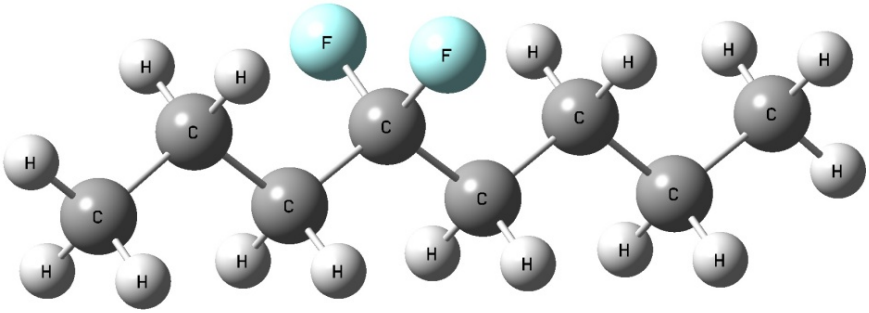
В рамках «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) изучено электронное строение структурных изомеров k,k-дифтороктана (k,k-$F_2C_8H_{16}$, где $1 \le k \le 8$, k – положение фторов в углеводородной цепи), составлен ряд электроотрицательностей функциональных групп

Ключевые слова: индуктивный эффект, квантовая теория атомов в молекуле, электроотрицательность, электронная плотность, дифторалканы

Эффективность моделей прогнозирования свойств индивидуальных соединений зависит от степени учета в них специфических внутримолекулярных взаимодействий. Одним из таких взаимодействий является индуктивный эффект, который подразумевает способность атома (группы атомов) влиять на распределение электронной плотности (ρ(r)) внутри молекулы.

Ранее нами [1] были исследованы электронные параметры молекул 1,1-дифторалканов 1,1-FC_nH_{2n} где $1 \le n \le 8$, и установлено индуктивное влияние атома фтор на четыре идущих подряд CH_2 группы. Целью данной работы является исследование индуктивного влияния фторов в соединениях *k,k*-дифтороктана (*k,k*-$F_2C_8H_{16}$), где *k* - это положение атомов фтора на углеводородной цепи, $1 \le k \le 8$.

Равновесная геометрия и ρ(r) исследованных молекул были получены с помощью программы GAUSSIAN 03 методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd) [2]. Заряды *q,* энергии *E* и объемы *V* «топологических» атомов были вычислены в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» QTAIM [3] с использованием программы AIMALL [4] и суммированы в параметры функциональных групп $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$. Погрешность расчёта парциальных зарядов составила не более 0,001 а.е. (1 а.е. заряда = 1,6 10^{-19} Кл), энергий – не более 10 кДж/моль, объемов – до 0,1 Å^3.



Молекула 4,4-дифтороктана 4,4-$F_2C_8H_{16}$

Сравнение $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ для всех изученных соединений показало, что дальность индуктивного влияния атомов F внутри углеводородного скелета составляет две группы CH_2 в каждую сторону от фторсодержащего фрагмента (-CF_2-). Сравнения $q(R)$ позволило получить шкалу электроотрицательностей в виде:

$$\chi(CH_2) < \chi(CH_3) < \chi(CHF_2) < \chi(CF_2).$$

В результате сопоставления $q(R)$, $E(R)$ и $V(R)$ в рассмотренных гомологах выделены электронные параметры переносимых или «стандартных» групп.

Параметры переносимых или «стандартных» групп

Параметры	CH_3	CH_2	CF_2
q, а.е.	-0,013	0,001	-0,259
- E, кДж/моль	104730	103150	625440
V, Å ^{3}	33,1	23,5	35,7

Статья выполнена в рамках выполнения научно исследовательской работы «Разработка программного комплекса для расчета термодинамических свойств органических соединений» по договору с Фондом содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере №9498ГУ/2015 от 28.12.2015.

Работа выполнена в рамках проекта № 4.6469.2017/Б4 гос. задания Минобрнауки РФ

Литература

1. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Вестник Казанского технологического университета. 2015. Т 18 № 13. С 23-25.

2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. at all. Gaussian 03 (Revision E 0.1 SMP). Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2007.

3. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. М.: Мир, 2001. 532 с.

4. AIMAll (Version 11.09.18, Professional), Todd A. Keith, 2010 (http://aim.tkgristmill.com).

A QUANTUM CHEMICAL STUDY OF THE STRUCTURAL ISOMERS OF k,k-DIFLUOROALKANES

A.V. Kotomkin, N.P. Rusakova, V.V. Turovtsev, Yu.D. Orlov

Tver State University

Within the «quantum theory of atoms in molecules» (QTAIM) the electron structure of some difluorineoctane isomers (k,k-$F_2C_8H_{16}$) was studied. Series of the group electronegativities has been made up

Keywords: inductive effect, electronegativity, quantum theory of atoms in molecules, electron density, fluorine alkanes

УДК 004.942

МЕТОД ПАССИВНОЙ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОЙ ТОМОГРАФИИ ПРОНИЦАЕМОГО ПЛАСТА

В.Е. Кунцев

Ухтинский государственный технический университет
vitaly.91@yandex.ru

В статье представлен метод пассивной гидродинамической томографии для реконструкции пространственного распределения фильтрационного сопротивления проницаемого пласта нефтяного месторождения. С помощью математической модели оценки связности скважин по истории эксплуатации месторождения синтезируются исходные томографические данные в виде временных интервалов, которые в дальнейшем используются в гидродинамической томографии

Ключевые слова: пассивная гидродинамическая томография, математическая модель, скважины, минимизация, итерационный процесс, параметр релаксации

Введение

Гидродинамическая томография позволяет проводить прогноз пространственного распределения фильтрационного сопротивления проницаемого пласта нефтяного месторождения на основании принципов томографических измерений, используя данные гидродинамического прослушивания и анализ динамики движения реперной точки кривой восстановления давления. Задача поиска пространственного распределения фильтрационного сопротивления движению флюида в проницаемом пласте как томографическая задача обработки измерений наступления реакции в рассматриваемых скважинах при изменении режима работы в возмущающих скважинах была сформулирована в работах [1], [2].

Использование метода гидродинамической томографии позволяет получать детальную пространственную информацию о распределении фильтрационного сопротивления в межскважинном пространстве проницаемого пласта. Однако проведение полного эксперимента на месторождении, обеспечивающего необходимые томографические данные в виде интервальных времен движения реперной точки между парой скважин технологически сложный и долго-

временных процесс. Предлагается воссоздать эти данные по результатам анализа динамики разработки месторождения на интервалах времен, после которых стало проявляться понижение фильтрационного сопротивления. Для этого необходимо разработать модель динамики месторождения, отражающей изменение фильтрационного сопротивления, с помощью которой планируется синтезировать данные для метода гидродинамической томографии.

Математическая модель

Главным принципом гидродинамической томографии служит изучение пространственного распределения фильтрационного сопротивления, которое может быть выражено через коэффициент пьезопроводности $k^j(\xi)$ в области S проницаемого пласта нефтяного месторождения. Основным уравнением для расчета коэффициента пьезопроводности служит уравнение поля времен для движения вдоль траекторий L между парой скважин точки перегиба («сигнала») кривой восстановления давления:

$$\tau_{ij} = \int_{L_{ij}} \frac{l(\xi)}{3k(\xi)} d\xi. \quad (1)$$

В уравнении (1) $\tau_{i,j}$ - интервальное время распространения «сигнала» между парой скважин с номерами $\{i, j\}, i \neq j$. $L_{i,j}$ пространственная траектория движения «сигнала» депрессии. Итерационное обращение уравнения, исходя из заданного нулевого приближения $k^0(\xi)$, сопровождающееся уточнением траекторий $L_{i,j}^n$, и построение сходящейся последовательности $k^n(\xi), n \to \infty$ пространственного распределения коэффициента пьезопроводности составляет вычислительную схему алгоритма алгебраической томографии для решения задачи реконструкции коэффициента пьезопроводности.

Построение математической модели эксплуатации нефтегазового месторождения реализуется с применением технологии емкостного моделирования [3]. Емкостная модель (CM – Capacitance Model) характеризует свойства проницаемого пласта на основании данных из истории нормальной эксплуатации скважин нефтяного месторождения: скорости добычи и закачки жидкости. Далее описывается один из способов построения математической модели гидродинамической связи эксплуатируемого месторождения для получения необходимых первоначальных данных для метода гидродинамической томографии.

Реализованные построения позволяют моделировать закачку жидкости по нагнетательным скважинам и синтезировать интервальные времена распространения «сигнала» депрессии до соседних скважин. Для моделирования используется многоскважинная система, в которой дебит *i*-й скважины на рассматриваемом временном интервале рассчитывается на основе принципа суперпозиции нескольких отдельных физических факторов [4], [5]:

$$Q_i(t) = Q_{i,1}(t) + Q_{i,2}(t) + Q_{i,3}(t). \quad (2)$$

Первый фактор $Q_{i,1}(t)$ описывает динамику первичного дебита *i*-й добывающей скважины, не подверженной влиянию других скважин, и аппроксимируется с помощью линейного эволюционного уравнения:

$$Q_{i,1}(t) = e^{-t\lambda_i} Q_{i,1}(t_0), \quad (3)$$

где t_0 – исходное время работы скважины, λ_i – коэффициент затухания, который определяет скорость экспоненциального падения дебита на *i*-й скважине.

Следующий компонент $Q_{i,2}(t)$ определяет влияние соседних нагнетательных скважин на *i*-ю добывающую скважину и является линейной комбинацией влияний всех нагнетательных скважин:

$$Q_{i,2}(t) = \sum_{j=1}^{N_{int}} \Psi_j\left(t - \sigma_{ij}\right). \quad (4)$$

Влияние нагнетательных скважин имеет своей причиной изменение распределения внутрипластового давления, под воздействием проводимого заводнения месторождения, из-за чего изменяется сама динамика движения флюидов в системе. Влияние отдельно взятой *j*-й нагнетательной скважины определяется по формуле:

$$\Psi_j\left(t, \sigma_{ij}\right) = \beta_{ij} \mathrm{I}_j\left(t - \sigma_{ij}\right) \mathrm{E}_{int}, \quad (5)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{R_{ij}}{V_{ij}}. \quad (6)$$

Коэффициент задержки сигнала σ_{ij} (6) зависит от расстояния между рассматриваемой парой скважин – R_{ij} и скорости движения флюида от *j*-й скважины к скважине *i*. Коэффициент β_{ij} есть доля интерференции воздействия *j*-й скважины на *i*-ю.

Третий фактор $Q_{i,3}(t)$ отвечает за воздействие отбора флюида в соседних добывающих скважинах и тоже является линейной комбинацией по скважинам-соседям:

$$Q_{i,3}(t) = \sum_{j=1(j\neq i)}^{N_{out}} \Phi_j\left(t - \sigma_{ij}\right), \quad (7)$$

величина Φ_j представляет влияние j-й добывающей скважины на дебит скважины i, которое определяется с помощью выражения:

$$\Phi_j(t, \sigma_{ij}) = \gamma_{ij} \Delta G_{ij}(t - \sigma_{ij}) \mathrm{E}_{out}, \quad (8)$$

$$\Delta G_{ij} = G_i(t - \sigma_{ij}) - G_j(t - \sigma_{ij}). \quad (9)$$

Здесь ΔG_{ij} – разница между скоростями добычи флюида в скважинах i и j (9), γ_{ij} – имеет смысл коэффициента влияния работы j-й скважины на дебит скважины i. Затухание движения флюида.

Представим уравнение (2) в символьной форме:

$$Q_i(t) = A[X(W, G), \alpha_{int}, \alpha_{out}, \lambda, \beta, \gamma, V]. \quad (10)$$

Формирование математической модели работы месторождения основано на реконструкции по истории эксплуатации с помощью параметров: α_{int}, α_{out}, $\lambda = \{\lambda_i\}$, $\gamma = \{\gamma_{ij}\}$, $\beta = \{\beta_{ij}\}$ и $V = \{V_{ij}\}$.

Модельные параметры подбираются для каждой многоскважинной системы таким образом, чтобы известная история динамики закачки, отбора жидкости при подстановке в итоговую формулу давала такую же историю добычи, какая наблюдалась в реальности на требуемом интервале времен. Следовательно, для поиска оптимальных модельных параметров должна быть решена задача:

$$\begin{cases} A[\bar{X}(t_n, k), \bar{\xi}^k] = \bar{Q}(t_n, k), \\ ||Q(t_n) - \bar{Q}(t_n, k)||_{R^N} \to min. \end{cases} \quad (11)$$

Оптимизация модели состоит в подборе вектора параметров среды $\bar{\xi}^k$ при построении оператора А по выборкам k из всех либо части элементов из временного ряда данных истории эксплуатации. Здесь $\bar{Q}_i$ – дебит скважины i из истории, Q_i – модельный дебит скважины.

Оптимизация модели (11) проводится на основе итерационного процесса линеаризации [6], который заключается в получении на каждой итерации нового вектора параметров с помощью расчета производной Фреше и сопряженного к нему оператора A'^* и параметра релаксации α^n.

$$\xi^{n+1} = \xi^n + \alpha^n A'^*[X, \xi^n]\varphi^n. \quad (12)$$

$$\alpha^n = \frac{\|A'^*[X, \xi^n]\varphi^n\|^2}{\|A'[X, \xi^n]A'^*[X, \xi^n]\varphi^n\|^2}. \quad (13)$$

Параметр релаксации (13) обеспечивает максимальную скорость сходимости при оптимизации модели (10) с учетом (11).

$$A'^{*}[X,\xi^n] = \begin{pmatrix} \frac{\delta A^1[X,\xi^n]}{\delta \xi_1^n} & \cdots & \frac{\delta A^M[X,\xi^n]}{\delta \xi_1^n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\delta A^1[X,\xi^n]}{\delta \xi_K^n} & \cdots & \frac{\delta A^M[X,\xi^n]}{\delta \xi_K^n} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Оператор (17) представляет собой матрицу частных производных модели по параметрам, где количество столбцов определяется количеством элементов в потоке входных данных X, а количество строк равно количеству параметров в векторе ξ^n. Процесс заканчивается, когда разница между реальным и модельным дебитами φ^n принимает удовлетворительно малое значение, либо не удалось получить новый вектор ξ^n.

Результаты

В качестве тестового примера для проверки адекватности поведения построенной модели были сгенерированы данные по эксплуатации тестового месторождения (рис. 1), состоящего из 9 скважин: 4 добывающие скважины (№ 1, 2, 3, 4) и 5 нагнетательных скважин (№ 5, 6, 7, 8, 9).

По результатам решения оптимизационной задачи (11) для месторождения модельные дебиты приблизились к дебитам из истории

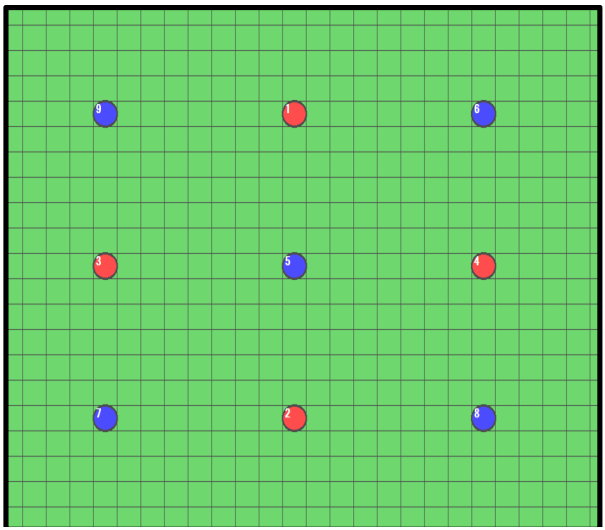
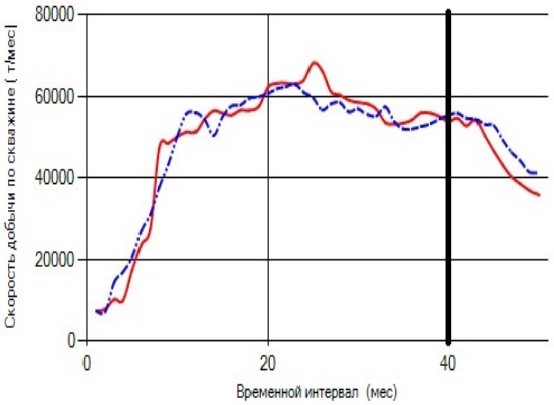
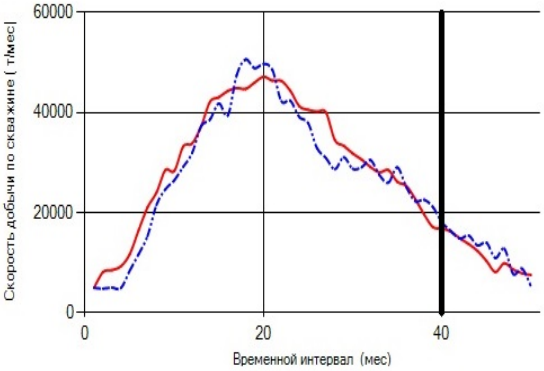


Рис. 1. Сетка скважин тестового месторождения

разработки с относительной погрешностью 9,45%. Временной ряд истории разработки тестового месторождения составил 50 месяцев, из которых 40 было выделено на настройку модели, следовательно, период прогноза дебитов составил 10 оставшихся месяцев. На основе найденных параметров был сделан прогноз динамики добычи по скважинам на выбранный временной интервал. На графиках представлены результаты прогноза по двум добывающим скважинам (рис. 2).



а)



б)

Рис. 2. Сравнение модельного (пунктирная линия) дебита и дебита из истории разработки тестового месторождения: а) скважина № 1; б) скважина № 2

Полученные результаты прогноза показывают, что построенная модель ведет себя адекватно относительно заданной истории эксплуатации и ее можно в дальнейшем использовать для томографических экспериментов путем моделирования депрессии в нагнетательных скважинах и регистрации времени отклика на это изменение режима работы в добывающих скважинах. На представленном графике (Рисунок 3) показаны результаты измерения временных интервалов движения сигнала между одной из нагнетательных скважин (№5) и добывающими скважинами.

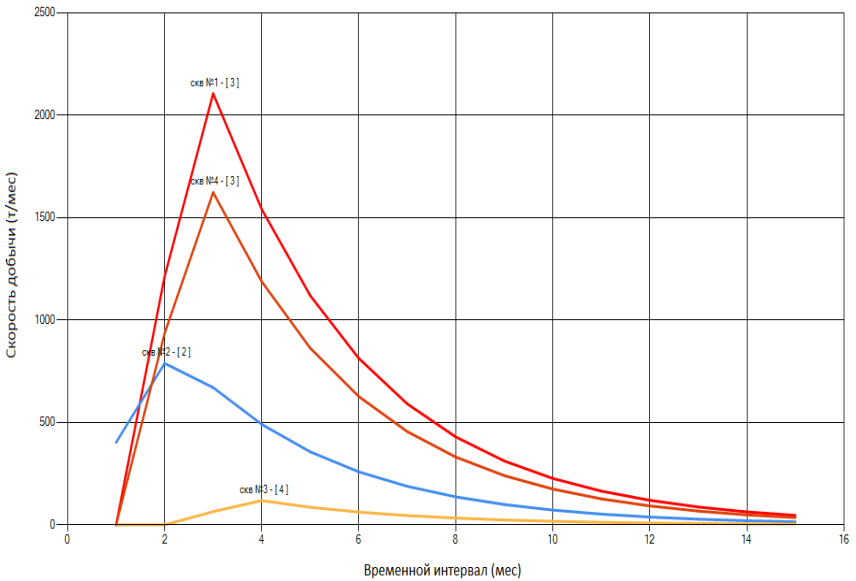


Рис. 3. Время прохождения сигнала между нагнетательной скважиной и добывающими скважинами

Заключение

Предложенный алгоритм расчета синтетических временных интервалов движения экстремальной точки между всеми парами скважин адекватен модели динамики эксплуатации залежи и обеспечивает получение входных данных для технологии гидродинамической томографии [1], [2]. Эти данные могут быть использованы для прогнозирования пространственного распределения в пределах гид-

родинамически связанных компонент залежи усредненного по времени моделирования эффективного фильтрационного сопротивления для продуктивного пласта нефтяного месторождения.

Литература

1. Кобрунов А. И. Математическая модель томографии на давлениях при контроле за разработкой нефтяных месторождений // Известия Коми научного центра Уро РАН. – 2012. - Выпуск 4-12. - С. 82-86.

2. Кобрунов А. И. Теоретические основы гидродинамической томографии // Геофизический журнал. – 2015. - Выпуск 2. - С. 27–34.

3. Краснов В. А., Иванов В. А., Хасанов М. М. Помехоустойчивый метод оценки связности пласта по данным эксплуатации месторождений // Российская техническая нефтегазовая конференция и выставка SPE по разведке и добыче (Москва, 16–18 октября 2012 года). – SPE. -162053.

4. Кобрунов А.И., Куделин С.Г., Мухаметдинов С.В., Художилова А.Н. Метод изучения пространственного распределения фильтрационного сопротивления при эксплуатации нефтяных месторождений // Нефтяное хозяйство. – 2013. – Выпуск 1079. – С. 58-60.

5. Кобрунов А. И., Кунцев В. Е., Мотрюк Е. Н. Технология оценки связности скважин на основе модели эксплуатации месторождения // Фундаментальные исследования. – 2015. – № 6–3. – С. 452–456.

6. Кобрунов А. И. Математические основы теории интерпретации геофизических данных [Текст]: учебное пособие // А. И. Кобрунов. – Ухта: УГТУ, 2007. -286 с.

METHOD OF THE PASSIVE HYDRODYNAMIC TOMOGRAPHY OF A PERMEABLE FIELD

V.E. Kuntsev

Ukhta State Technical University

This article provides a method of passive hydrodynamic tomography to reconstruction the spatial distribution of filtration resistance of a permeable reservoir of the oil field. This mathematical model of evaluation interwell-connectivities using historical data of reservoir exploration are synthesized of original tomographic data in the form of time intervals, which are used in hydrodynamic tomography

Keywords: passive hydrodynamic tomography, mathematical model, wells, minimization, iteration process, relaxation parameter

УДК 608

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ В JSON-ФОРМАТЕ

А.С. Приньков, Е.П. Трофимов

Липецкий государственный технический университет
alexey@prinkov.xyz

В статье предлагается способ сериализации уравнений математической физики в JSON-подобный формат

Ключевые слова: уравнения математической физики, JSON, сериализация

При проектировании наукоемкого программного обеспечения, предназначенного для моделирования какого-либо физического процесса возникает вопрос хранения данных математических моделей, в частности – уравнений математической физики. Рассматривая уравнения математической физики как структуру данных, а именно: как набор численных данных и операций между ними, можно прийти к выводу о том, что не всякое представление данной структуры является оптимальным в плане скорости работы и занимаемой памяти.

Наиболее эффективным способом является сериализация моделей в JSON-подобный формат, который по сути представляет строку определенной структуры. Эта структура может быть представлена либо как набор пар “ключ: значение”, либо как упорядоченный набор значений. Характерными преимуществами использования данной структуры является: произвольная расширяемость, персистеность, неизбыточность. Значениями могут выступать объекты, массивы, литералы, числа или строки. Такой подход является удобным из-за его простоты и поддержки практически любым современным языком программирования.

Для большей наглядности реализуем уравнение теплопроводности $\frac{\partial U}{\partial t} = 46\frac{\partial^2 U}{\partial t^2}$, с граничными условиями первого рода: $U(0,0) = U(L,0) = 1000,\ U(x,T) = 600,$ где $L = 1$ м – длина стержня.

Модель этого уравнения в JSON-представлении будет выглядеть следующим образом:

```
{
    “equation” : “heat”,
    “dimension” : “1”,
    “condition” : ”1”,

        “formula” : {
    “lambda” : “46”,
        “c” : “500”,
    “time” : “600”,
     “length” : “1”
    “Tleft” : “1000”,
    “Tright” : “1000”,
                }
}.
```

Данное представление является гибким, легко расширяемым и интуитивно понятным. Подобным образом можно сериализовать все уравнения математической физики, что может существенно сказаться на скорости работы, читаемости и длине кода в наукоемких программах.

Литература

1. Jeff Friesen Java XML and JSON -- Dauphin, Manitoba, Canada DOI 10.1007/978-1-4842-1916-4 2016 p. 284

2. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. Т. 1, Москва: 1933, − 525 с.

REPRESENTATION OF THE EQUATIONS OF MATHEMATICAL PHYSICS IN JSON FORMAT

A.S. Prinkov, E.P. Trofimov

Lipetsk State Technical University

The article proposes a method for serializing equations of mathematical physics in JSON-like formats

Keywords: equations of mathematical physics, JSON, serialization

УДК 004.891

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДА ПРОСТРАНСТВЕННЫХ АССОЦИАТИВНЫХ ПРАВИЛ В ЗАДАЧЕ МЕДИКО-ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА

Г.Г. Рапаков, Е.А. Лебедева, К.А. Абдалов, В.А. Горбунов

Вологодский государственный университет
grapakov@yandex.ru

Выполнено исследование метода геопространственных правил связывания, позволяющее выделить шаблоны в данных медико-экологического мониторинга, при анализе рисков здоровью населения от химического загрязнения в целях обеспечения устойчивого экологического развития территорий

Ключевые слова: геопространственное моделирование, ассоциативные правила, фактор риска, злокачественные новообразования, поддержка принятия решений

Введение

Использование геоонтологий в качестве априорных сведений интенсифицирует процесс обнаружение новых знаний в географических базах данных. К числу современных перспективных подходов, позволяющих извлекать оригинальные и представляющие практический интерес закономерности (паттерны) относят пространственные ассоциативные правила [1]. При помощи геопространственных правил связывания можно выявить полезные и скрытые шаблоны в данных на основе непространственных атрибутов событий и геопространственных данных. Географические координаты выступают пространственным предикатом событий [2].

К перечню социально значимых заболеваний, возникновение и (или) распространение которых в определяющей степени зависит от социально-экономических условий, относят злокачественные новообразования (ЗНО). Отличительной особенностью и основной проблемой социально значимых болезней является демонстрируемая ими способность к широкому распространению. Массовость ЗНО в значительной мере обусловлена постоянно действующими экологическими факторами риска для здоровья человека. Практическая значимость работы определяется высоким социально–экономическим

ущербом от смертности населения РФ, обусловленной ЗНО. В связи с этим актуальной является задача исследования геопространственного моделирования при проведении вторичной профилактики для снижения риска развития ЗНО и уровня смертности за счет улучшения их выявления на ранних стадиях [3].

Цель исследования

Геопространственное моделирование смертности от злокачественных новообразований на основе данных медико-экологического мониторинга при помощи метода пространственных ассоциативных правил обеспечивает поддержку управленческих решений в ходе исполнения Государственной программы «Развитие здравоохранения Вологодской области» на 2014-2020 годы, что обуславливает новизну работы.

Материалы и методы

Геопространственные правила позволяют эффективно выполнять обнаружение представляющих интерес структур в больших пространственных базах данных. Алгоритм пространственных ассоциативных правил рассмотрен в работах [1, 2, 4]. Для решения задач пространственного моделирования используются источники данных карты в виде данных контекста и события. При извлечении информации на основе правил связывания, данные события рассматриваются как объект исследования. Данных контекста используются, чтобы описать пространственные особенности данных события. Обнаруженные правила описывают пространственные структуры для данных события, представленные пространственными отношениями, которые определены для каждой пары данных контекста и события. Таким образом, пространственное ассоциативное правило описывает импликацию одного или ряда пространственных объектов другим набором пространственных объектов в пространственных базах данных.

Пространственные (топологические) соотношения могут быть символически представлены пространственными предикатами данных события. Пространственный предикат рассматривается как пространственный атрибут данных события и определяется кортежем $\langle r, o \rangle$, где r — пространственное расположение, o — данные контекста. Используя пространственный предикат, типовое правило связывания можно записать в виде соответствия, например:

$$\langle spatial\ relationship\#1, geo-context\ object\#1\rangle \rightarrow$$
$$\langle spatial\ relationship\#2, geo-context\ object\#2\rangle \quad (a\%, l\%),$$

где $\langle spatial\ relationship\#1, geo-context\ object\#1\rangle$ — условие правила, а $\langle spatial\ relationship\#2, geo-context\ object\#2\rangle$ выступает как его прогноз; оба являются пространственными предикатами. Через $a\%$ обозначена поддержка условия — процент случаев, удовлетворяющих условиям правила. В виде $l\%$ представлен рост правила — отношение поддержки правила (вероятность, того что прогноз является истинным, учитывая, что условие также истинно) к априорной вероятности наличия прогноза правила. Рост позволяет измерить усиление точности прогноза при использовании правила. Правила не обладающие достаточно большими $a\%, l\%$ не могут расцениваться как значительные [2].

Для обнаружения большинства интересных правил предлагается следующий подход. Обозначим через $x_i^{(m)}$ значение правила $i\ (i = 1,...,I)$ вдоль измерения правила $m\ (m = 1,...,M)$. Правило i рассматривается, как представляющее интерес для измерения m, если $x_i^{(m)} > \overline{X}^{(m)} + T * SD^{(m)}$ где T является константой (значение по умолчанию равно 3). $\overline{X}^{(m)}$ и $SD^{(m)}$ являются средним и среднеквадратичным отклонением для измерения m. Они вычисляются, используя указанные шаги. Полагают, что $\overline{X}_0{}^{(m)} = W_0^{(m)} = 0$. Для $i = 1\ to\ I$ вычисляют следующие статистики:

$$W_i^{(m)} = W_{i-1}^{(m)} + 1,\ V_i^{(m)} = \frac{1}{W_i^{(m)}}\left(x_i^{(m)} - \overline{X}_{i-1}^{(m)}\right),\ \overline{X}_i^{(m)} = \overline{X}_{i-1}^{(m)} + V_i^{(m)}.$$

В случае если $x_i^{(m)}$ отсутствует, выполняется переход к последующей записи. После того как было обработано последнее правило $i = I$ возвращается результат:

$$\overline{X}^{(m)} = \overline{X}_I{}^{(m)},\ SD^{(m)} = \sqrt{\frac{1}{I-1}\sum_{i=1}^{I}\left(x_i^{(m)} - \overline{X}_I^{(m)}\right)^2}.$$

Величина эффекта интересности $Q_i^{(m)}$ оценивается как

$$Q_i^{(m)} = \begin{cases} 0, & if\ x_i^{(m)} \le \overline{X}^{(m)} + T * SD^{(m)} \\ \dfrac{x_i^{(m)} - \overline{X}^{(m)}}{SD^{(m)}} - T, & if\ x_i^{(m)} > \overline{X}^{(m)} + T * SD^{(m)} \end{cases}$$

Правило с большим $Q_i^{(m)}$ представляет больший интерес [4].

При формировании модели связывания в качестве прогноза назначается поле «исход лечения» из данных события. Прогноз (предсказание) выступает как результат (ожидаемое следствие) правила. Условия определяют входные данные для правила. В качестве условий выбираются поля показателей результатов анализа объединенных проб из данных контекста. Правила связывания предсказывают исход лечения с учетом результатов анализа объединенных проб.

При построении модели учитываются параметры генерирования вывода, построения новых правил, агрегации и разбиения на интервалы. К параметрам вывода относятся показатель доверия, поддержка правила, рост, поддержка условия и внедрение. Показатель доверия — это процент верных предсказаний правила. Поддержка правила — это фактически процент наблюдений, для которых значения прогноза и условий правила связывания истинны. Рост определяет, как сильно правило улучшает предсказание относительно случайного выбора. Поддержка условия — это доля наблюдений, для которых значения условий правила связывания истинны. Процент неправильных предсказаний в этом случае определяется как внедрение.

Сбор данных для анализа выполнен в ходе проведения медико-экологического мониторинга. Объем выборки обеспечивает необходимую точность оценки не ниже 5% с доверительной вероятностью $\alpha = 0{,}95$, что удовлетворяет требованиям пилотного исследования. Для оценки уровня химического загрязнения в период с устойчивым снежным покровом был произведен сбор точечных проб в различных районах г. Вологды с известными географическими координатами. Выполнен расширенный анализ по 20 показателям для 6 объединенных проб талого снега в аккредитованной лаборатории МУП ЖКХ «Вологдагорводоканал». В ходе медико-социологического опроса были получены результаты об исходах лечения больных ЗНО (рис. 1).

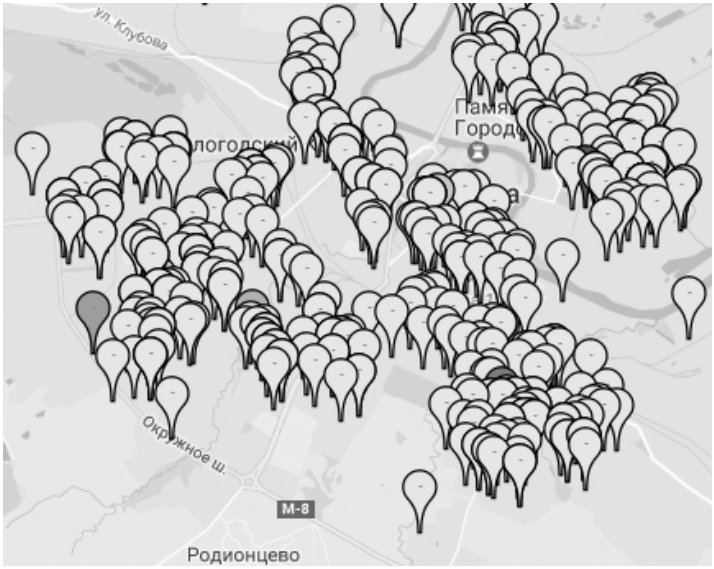


Рис. 1

Результаты исследования и обсуждение

Ознакомление и анализ источников позволил выполнить сопоставление целей и методов работы с аналогичными задачами. В публикации [5] обсуждаются перспективные подходы к развитию системы аэрокосмического мониторинга на основе интеллектуального анализа данных. Среди примеров направлений мониторинга приведен экологический контроль. Читатель знакомится с поиском последовательных ассоциаций (сиквенциальный анализом). Среди примеров методов для экологического контроля ассоциации не указываются. Пространственные ассоциативные правила, в том числе для транзакционных данных не рассматриваются.

Автор статьи [6], используя методы ассоциативных правил и нечеткой логики, исследует вопросы эпидемиологии рака. Извлекаются ассоциации между режимом питания (5 типов) и онкозаболеваемостью (3000 случаев, 16 параметров, 160 диагнозов). Нечеткая логика дополнительно используется для минимизации неопределенности, возникающей в этом случае. Ее применение позволяет найти пространственно-обусловленные поведенческие стереотипы. Пространственные структуры распространения заболевания визуализи-

рованы с использованием карт. Демонстрация эффективности совмещенных методов выполняется при помощи инструментария геоинформационной системы.

Опыт проведения анализа данных при помощи метода ассоциативных правил авторским коллективом настоящего исследования представлен в работе [7]. Исследование метода пространственных ассоциативных правил позволяет выполнить прогнозирование исходах лечения больных ЗНО в зависимости от результатов анализа объединенных проб на основе модели связывания. Сбор данных для анализа выполнен в ходе проведения медико-экологического мониторинга. Объединенные пробы были взяты в различных районах г. Вологды: №1–Центр, №2–Бывалово, №3–ПЗ, №4–Конева, №5–Заречье. В ходе исследования метода пространственных ассоциативных правил контекстные объекты, соответствующие условиям правила, были выделены для района №3–ПЗ (Окружное шоссе, ул. Гагарина, ул. Ленинградская) (рис. 2).

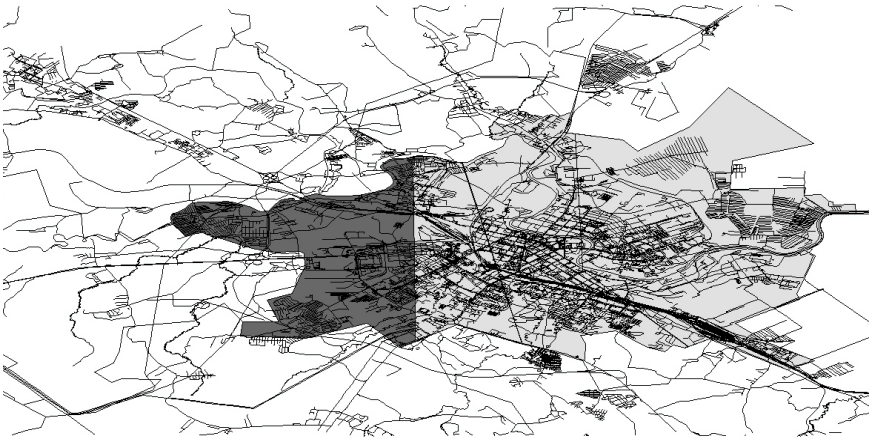


Рис. 2

Для предсказания Исход лечения=Умер отобрано 5 правил со средними значениями: показатель доверия — 19,64%; поддержка правила — 2,67%; рост — 1,3; поддержка условия — 13,59%; внедрение — 10,92% (см. таблицу).

№	Правило
1.	Медь > 0,008 мг/дм^3
2.	Свинец > 0,003 мг/дм^3
3.	Водородный показатель (pH) > 8,950 ед.PH, Взвешенные вещества > 28220 мг/дм^3
4.	Водородный показатель (pH) > 8,950 ед.PH, АПАВ (анионные поверхностно-активные вещ-ва)≤0,063 мг/дм^3
5.	Водородный показатель (pH) > 8,950 ед.PH, Медь > 0,008 мг/дм^3

Дальнейшие перспективы исследования связаны с уточнением обнаружения шаблонов в данных медико-экологического мониторинга за счет выполнения расширенного анализа для большего количества проб.

Заключение

Методы геопространственного моделирования используются для эффективного выявления полезных ассоциативных правил в данных, содержащих геопространственный компонент. Результаты исследования позволили выделить 5 правил для данных медико-экологического мониторинга со средними значениями: показатель доверия — 19,64%; поддержка правила —2,67%; рост — 1,3; поддержка условия — 13,59%; внедрение — 10,92% для предсказания — исход лечения=умер. Контекстные объекты, соответствующие условиям правил, были выделены для района №3–ПЗ и визуализированы с использованием карты. Пространственное моделирование смертности от ЗНО на основе метода пространственных ассоциативных правил способствует росту качества управленческих решений в ходе исполнения Государственной программы «Развитие здравоохранения Вологодской области» на 2014-2020 годы.

Литература

1. Erickson, J. (Ed.) Database Technologies: Concepts, Methodologies, Tools, and Applications / J. Erickson. – Information Science Reference, 2009. – 2962 p.

2. Koperski, K. Discovery of Spatial Association Rules in Geographic Information Databases / K. Koperski, J. Han // 4th International Symposium on Large Geographical Databases, 951. – 1995. – pp. 47–66.

3. Развитие здравоохранения Вологодской области на 2014–2020 годы. [Электронный ресурс]: Государственная программа: постановление Правительства области от 28.10.2013 № 1112 // КонсультантПлюс: справ.-правовая система / Компания «КонсультантПлюс».

4. Discovery of Generalized Spatial Association Rules / W. Dong, L. Li, C. Zhou [и др.] // IEEE International Conference on Service Operations and Logistics, and Informatics (SOLI). – 2012. – pp. 60–65.

5. Замятин, А. В. Методы интеллектуального анализа данных в региональных системах аэрокосмического мониторинга / А. В. Замятин // Вестник СГУГИТ (сибирского государственного университета геосистем и технологий). – 2016. – № 4(36). – С. 74–88.

6. Spatial Data Mining Using Association Rules and Fuzzy Logic for Autonomous Exploration of Geo-Referenced Cancer Data in Western Tamilnadu, India / P. B. Harathi, S. Janani, R. Sridhar [и др.] // Network Modeling and Analysis in Health Informatics and Bioinformatics. – 2015. – No. 12, Vol. 4, Issue 1. – pp. 23–33.

7. Рапаков, Г. Г. Методы и алгоритмы машинного обучения при принятии управленческих решений в региональной системе медицинской профилактики (опыт Вологодской области): монография / Г.Г. Рапаков, Р.А. Касимов. – Вологда: ВоГУ, 2014. – 143 с.

SPATIAL ASSOCIATION RULES ANALYSIS IN PROBLEM OF THE MEDICAL-ECOLOGICAL MONITORING

G.G. Rapakov, E.A. Lebedeva, K.A. Abdalov, V.A. Gorbunov

Vologda State University

Spatial association rules method target patterns in data based on both the spatial and medical-ecological properties for reduce of malignant neoplasms risk factors influence

Keywords: geospatial modeling, association rules, risk factor, malignant neoplasms, decision support

УДК 681.322:517.444

МЕТОДИКА ОЦЕНКИ УСПЕШНОСТИ ПРОГНОЗА ГЕОЛОГО-ТЕХНИЧЕСКИХ МЕРОПРИЯТИЙ

В.И. Серкова

Ухтинский государственный технический университет
viserkova@mail.ru

Рассматриваются методы прогноза геолого-технических мероприятий. Оцениваем качество прогноза по его практической значимости. При наличии нейросетевой модели и обученных нейронных сетей можно быстро, выполнить прогнозы по сотням или тысячам скважин разным видам геолого-технических мероприятий. Прогнозный дебит вычисляется для каждого ГТМ по методу, близкому к методу Монте-Карло

Ключевые слова: нейронные сети, коэффициент корреляции, модель, среднее значение, доверительный интервал, дебит нефти, геолого-технические мероприятия

По теории ошибок не можем точно знать величины фактического и тем более прогнозного дебита нефти после ГТМ.

Коэффициент корреляции предполагает, что сравниваемые величины распределены нормально, в то время как дебиты нефти имеют логнормальное распределение, и чтобы считать по ним коэффициент корреляции их надо сначала прологарифмировать. Иначе на величину коэффициента слишком большое влияние будут оказывать высокие значения дебитов нефти.

Даже для фактического дебита можем говорить только об интервале, накрывающем истинное его значение с вероятностью 90%, в самом лучшем случае – 95%. Но согласно теории, для того чтобы повысить вероятность 90% до 95% нужно брать в полтора раза более широкий доверительный интервал, что может оказаться практически нецелесообразным.

Оценивать качество прогноза необходимо с практической точки зрения какой ГТМ считается успешным, а какой нет. Ведь по определенной группе скважин ГТМ признаются успешными, хотя у этих скважин разные дебиты нефти. Средние дебит определяется как сумма добытой нефти за три месяца деленная на сумму дней работы. При этом определяем доверительный интервал следующим образом:

– берем четыре месяца после ГТМ

– вычисляем четыре значения среднего дебита каждый по всем комбинациям трех месяцев из четырех (1, 2, 3), (1, 2, 4), (1, 3, 4), (2, 3, 4)

– по четырем полученным значениям вычисляем среднее значение **μ** и стандартное отклонение - **σ**

– по критерию Стьюдента для уровня значимости 0.9 и для трех степеней свободы. Отсюда значение фактического дебита с вероятностью 90% находится в интервале

$$\left[\mu - 2{,}1 \cdot \sigma \le \mathrm{q} \le \mu + 2{,}1 \cdot \sigma\right].$$

Для дебитов нефти после ГТМ по пласту АВ1(1-2) ширина доверительного интервала составляет в среднем около 14% от величины дебита.

Ширина доверительного интервала достаточно сильно варьируется для разных скважин – дисперсия около 11% - и может достигать 25-35% и в этих случаях интервал, в котором находится фактический дебит нефти получается **6.5 – 13.5** т/сут.

Прогнозный дебит вычисляется для каждого ГТМ вычисляется по методу близкому к методу Монте-Карло, поэтому можем получить его среднее значение и стандартное отклонение, по которому вычисляем доверительный интервал. Проводим тест, и знаем фактический дебит и его доверительный интервал, то в подавляющем большинстве случаев доверительный интервал прогнозного дебита шире фактического примерно в 1.5 – 2 раза

Так как имеем только интервальные оценки значений как фактического, так и прогнозного значений дебитов нефти после ГТМ и вероятность что эти интервалы точно совпадут практически равна нулю, то необходимо выработать критерии оценки качества прогноза, которые имели бы практический смысл.

Прежде всего, имеем выборку фактических значений дебитов, и эта выборка характеризуется известными критериями – средний дебит нефти **μ** и его стандартное отклонение. **σ.** Очевидно оценка качества прогноза, должна опираться на эти две величины. Ошибка будет значимой только в том случае, когда значения фактического и прогнозного дебитов находятся по разные стороны от среднего дебита. Например, при среднем дебите 10 т/сут фактический дебит составляет 15 т/сут, а прогнозный – 5 т/ сут или наоборот. Если обе

величины находятся по одну сторону от среднего дебита, то ошибка не может считаться значимой, например, если прогнозный дебит 11 т/сут, а фактический – 25 т/сут. Несмотря на большую разницу они оба выше среднего фактического дебита.

С другой стороны, прогнозный и фактический дебиты могут быть по разные стороны от среднего, но близко расположены, например, 9 т/сут и 11 т/сут. Поэтому необходимо учитывать не только положение по отношению к среднему дебиту, но и разницу между прогнозным и фактическим дебитами и соотносить эту разницу со стандартным отклонением фактических дебитов. Ошибка значима если прогнозный и фактический дебиты находятся по разные стороны от среднего дебита(фактического) и расстояние между ними более двух стандартных отклонений. В среднем стандартное отклонение по дебитам нефти после ГТМ примерно равна 6 т/сут.

Если задать баллы всем строкам прогнозной выборки, сложить их и разделить на количество строк, то получиться коэффициент ошибок. Он в общем не совпадает с корреляцией. Иногда корреляция хорошая, но коэффициент ошибок низкий. В то же время специалистов раздражают как раз значимые ошибки прогноза. Хорошо, если коэффициент ошибок выше 0.5.

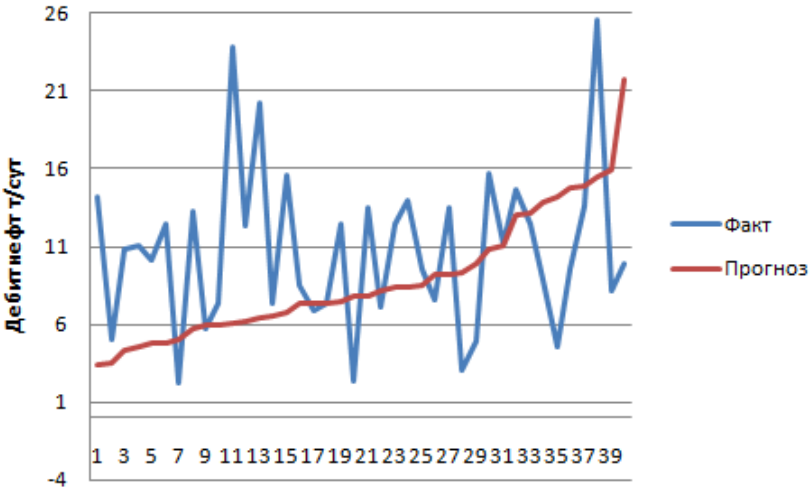
Метод сечений основан на методах непараметрический статистики, в частности на ранговой корреляции Спирмена, которая применяется в тех случаях, когда нельзя корректно применять коэффициент корреляции Пирсона. В частности, если переменные не имеют нормального распределения или измеряются в интервальной шкале.

Это мера зависимости двух случайных величин (признаков) X и Y, основанная на ранжировании независимых результатов наблюдений $(X_1, Y_1), \ldots, (X_n, Y_n)$

$$r_s = 1 - \frac{6\sum_{i=1}^{n} d_i^2}{n\left(n^2 - 1\right)},$$

где d_i – разность между рангами X_i и Y_i.

Чтобы вычислить коэффициент ранговой корреляции нужно сначала отсортировать выборку по одному из параметров, например, по фактическому дебиту нефти и пронумеровать значения от 0 до N, затем отсортировать выборку по второму параметру – прогнозному дебиту нефти и тоже пронумеровать.



Ранжирование прогнозных и фактических дебитов

По двум ранговым колонкам можно вычислить коэффициент Спирмена, который равен 0.44 (коэффициент корреляции-0.40).

Кроме коэффициента ранговой корреляции Спирмена. существуют другие методы оценки связи двух величин – коэффициент ранговой корреляции Кэндела, метод соответствие Гудмена, коэффицент Крамера. Большинство этих коэффициентов эвристические, часто не имеют строгого обоснования, но используются на практике.

В данном случае оцениваем качество прогноза по его практической значимости. Если список скважин-кандидатов для проведения ГТМ может быть отсортирован так, что одна группа скважин всегда в среднем лучше другой, то это все-таки практический результат. Иногда другого и нельзя получить в силу нехватки входной информации.

При наличии нейросетевой модели и обученных нейронных сетей можно быстро, в течение суток выполнить прогнозы по сотням или тысячам скважин разным видам ГТМ. Таким образом на каждую скважину получится по несколько прогнозов и специалист уже может выбрать какой вид ГТМ более перспективен или выберет комплекс мероприятий.

Хотя прогнозы делаются быстро и автоматически, но зато интерпретация их должна выполняться вручную. В этом плане система не заменяет специалиста, но дает ему дополнительный мощный и объективный инструмент. Сами по себе прогнозы могут быть неправильными, но они всегда небезосновательны. Понять, как их можно эффективно использовать можно только на практике.

Простейший способ, это использовать прогнозы системы Cervart как дополнительный аргумент при оценке скважин-кандидатов для проведения ГТМ. Если прогноз системы совпадает с оценкой специалиста, то видимо такая скважина может быть отобрана для проведения ГТМ. Если же прогнозы системы и специалиста расходятся, то проведение ГТМ в такой скважине связано с повышенным риском и возможно от него следует пока отказаться до получения новой информации, особенно если имеется достаточное количество скважин, где прогнозы согласуются.

Прогноз эффекта ГТМ можно выполнять в двух видах. Во-первых, можно выполнять прогнозы по предоставленному списку. В этом плане прогнозы системы можно использовать для проверки планов проведения ГТМ, представленным с промыслов. Ведь по сути на верхних уровнях управления компанией нет никаких средств для проверки этих списков за исключением проверки правильности их оформления. А тут имеется мощный инструмент такой проверки.

В этом плане выполнен также расчет прогнозов эффективности ГТМ для 189 скважин по списку ПечорНИПИнефть.

Здесь расчет был выполнен АО четырем нейронным сетям, одна из которых обучалась на результатах ПЦО, ругая РИР, третья оптимизации и четвертая – ГТМ вообще. По каждой из 189 скважин таким образом имеется четыре прогноза, которые достаточно сильно варьируют. Например, по скв.4051 прогнозные дебиты нефти для разных видов ГТМ меняются в пределах 3 – 9 т/сут, а по скважине 2922 – пределы более узкие – 8 – 10 т/сут. В принципе если по скважине все прогнозы для разных видов ГТМ высокие, то ее следует считать более перспективной, чем если прогнозы сильно варьируют и среди них попадаются низкие значения.

Кроме того, система может сама анализировать скважины и формировать списки для проведения ГТМ. Но в обоих случаях по каждой скважине выполняются прогнозы по нескольким видам ГТМ

с тем, чтобы оценить в целом ее перспективность и иметь возможность получения прогноза по комплексным ГТМ.

Литература

1. С. Хайкин, «Нейронные сети», Москва – Санкт-Петербург – Киев, 2006.

2. Соломатин Г.И, Захарян А.З., Ошкарин Н.И. Прогнозирование работы скважин с помощью искусственных нейронных сетей.// Нефтяное хозяйство №10, 2002 г., с 92-98.

METHODS OF EVALUATING THE SUCCESS OF THE FORECAST OF GEOLOGICAL AND TECHNICAL MEASURES

V.I. Serkova

Ukhta State Technical University

The methods of forecasting of geological and technical measures are considered. The quality of the forecast and its practical significance are assessed. In the presence of a neural network model and the trained neural networks can be quickly, to perform predictions for hundreds or thousands of wells different types of geological and technical measures. The predicted production rate is calculated for each GTM is calculated by the method is close to Monte Carlo

Keywords: neural network, correlation coefficient, model mean value, confidence interval, rate of recovery, geological and technical measures

УДК 534.63:544.773.3

О ВОЗМОЖНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЛАГОСОДЕРЖАНИЯ НЕФТЕПРОДУКТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКОЙ ЗВУКОВОЙ АМПЛИТУДЫ

Ю.Г. Смирнов, И.В. Ивенина

Ухтинский государственный технический университет
ysmirnov@ugtu.net

На основе теоретического анализа выполнена оценка возможности использования метода электрокинетической звуковой амплитуды для определения содержания воды в нефти и нефтепродуктах. Проведены численные оценки частотного диапазона акустического сигнала, в котором можно определять размеры капель водонефтяной эмульсии

Ключевые слова: водонефтяная эмульсия, размеры эмульсионных капель, метод электрокинетической звуковой амплитуды, влагосодержание

Введение

На качество нефти и нефтепродуктов существенно влияет содержание влаги, которое стремятся минимизировать и которое, соответственно, постоянно контролируется на этапах разработки, транспортировки и переработки. Вода в нефтепродукте может находиться преимущественно в виде эмульсионных капель. Определив их число и размеры, можно оценить содержание воды.

Особый интерес представляют методы оперативного определения влагосодержания нефти и нефтепродуктов, в качестве которого в настоящей статье рассматривается метод электрокинетической звуковой амплитуды (ЭЗА).

Физико-математическая модель

Эмульсионные капли при отсутствии внешнего поля можно рассматривать как невязкие проводящие капли сферической формы, свободно плавающие в жидкости с очень низкой электропроводностью.

Положим, что плотность содержимого капли будет равна ρ, плотность вмещающей жидкости (нефти) – ρ_o, диэлектрическая проницаемость среды – ε. Радиус капли – r, коэффициент поверхностного натяжения – σ.

Как показано в работе [1], во внешнем электрическом поле такие капли осциллируют с собственной частотой ω_c. Для таких капель, в случае приложения к электродам внешнего электрического поля напряженностью E, справедлива формула:

$$\omega_c = \sqrt{\frac{8\sigma}{\rho r^3}}\left(1 - 1.382\frac{\varepsilon r E^2}{\sigma}\right). \quad (1)$$

При напряженности электрического поля значительно меньше критической $E << E_{cr}$ вторым членом в формуле (1) можно пренебречь. Тогда, выражая r через ω_c, получим

$$r(\omega_c) = \sqrt[3]{\frac{8\sigma}{\rho\omega_c^2}}\ . \quad (2)$$

Вид указанной зависимости приведен на рис. 1 [2].

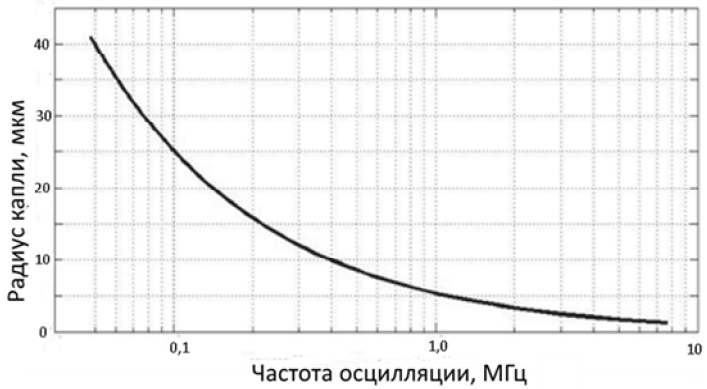


Рис. 1. Связь между размерами эмульсионной капли и частотой ее осцилляции в электрическом поле

С другой стороны, при исследовании коллоидных систем был обнаружен эффект возникновения акустических колебаний коллоидных частиц в переменном электрическом поле. Указанный эффект был впервые открыт в начале 1980-х гг. Естественно предположить, что аналогичный эффект должен наблюдаться и в водонефтяных эмульсиях, которые являются дисперсными системами.

В последнее время большой интерес вызывают аналитические методы исследования разнообразных дисперсных систем, основанные на использовании указанного явления [3]. В частности, имеется

в виду метод, в котором измеряются характеристики звуковых волн, порождаемых переменным электрическим полем, воздействующим на коллоидную систему.

Это, так называемый, метод электрокинетической звуковой амплитуды (ЭЗА). Физические основы метода и математический аппарат для вычисления искомых параметров приведены в работе [4]. Основной измеряемой характеристикой здесь является динамическая подвижность частиц μ_D, т.е. электрофоретическая подвижность в осциллирующем электрическом поле.

Электрофоретическая подвижность определяется как линейная скорость движения дисперсной фазы (u), отнесенная к единице напряженности электрического поля (E), т.е.

$$\mu_D = u/E. \qquad (3)$$

Еще одной важнейшей характеристикой коллоидной системы и ее двойного электрического слоя является ζ-потенциал (электрокинетический потенциал). ζ-потенциал определяют как потенциал границы скольжения фаз при их относительном передвижении в электрическом поле [5].

Электрокинетический потенциал связан с электрофоретической подвижностью уравнением Гельмгольца – Смолуховского:

$$\zeta = \frac{\eta}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0} \mu_D = \frac{\eta \cdot u}{\varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot E}. \qquad (4)$$

где ζ – величина электрокинетического потенциала, В; η – вязкость среды, Н·с/м^2; ε – диэлектрическая проницаемость среды; ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, равная $8{,}85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м; u – линейная скорость движения границы золь – боковая жидкость, м/с; E – напряженность постоянного электрического поля, В/м.

Электрокинетический потенциал может быть определен экспериментально по уравнению (4).

Основной принцип метода ЭЗА заключается в следующем. Переменное электрическое поле воздействует на заряженные частицы и вызывает их осциллирующие колебания, сопровождающееся образованием акустических сигналов при условии, что плотность частиц отлична от плотности дисперсной среды.

Акустические волны регистрируются специальным детектором и преобразуются в ЭЗА-сигнал. По величине этого сигнала может быть вычислена динамическая подвижность (μ_D) частиц и их ζ-потенциал.

Как показано в работе [4], для суспензий амплитуда ЭЗА-сигнала связана с подвижностью частиц следующим соотношением:

$$ESA(\omega) = A(\omega)\varphi\frac{\Delta\rho}{\rho}\mu_D,$$

где ω – частота электрического поля, $A(\omega)$ – инструментальная константа, φ – объемная доля частиц в суспензии, ρ – плотность жидкости, $\Delta\rho$ – разность плотностей дисперсной фазы и дисперсной среды.

Для частиц, имеющих сферическую форму, динамическая подвижность может быть выражена через ζ-потенциал по формуле:

$$\mu_D = \frac{2\varepsilon\xi}{3\eta}G(a)[1 + f(\lambda, \omega)], \quad (5)$$

где $a = \omega r^2/\nu$, r – радиус частицы, η – вязкость жидкости, ε – ее диэлектрическая проницаемость, $\nu = \eta/\rho$ – кинематическая вязкость. Безразмерная величина λ – параметр, характеризующий электропроводность поверхности частиц.

Функция $1 + f(\lambda, \omega)$ пропорциональна тангенциальной составляющей электрического поля на поверхности частиц.

При гармоническом воздействии поля типа $\exp(i\omega t)$ на жидкую среду коэффициент инерции $G(a)$ описывается формулой:

$$G(a) = b\Big/\left[b + i\left(\frac{a}{9}\right)\left(3 + 2\left(\frac{\Delta\rho}{\rho}\right)\right)\right], \quad (6)$$

где

$$b = 1 + (1 + i)\sqrt{a/2}. \quad (7)$$

Коэффициент инерции $G(a)$ позволяет учесть влияние инерционных эффектов при движении частиц. Как видно из формул (6-7), он связан с радиусом частиц и учитывает также разность плотностей частиц и среды.

На низких частотах, когда аргумент коэффициента инерции a стремится к 0, сам коэффициент $G(a)$ становится близким к 1 и практически не зависит от размеров частиц.

При возрастании частоты, когда $\omega r^2/\nu \to 1$, инерция частиц становится значительной. Это влияет на величину μ_D и движение частиц начинает отставать от приложенного поля.

Таким образом, на высоких частотах и амплитуда и сдвиг фаз сигнала ЭЗА зависят от размеров частиц, что позволяет использовать эти частоты для их определения.

В работе [4] показано, что для водных суспензий указанным методом определяются коллоидные частицы с размерами от 1 мкм до 100 нм в диапазоне от 150 кГц до 15 МГц.

Выполним численные оценки диапазона акустического сигнала, генерируемого при использовании метода ЭЗА, для эмульсионных капель воды в нефти с радиусами от 3 мкм до 50 нм. Для расчетов примем для нефти ν = 5 сСт при температуре 50^0С. Результаты расчетов приведены на графике (рис. 2).

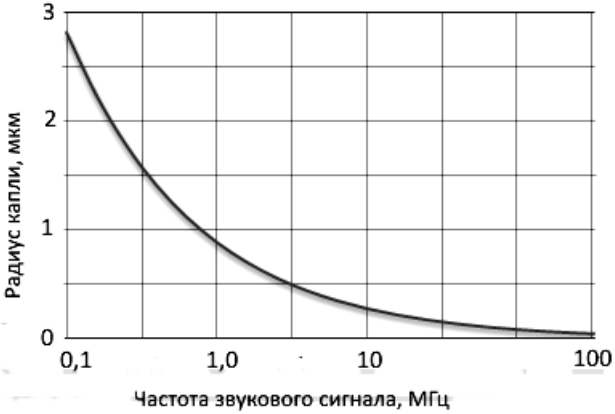


Рис. 2. Зависимость радиуса эмульсионной капли от частоты звукового сигнала, генерируемого при ЭЗА

Заключение

Возможности метода ЭЗА были подтверждены на ряде экспериментов на примере как разнообразных коллоидных частиц в суспензиях произвольной концентрации [4], так и специально приготовленных масляных эмульсий с дейтериевой водой [6].

Соответственно, на наш взгляд, представляется возможным использование метода электрокинетической звуковой амплитуды для определения размеров капель водонефтяной эмульсии в нефти и нефтепродуктах.

По величине фазового сдвига между электрическим и акустическим сигналами можно судить о размерах эмульсионных капель, содержащих воду, а амплитуда акустического сигнала пропорциональна их количеству.

С учетом того обстоятельства, что практически вся вода содержится внутри капель водонефтяной эмульсии, определив размеры капель и их количество, можно вычислить их суммарный объем, а, значит, и содержание воды. Для получения количественных характеристик, естественно, необходимо вначале провести калибровку на исходных пробах сырой нефти.

Литература

1. Feng J. Q., Beard K. V. Small amplitude oscillations of electrostatically levitated drops // Proc. R. Soc. Lond. A1990, V. 430. – P.133-150.

2. Баткин И.С., Смирнов Ю.Г. Моделирование процесса мониторирования параметров эмульсии в электрическом поле в реальном времени // Физико-математическое моделирование систем: материалы IX Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный технический университет», 2012, ч.2. – С.19-25.

3. Булычев Н.А., Фомин В.Н,, Малюкова Е.Б., Урьев Н.Б. Применение метода электрокинетической звуковой амплитуды для изучения адсорбции высокомолекулярных соединений на границе раздела фаз // Коллоидный журнал, 2010, том 72, № 4. – С.450–457

4. O'Brien R.W., Cannon D.W., Rowlands W.N. Electroacoustic determination of particle size and zeta potential // Journal of Colloids and Interface Science. 1995. V. 173. – P. 406-418.

5. Щукин Е.Д., Перцов А.В., Амелина Е.А. Коллоидная химия. 7-е изд., испр. и доп. М.: Издательство Юрайт, 2014. – 444 с.

6. Whitby C. P., Djerdjev A. M., Beattie J. K. and Warr G. G. In Situ Determination of the Size and Polydispersity of Concentrated Emulsions // Langmuir, 2007, V.23, No.4. – P.1694-1700.

ABOUT POSSIBILITY OF DETERMINING THE MOISTURE CONTENT OF OIL PRODUCTS WITH THE USE OF METHODS OF ELECTROKINETIC SOUND AMPLITUDE

Yu.G. Smirnov, I.V. Ivenina

Ukhta State Technical University

Based on the theoretical analysis, the possibility of using the electrokinetic sound amplitude method for determining the water content in oil and oil products has been evaluated. Numerical estimates of the frequency range of the acoustic signal in which it is possible to determine the droplet size of the water-oil emulsion are made

Keywords: water-oil emulsion, the size of emulsion droplets, the method of electrokinetic sound amplitude, moisture content

УДК 519.673

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ НЕЧЕТКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ УСТАНОВЛЕНИЯ СВЯЗИ МЕЖДУ ВЕЛИЧИНОЙ ИНДЕКСА НЕКАНЦЕРОГЕННОЙ ОПАСНОСТИ И ЗАБОЛЕВАЕМОСТЬЮ ПЕРСОНАЛА

И.В. Климова, Ю.Г. Смирнов

Ухтинский государственный технический университет
bgd4@mail.ru, ysmirnov@ugtu.net

Рассматривается нечеткая модель определения уровня заболеваемости работников нефтеперерабатывающего предприятия болезнями органов дыхания на основе анализа концентраций загрязняющих веществ во всех средах пребывания работников с использованием математического аппарата нечетких множеств. Приведены результаты визуализации разработанной нечеткой модели в среде MATLAB Fuzzy Logic Toolbox

Ключевые слова: нечеткое моделирование, индекс неканцерогенной опасности, профессиональный риск, заболеваемость, персонал, вредные вещества

Введение

Нечеткое моделирование на сегодняшний день является наиболее перспективным направлением для научных исследований в области анализа, прогнозирования и моделирования различных процессов. Особенно это актуально для оценки профессиональных рисков для здоровья персонала, где недостаточно данных о связи некоторых заболеваний с условиями труда. Существующая оценка условий труда позволяет определить «словесно» уровень риска на основе установленного класса условий труда. При этом круг рассматриваемых производственных факторов постоянно сужается, исключая даже получение доплат за вредные условия труда. Так, при неизменности условий труда, класс условия труда снижается только за счет изменения методики, по которой проводится оценка условий труда.

Целью данной работы является оценка применимости существующих моделей и методов нечеткой логики к моделированию воздействия вредных веществ на здоровье персонала ООО «РН – Комсомольского НПЗ».

Объект исследования – персонал завода, подвергающийся воздействию вредных веществ в трех средах за период с 2004 по 2010 г.

Предмет исследования – ингаляционные неканцерогенные риски для здоровья персонала нефтеперерабатывающего завода.

Постановка проблемы

Рассмотрим задачу построения зависимости заболеваемости болезнями органов дыхания персонала нефтеперерабатывающего завода от индексов неканцерогенной опасности химических веществ и взвешенных веществ. Нозологическая группа «болезни органов дыхания» выбрана на основе проведенного ранее анализа воздействующих веществ и особенностей их воздействия в трех средах: производственно-технологической, производственной и городской [1].

Производственная технологическая среда является максимально загрязненной – это территории технологических цехов и установок. Производственная среда – менее загрязненная среда внутри административных зданий, а так же остальная территория завода. Городская среда в свою очередь представляет собой совмещение бытовой и окружающей сред на территории города Комсомольска-на-Амуре. Такое деление на среды сделано с целью уточнения концентраций вредных веществ, и, соответственно, более детальной оценки риска для здоровья работников [1].

Всего в анализе участвовало 66 веществ. На рис. 1 показано количественное соотношение веществ, воздействующих на персонал. Из них веществ, воздействующих на органы дыхания – 30 наименований, 7 имеет первоочередное воздействие на органы дыхания (рис. 2) [2].

Все вредные вещества, воздействующие на органы дыхания, можно условно поделить ещё на 2 группы в связи с их особенностями воздействия: химические вещества и взвешенные вещества. Поэтому далее будет строиться модель зависимости заболеваемости персонала болезнями органов дыхания от двух параметров: индекса неканцерогенной опасности по химическим веществам и индекса неканцерогенной опасности по взвешенным веществам.

Индексы неканцерогенной опасности являются количественными оценками величины воздействующих вредных веществ на организм работника в течение всего дня в трех средах и рассчитываются сначала для каждого вещества (1), а затем по группе воздействия на конкретный орган или систему в целом (2):

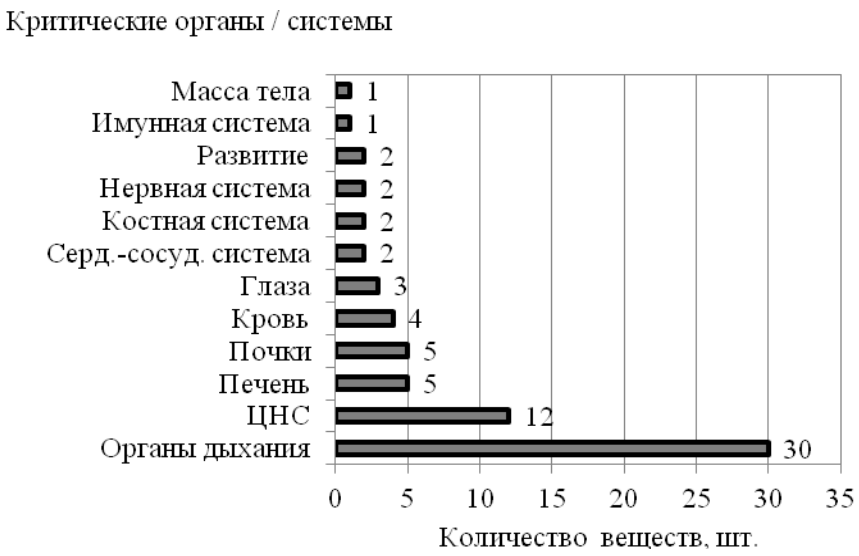


Рис. 1. Соотношение веществ, воздействующих на критические органы/системы



Рис. 2. Соотношение веществ по первоочередному действию на критические органы/системы

$$HQi = AC / RfC, \quad (1)$$

$$HI = \sum HQi, \quad (2)$$

где HQi – коэффициенты опасности для отдельных компонентов смеси воздействующих веществ; HI – индекс неканцерогенной опасности для критического органа или системы; AC – средняя концентрация вещества, мг/м^3; RfC – референтная (безопасная) концентрация, мг/м^3 [1].

Стоит отметить, что средняя концентрация каждого вещества, участвующего в расчете, усреднялась на 24 часа, в зависимости от каждого типа среды, концентрации вещества в ней и времени воздействия на работника.

После того, как были рассчитаны индексы HI для органов дыхания на каждом рабочем месте, данные были усреднены по 29 профессиональным группам. Основные критерии формирования групп персонала: принадлежность к установке или цеху и величина полученного неканцерогенного риска HI.

Минимальные значения индексов составили $HI_{min\ хим} = 23{,}87$ и $HI_{min\ взв} = 2{,}56$, что превышает допустимое значение $HI_{доп} = 1$. Максимальные значения индексов составили $HI_{max\ хим} = 1621{,}58$ и $HI_{max\ взв} = 5{,}01$.

Далее рассмотрим такой выходной параметр, как состояние здоровья персонала, который является отражением сложного комплекса явлений в окружающей среде. На процесс его формирования влияет целый ряд производственных, социально-экономических, а также, биологических, антропогенных, природно-климатических и других факторов, в совокупности определяющих экологическую обстановку тех сред, в которых человек находится в течение дня, употребляемой пищи и воды. Большую часть вредных веществ человек получает с вдыхаемым воздухом, это составляет порядка 80% всех доз поступления.

Предугадать соответствующую величину заболеваемости персонала болезнями органов дыхания достаточно сложно, особенно при сезонности данного явления. В связи с этим целесообразным является использование лингвистических переменных, то есть переменных значениями которых являются не числа, а слова на естественном или формальном языке.

Данные о заболеваемости персонала завода по нозологической форме «болезни органов дыхания» с 2004 по 2010 г. были разбиты по выделенным 29 профессиональным группам, а затем усреднены

за 7 лет и включали в себя количество случаев заболеваний на 1000 работающих и количество дней нетрудоспособности также на 1000 работающих. Далее использованы данные только по количеству случаев заболеваний: минимальное значение – 125 заболеваний, максимальное – 495.

Сопоставление рассчитанных индексов *HI* и заболеваемости ведет к получению 29 точек, которые трудно поддаются описанию с помощью уравнений зависимости, но, тем не менее, явно заметна прямо пропорциональная зависимость: чем больше индекс опасности, тем больше ответная реакция.

Для перехода к нечеткой логике было выполнено дополнительное преобразование входных параметров (индексов *HI*). Так как все индексы превышали допустимое значение была предпринята попытка выбора так называемого «приемлемого» значения, которое бы гарантировало минимальные отклонения в состоянии здоровья.

Для этого был введен дополнительный критерий «тяжесть протекания заболеваний» и выбрана соответствующая группа, индексы которой приняты за «приемлемый» новый норматив. Это позволило получить новые диапазоны значений $HI_{хим} \in [0,12;8,05]$ и $HI_{взв} \in [1,0;1,96]$.

Методология

Процесс моделирования можно укрупненно представить в виде следующей последовательности действий:

1) осознание наличия проблемы;

2) выделение главных факторов, определяющих проблему, которые должны служить выходными параметрами модели;

3) выделение определяющих входных переменных модели;

4) собственно разработка математической модели;

5) идентификация модели (параметрическая или структурно-параметрическая);

6) проведение численных экспериментов с моделью и при необходимости статистическая обработка полученных данных;

7) определение состава параметров качества, характеризующих решаемую проблему (с использованием данных моделирования и априорной информации);

8) формализация частных критериев качества на основе параметров качества;

9) определение параметров, характеризующих относительную значимость частных критериев для решения общей проблемы;

10) формализация обобщенного критерия качества решения проблемы на основе агрегирования частных критериев с учетом их относительной значимости;

11) решение задачи выбора наилучшей альтернативы или многокритериальной оптимизации в зависимости от типа решаемой проблемы.

В сущности, она является некоторой детализацией общепринятой схемы: формулировка проблемы → построение модели и идентификация → оптимизация.

Разработка нечетких моделей санитарно-токсикологической безопасности персонала промышленных предприятий позволяет получить численную оценку профессионального риска. Математический аппарат нечеткой логики обычно применяют в тех случаях, когда имеющейся количественной информации недостаточно, либо она недостаточно полная для получения надежных статистически значимых выводов [3-7].

Наряду с классическими аналитическими методами целесообразно использовать аппарат нечетких множеств, реализованный, в частности, в системе компьютерного моделирования MATLAB [8], что позволяет разработать нечетко-множественную модель для оценки, анализа и визуализации показателей профессионального риска.

Поскольку имеется необходимость учета множества разнородных по физической природе и размерностям показателей, то целесообразно привести их к безразмерному виду путем нормирования, например, следующим образом:

$$s = \frac{s_i - s_{min}}{s_{max} - s_{min}}, \qquad (3)$$

где s_i – нормируемый показатель; s_{max}, s_{min} – максимальное и минимальное значение критерия в выборке по нормируемому показателю.

Система нечеткого логического вывода в общем случае включает в себя следующие этапы:

1. Фазификация (приведение к нечеткости). На этом этапе точное множество входных данных преобразуется в нечеткое множество, которое определяется с помощью функций принадлежности.

2. Построение базы правил нечетких продукций.

3. Композиция с использованием методов агрегирования.

4. Дефазификация (приведение к четкости). На этапе дефазификации исполнительный модуль нечеткой системы на основании

многих нечетких выводов формирует однозначное решение по отношению ко входным переменным.

Рассмотрим подробнее начальный этап, на котором осуществляется фазификация. Обозначим через *d* входную переменную «взвешенные вещества», которая отражает запыленность воздушной среды предприятия. Соответствующее ей терм-множество обозначим через *T1* = {низкое, среднее, высокое} = {*D1, D2, D3*}.

Вторая входная переменная *x* – «химические вещества» – отражает химическую загрязненность воздушной среды. Ей соответствует аналогичное терм-множество *T2* = {низкое, среднее, высокое} = = {*X1*, *X2*, *X3*}.

Выходной переменной *y* (уровень заболеваемости работников) сопоставим также аналогичное терм-множество *T3* = {низкое, среднее, высокое} = {*Y1*, *Y2*, *Y3*}.

Следующий этап – построение базы правил нечетких продукций. Чаще всего в качестве модели нечеткого вывода используют модель Мамдани, особенностью которой является то обстоятельство, что ее правила логического вывода содержат нечеткие значения в своих консеквентах. В нашем случае это функция принадлежности терм-множества *T3*.

В выбранных обозначениях приведем для примера некоторые из указанных правил:

IF *d* IS *X1* AND *x* IS *D1* THEN *y* IS *Y1*
IF *d* IS *X2* AND *x* IS *D1* THEN *y* IS *Y2*
IF *d* IS *X3* AND *x* IS *D1* THEN *y* IS *Y3*

В качестве инструментального средства, реализующего рассмотренный подход, удобно использовать пакет расширения Fuzzy Logic Toolbox среды компьютерной математики MATLAB, позволяющий создавать системы нечеткого логического вывода и нечеткой классификации. Основным интерактивным инструментом Fuzzy Logic Toolbox является редактор систем логического вывода FIS, который содержит средства для функционального отображения входных и выходных переменных [8].

Обсуждение результатов

Этапы проведенного моделирования иллюстрируются приведенными ниже рис. 3-6.

На рис. 3 приведены графики функций принадлежности для термов входныхс «взв»(*d*), «хим»(*x*) и выходной «заболев»(*y*) лингвистических переменных.

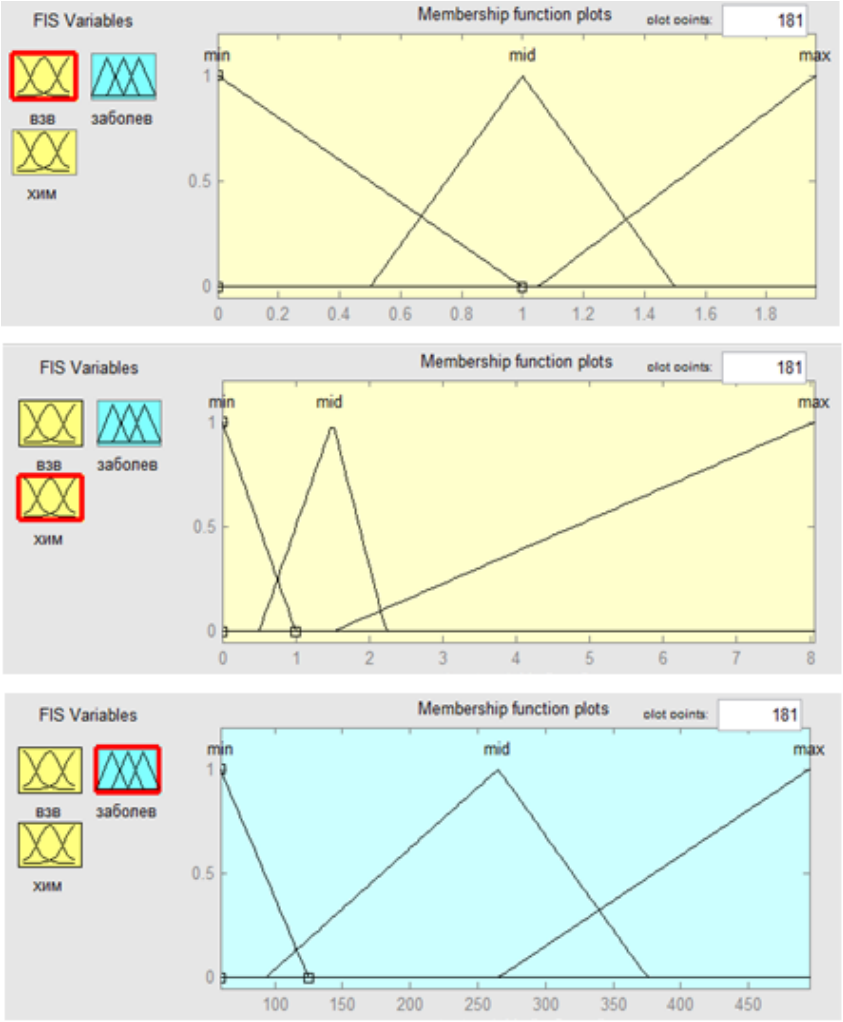


Рис. 3. Вид функций принадлежности в редакторе FIS пакета расширения Fuzzy Logic Toolbox: «взв» и «хим» – для показателей неканцерогенного риска по взвешенным и химическим веществам, соответственно; «заболев» – для числа случаев заболеваний органов дыхания на 1000 работников

На рис.4 показан фрагмент окна определения базы продукционных правил нечеткого вывода.

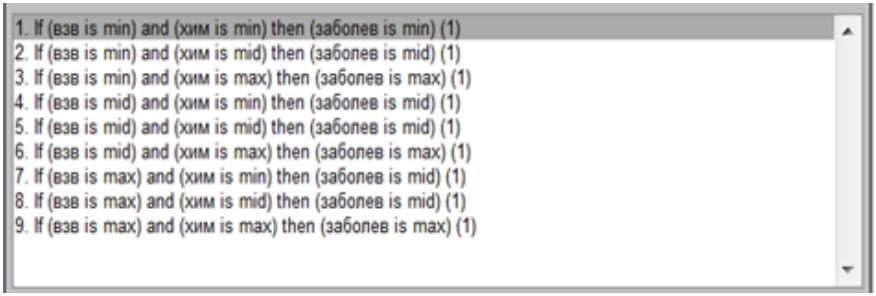


Рис. 4. Вид окна определения продукционных правил в редакторе FIS.

На рис. 5 приведен вид программы просмотра нечеткого вывода в модели Мамдани для рассматриваемой задачи. Здесь показано агрегирование нечетких правил при двух входных переменных «взв» и «хим». При этом используется логическое произведение, что соответствует операции *min*. Агрегирование импликаций, касающихся правил, осуществляется путем логического суммирования, что соответствует операции *max*.

Поскольку в качестве оператора агрегации используется оператор max, а в качестве оператора импликации используется оператор *min*, процедура получения нечеткого значения выхода является композицией *max-min*.

После получения нечеткого выхода (y) необходимо перейти к этапу дефазификации, на котором находится соответствующее ему четкое значение y_{out} (5). В качестве метода дефазификации нами был использован метод центра тяжести:

$$y_{out} = \sum_{i=1}^{n} y_i \mu(y_i) \Big/ \sum_{i=1}^{n} \mu(y_i), \qquad (4)$$

где $\mu(y_i)$ – функция принадлежности i-го правила, а n – число правил нечеткой продукции.

Наконец, на рис. 6 показан вид поверхности нечеткого вывода для разработанной нечеткой модели. Этот вид служит для общей оценки адекватности построенной нечеткой модели, а также позволяет проанализировать влияние значений входных переменных на значение выходной переменной.

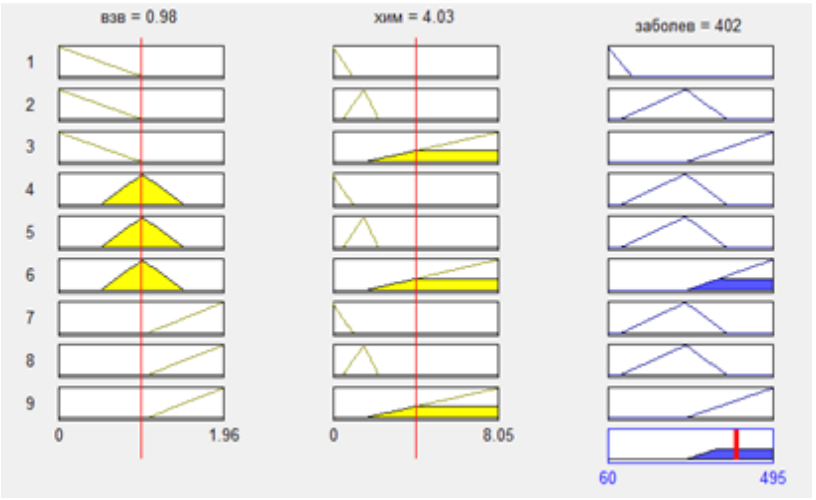


Рис. 5. Вид программы просмотра нечеткого вывода Мамдани.

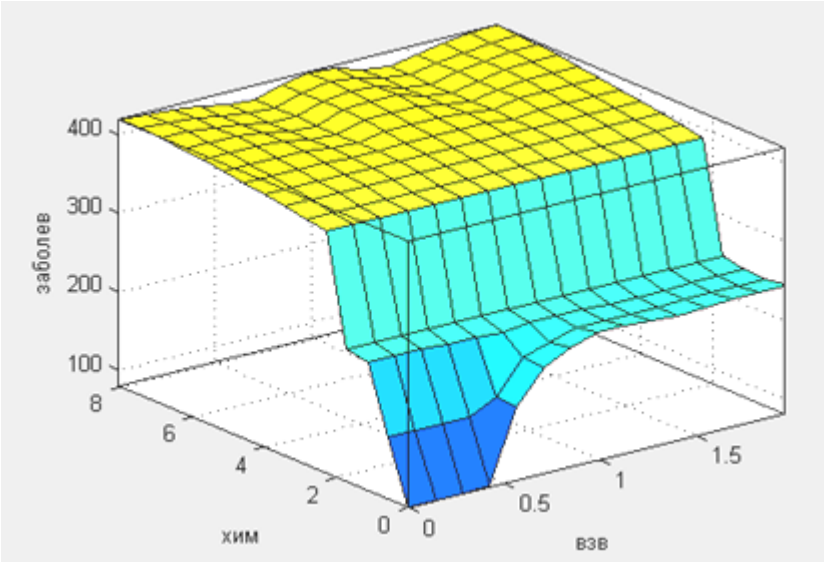


Рис. 6. Поверхность нечеткого вывода для разработанной нечеткой модели.

Заключение

1. Выделены 29 профессиональных групп персонала завода, данные по которым преобразованы в 2 входных параметра *d* (взвешенные вещества), *x* (химические вещества) и 1 выходной параметр *y* (заболеваемость персонала болезнями органов дыхания).

2. Разработана и математически описана нечеткая модель влияния загрязняющих веществ двух групп на здоровье персонала на основе модели Мамдани, а именно на органы дыхания.

3. Предложен вариант фазификации трех выделенных параметров на основе приемлемого риска для здоровья персонала как «низкий», «средний», «высокий».

4. В интерактивном режиме выполнена разработка и визуализация системы нечеткого вывода решаемой задачи с использованием графических средств пакета расширения Fuzzy Logic Toolbox среды компьютерной математики MATLAB.

5. Выявлено, что весь персонал завода подвержен достаточно большому воздействию неканцерогеннго риска, вероятность возникновения вредных эффектов у работника (заболеваний органов дыхания) возрастает пропорционально увеличению коэффициента неканцерогенной опасности *HI*.

6. Разработанная модель может быть легко дополнена новыми показателями загрязнения воздуха или же другими производственными факторами (лингвистическими переменными) и новыми выходными параметрами (нечёткими правилами вывода).

Литература

1. Оценка неканцерогенного риска для профессиональных групп ООО «РН-Комсомольского НПЗ» / И. В. Афанасьева, В. В. Анисимов // Ученые записки Комсомольского-на-Амуре государственного технического университета. Науки о природе и технике, 2012. № II–1(10). С. 89–96.

2. Идентификация факторов опасности при оценке риска для здоровья персонала ООО «РН-Комсомольского НПЗ» / И. В. Афанасьева, В. В. Анисимов // Материалы 11-й международной научно-практической конференции в области экологии и безопасности жизнедеятельности «Дальневосточная весна – 2011». Комсомольск-на-Амуре: ГОУВПО «КнАГТУ», 2011. С. 141–149.

3. Дилигенский Н. В., Дымова Л. Г., Севастьянов П. В. Нечеткое моделирование и многокритериальная оптимизация производственных систем в условиях неопределенности: технология, экономика, экология. М.: «Издательство Машиностроение−1», 2004. 398 с.

4. Мазорчук М. С., Симонова К. А., Греков Л. Д. Применение методов и моделей нечеткой логики для моделирования экономических процессов // Системы обробки информации, 2007. № 9(67). С. 159-162.

5. Рогачев А.Ф., Мелихова Е.В. Нечетко-множественное моделирование и оценка экологической безопасности сельскохозяйственных земель при радиационном загрязнении // Глобальная ядерная безопасность, 2016. №1(18). С. 7–18.

6. Середа С.Н. Оценка экологического риска с помощью нечетких моделей // Машиностроение и безопасность жизнедеятельности, 2013. № 3. С. 15-20.

7. Тиндова М.Г. Нечёткая модель экономической оценки экологического ущерба // Экономика: вчера, сегодня, завтра, 2012. №3-4. С. 129-139.

8. Леоненков А.В. Нечеткое моделирование в среде MATLAB и fuzzyTECH. С-Пб.: БХВ-Петербург, 2005. 736 с.

APPLICATION OF FUZZY MODELING METHODS FOR CONNECTION BETWEEN THE SIZE OF NONCANCENOGENOUS HAZARDS INDEX AND PERSONNEL MORBIDITY

I.V. Klimova, Yu.G. Smirnov

Ukhta State Technical University

A fuzzy model for determining the morbidity rate of employees of a refinery with diseases of the respiratory organs is analyzed on the basis of an analysis of the concentrations of pollutants in all occupational environments using a mathematical apparatus of fuzzy sets. The results of visualization of the developed fuzzy model in the MATLAB Fuzzy Logic Toolbox medium are presented

Keywords: fuzzy modeling, index of non-carcinogenic danger, professional risk, morbidity, personnel, harmful substances

УДК 62-567

ОБЗОР И КЛАССИФИКАЦИЯ КОНСТРУКЦИЙ РЕЗИНОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ АМОРТИЗАТОРОВ И МЕТОДЫ ИХ ПРИМЕНЕНИЯ

Г.С. Русских, Д.А. Устинов

Омский государственный технический университет
dim.ustin7@yandex.ru

Представлены резинометаллические амортизаторы испытывающие различные виды деформации. Описан пластинчатый амортизатор применяемый при сейсмоизоляции в нефтегазовой промышленности, и устанавливаемый в резинометаллические сейсмоизолирующие опоры. Приведены результаты испытания изделия. Выявлены схожие конструкции в различных областях применения

Ключевые слова: амортизаторы, деформации, сейсмоизолирующие опоры, виброизолирующая опора, кольцо резинометаллическое

Интенсификация производственных процессов, создание скоростных транспортных средств, увеличение мощности оборудования при уменьшении его масс и габаритов на единицу мощности неизбежно сопровождается увеличением интенсивности и расширением спектра вибраций корпусов судов, машин, строительных конструкций и других инженерных сооружений в различных отраслях промышленности и народного хозяйства [1].

С целью снижения вибрационных нагрузок на машины и агрегаты применяются различные упругие, упруго-демпферные и демпферные опорные, резиновые прокладки и амортизаторы, виброизолирующие покрытия и т.д. [2].

В условиях больших статический нагрузок, как правило, применяют резинометаллические амортизаторы, минимальная динамическая жесткость упругого элемента виброизоляции, в такого вида конструкциях, определяется и ограничивается, в конечном счете, величиной этих нагрузок и физико-механическими свойствами используемых резин [3].

В процессе работы амортизаторы испытывают различные виды деформации: растяжение, сжатие, сдвиг, кручение, а также одновременно несколько видов деформации – сжатие со сдвигом, сжатие с кручением и т.д. [4, 5].

Наиболее распространены амортизаторы, работающие на деформацию сжатия. В простейшем случае это детали цилиндрической формы с осевым отверстием или без него (рис. 1, *а*, *в*).

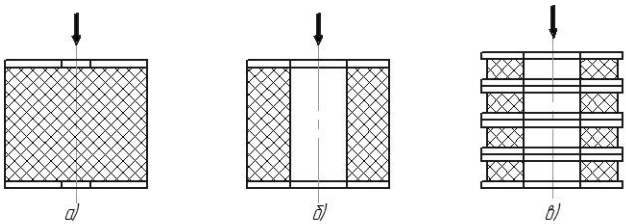


Рис. 1. Амортизаторы сжатия

Наличие центрального отверстия повышает эластичность амортизатора и способствует лучшему теплоотводу и охлаждению элемента. Увеличивая диаметр внутреннего отверстия и наружный диаметр амортизатора, можно повышать его продольную устойчивость, сохраняя постоянной продольную жесткость [6]. Ещё более повышенную устойчивость имеет сборный амортизатор (рис. 1*в*), состоящий из ряда цилиндрических амортизаторов с металлическими дисками, служащим для их соединения. Упругая характеристика такого группового амортизатора может легко изменятся путём присоединения новых элементов.

Резинометаллические амортизаторы сжатия, показанные на рис. 1, имеют жесткость в поперечном направлении значительно меньшую, чем в продольном, особенно в тех случаях, когда их диаметр соизмерим с высотой. Это объясняется тем, что модуль упругости резины, как уже отмечено, при сдвиге в несколько раз меньше, чем при сжатии [7].

В тех случаях, когда поперечные колебания амортизируемой машины нежелательны, применяют резинометаллические амортизаторы, работающие на сдвиг (рис. 2, *а*, *б*). Амортизаторы такого типа отличаются высокой эластичностью в продольном направлении и значительной жесткостью в поперечном [8]. Обычно они представляют собой резиновый элемент прямоугольного или квадратного сечения (рис 2, *а*), привулканизованный к металлической арматуре. Для увеличения жесткости амортизатора при торцовом сжатии (по *А*) и необходимости сохранения его габаритных размеров резиновый элемент разделяют одной или несколькими металлическими пластинами (рис. 2, *б*).

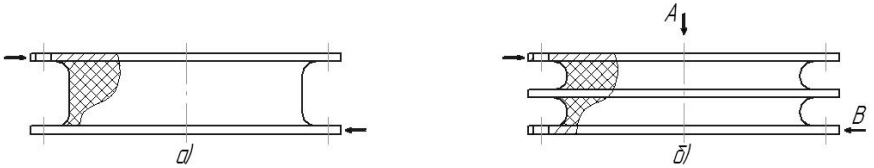


Рис. 2. Амортизаторы сдвига

Амортизаторы такого типа (рис. 3) широко применяются при сейсмоизоляции в нефтегазовой промышленности, и устанавливаются в резинометаллические сейсмоизолирующие опоры (РМСО) [9]. Данные опоры в общем случае представляют набор чередующихся резиновых и металлических листов, заключённых между опорными металлическими пластинами.

Для предотвращения просадки сооружения под нагрузкой РМСО выполняются жесткими в вертикальной и податливыми в горизонтальной плоскостях. При этом для обеспечения упругого бокового перемещения они обладают малой жесткостью в горизонтальной плоскости. К числу достоинств РМСО можно отметить то, что они просты по конструкции и легко изготавливаются. Требуемые значения параметров легко подбираются за счёт изменения числа и толщин отдельных слоёв. Системы сейсмоизоляции с применением таких опор существенно снижают уровень динамических воздействий и уменьшают период собственных колебаний.

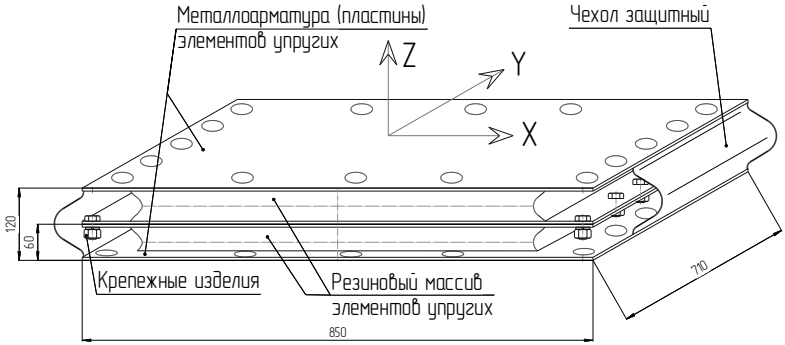


Рис. 3. Амортизатор пластинчатый

Существуют задачи, направленные на исследование напряжено-деформированного состояния резинометаллических амортизаторов систем сейсмоизоляции шарового резервуара при действии статических и динамических нагрузок, а так же оценка эффективности их применения.

Резервуар для хранения жидких углеводородов установлен на девяти опорных стойках диаметром 820 мм, которые опираются на фундамент через РМСО (рис. 4). Сейсмоизолирующая опора шарового резервуара включает три резинометаллических амортизатора, каждый из которых состоит из двух последовательно соединённых резинометаллических элементов.

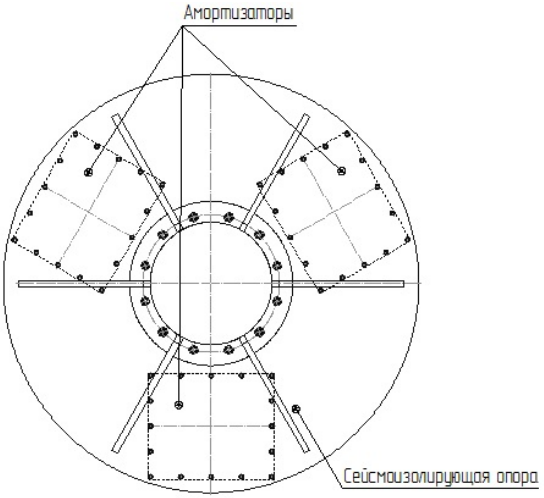


Рис. 4. Схема установки амортизаторов в состав сейсмоизолирующей опоры

Амортизатор должен обеспечивать работоспособность при действии статической нагрузки сжатия (при заполненном шаровом резервуаре) на одну сейсмоизолирующую опору не свыше 3042,5 кН, которая равномерно распределяется между тремя амортизаторами, входящими в состав одной РМСО. Статическая нагрузка сжатия на одну сейсмоизолирующую опору при незаполненном шаровом резервуаре составляет не более 413,1 кН. При этом статически жесткость амортизатора при статической нагрузке составляет:

– в направлении оси Z (сжатие) – не менее $1{,}36 \cdot 10^8$ Н/м

– в направлении оси X (Y) (сдвиг) – $1{,}3 \cdot 10^7$ Н/м.

Резинометаллический элемент состоит из двух статических пластин 850х710 мм толщиной 5 мм и резинового массива между ними (рис. 3).

Краткий обзор патентной информации (по России) и научно-технической литературы выявил схожие конструкции в различных областях применения.

Виброизолирующая опора [10]. Изобретение относится к машиностроению, в частности к виброизолирующим опорам для гашения ударных нагрузок и вибрации, возникающих при работе тяжелого оборудования, стационарных машин и механизмов.

Виброизолирующая опора содержит (рис. 5) корпус 1 с установленным в нем пакетом резинометаллических элементов, каждый из которых включает эластомерный виброизолятор 2, расположенный между металлическими шайбами 3 и 4, имеющии коробкообразную форму. Шайба 3 установлена с возможностью взаимодействия кромок ее стенок 5 с наклонными поверхностями 6 стенок нижерасположенной шайбы. От виброизолируемого объекта (не показан)

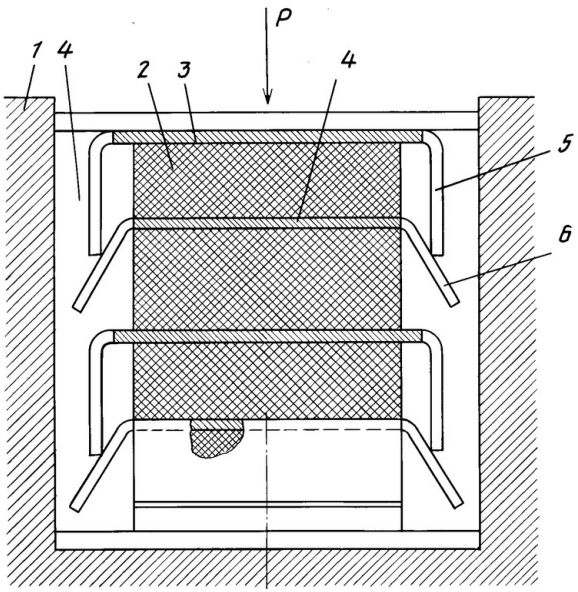


Рис. 5. Виброизолирующая опора

нагрузка Р передается на пакет резинометаллических элементов с осуществлением их деформации и накапливанием потенциальной энергии. За счет работы на сжатие резиновых виброизоляторов 2 и деформацию наклонных стенок 6, работающих на изгиб шайб 4, поглощается энергия нагрузки Р. За счет потерь на внутреннее трение в резиновых виброизоляторах 2 часть энергии рассеивается в тепло и осуществляется демпфирование вертикальных колебаний и гашение вибрации. При снятии или уменьшении нагрузки Р подвижные детали опоры возвращаются в исходное положение за счет потенциальной энергии резиновых виброизоляторов 2 и шайб 3, 4.

Таким образом, включение в упругую деформацию стенок металлических шайб коробкообразной формы наряду с сжатием резиновых виброизоляторов повышает несущую способность виброизолирующей опоры, тем самым повышая надежность и долговечность работы [11].

Амортизатор [12]. Изобретение относится к средствам гашения вибрации и ударов. Обойма и шток амортизатора соединены между собой при помощи пакета пластин, размещенного в полости обоймы. На рис. 6 приведено устройство амортизатора, в состав которого входят следующие детали: 1 - обойма; 2 - неподвижная упругая пластина; 3 - шток; 4 - подвижная упругая пластина; 5 - крышка. В обойме 1 выполнена внутренняя полость для установки пакета пластин. Подвижные и неподвижные упругие пластины пакета выполнены из одинакового материала и одинаковы по толщине, число неподвижных пластин на одну больше. В плане подвижные и неподвижные пластины могут иметь любую произвольную форму. Обойма 1 имеет с одной стороны глухое дно, а с другой закрывается крышкой на винтах и обеспечивает возможность поджатия пакета пластин. Неподвижные пластины 2 по внешним кромкам соединены с обоймой 1 по скользящей посадке. Подвижные пластины 4 по цен-

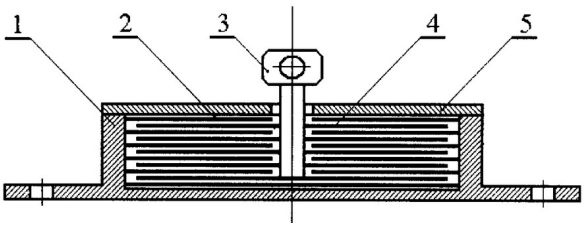


Рис. 6. Амортизатор

тру жестко соединены со штоком 3. Подвижные и неподвижные пластины расположены в пакете поочередно. Для соединения амортизатора с основанием объекта обойма 1 имеет фланец с отверстиями, а для соединения с виброзащищаемым прибором на внешнем конце штока также выполнено отверстие.

Амортизатор работает следующим образом. В исходном состоянии без движения деформации упругого пакета пластин не происходит. Изменения температуры также не приводят к перемещениям штока 3, поскольку неподвижных пластин 2 выполнено на одну больше и деформации подвижных пластин 4 полностью компенсируются перемещениями неподвижных.

Поглощающий аппарат железнодорожного транспортного средства [13]

Относится к железнодорожному транспорту, в частности к амортизирующим устройствам для поглощения механической энергии с целью уменьшения продольных усилий в железнодорожном подвижном составе, передающихся через автосцепное устройство на раму экипажа

Поглощающий аппарат (рис. 7) содержит корпус 1 с отверстием в днище, фрикционный узел 2 и стяжную шпильку 3, размещенную в отверстии корпуса 1. В средней части стяжной шпильки 3 жестко закреплена шайба 4, с двух сторон от которой расположены две секции 5 и 6 упругого комплекта, поджатых гайками 7 и 8 с различным усилием.

Под действием внешней силы, передаваемой через фрикционный узел 2 и превышающей усилие поджатая секции 5 упругого комплекта, происходит деформация этой секции, поджатой с меньшим усилием. Секция 6 упругих элементов, усилие поджатия которой превышает силу, передаваемую через фрикционный узел, при этом не деформируется. Жесткость всего упругого комплекта при этом равна жесткости элементов секции 5 и его деформация происходит на участке 9-10 (рис. 8) линии нагружения силовой характеристики.

Кольцо резинометаллическое (рис. 9) [14] представляет собой резиновый массив 3 с привулканизованной к нему металлоарматурой 1, 2 в виде наружной и внутренней втулок.

В технологии изготовления таких изделий, как кольцо резинометаллическое, присутствуют операции вулканизации резины при температуре 150–155°С [15]. Термическое воздействие ведет к рас-

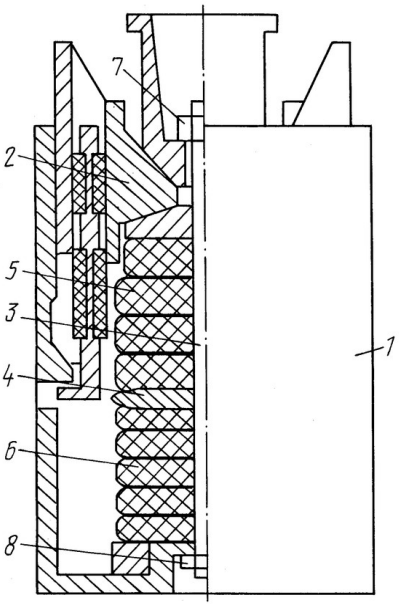


Рис. 7. Поглощающий аппарат железнодорожного транспортного средства

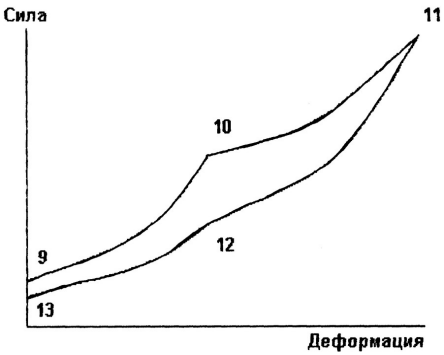


Рис. 8. Силовая характеристика упругого комплекта поглощающего аппарата

ширению металлических элементов изделия (поз. 1 и поз. 2) и резины (поз. 3), вследствие после охлаждения в зонах, где резина привулканизована к металлу, возникают остаточные напряжения, ухудшающие характеристики как самого изделия, так и амортизатора в

целом. Для снятия подобного рода напряжений в технологическом процессе предусматривалась операция дорнования, принцип которой заключался в увеличении (растягивании) внутреннего диаметра внутренней втулки кольца резинометаллического механическим путём.

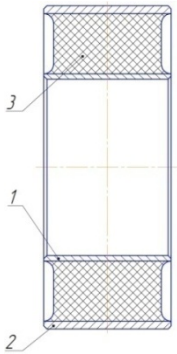


Рис. 9. Кольцо резинометаллическое

Такие операции при серийном изготовлении кольца резинометаллического увеличивают время изготовления партии, трудоёмкость. Для того, чтобы избежать подобных операций дорнования примененяют составы клеёв, которые улучшают привулканизацию резины к металлическому кольцу.

Проведя обзор представленных конструкций, методов их применения и классификации можно заключить, что исследование является перспективной, востребованной и актуальной научной задачей.

Литература

1. Ляпунов В.Т. Резиновые виброизоляторы. Л.: Судостроение 1988. 216 с.

2. Болотник Н.Н. Оптимизация амортизационных систем. М.: Наука, 1983. 255 с.

3. Ляпунов В. Т. Виброизоляция в судовых конструкциях. Л.: Судостроение 1975, 232 с.

4. Потураев В.Н. Резиновые детали машин. М.: Машиностроение 1977, 216 с.

5. Махлис, Ф. А. Терминологический справочник по резине : справ. изд. / Ф. А. Махлис, Д. Л. Федюкин. – М. : Химия, 1989. – 400 с.

6. Справочник по судовой акустике/ Под ред. И.И. Клюкина и И.И. Боголепова. Л.: Судостроение, 1978. 504 с.

7. Лавендел Э.Э., Хричикова В. А., Лейканд М.А. Расчёт жесткости

сжатия тонкослойных резинометаллических элементов//Вопросы динамики и прочности. Рига: Зинатне, 1981. Вып. 38. С. 57-62.

8. Алфутов Н.А Основы расчёта на устойчивость упругих систем. М.: Машиностроение, 1978. 311с.

9. Базилевский С.В. Резинометаллические сейсмоизолирующие опоры/ С.В. Базилевский – М.: ВНИИИС, 1983.

10. Пат. 2029157 Российская Федерация, МПК F16F11/00. Виброизолирующая опора / Рахманов Н. Н.; заявитель и петентообладатель Рахманов Н. Н. заявл. 08.02.91; опубл. 20.02.95.

11. Лавендел Э.Э. Расчет резинотехнических изделий. М.: Машиностроение, 1976. 232 с.

12. Пат. 2469223 Российская Федерация, МПК F16F3/2, F16F1/18, F16F15/073. Амортизатор / Вавилов Владимир Дмитриевич; заявитель и петентообладатель Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева" (НГТУ); заявл. 07.06.11; опубл. 10.12.12.

13. Пат. 2173273 Российская Федерация, МПК B61G9/06, F16F1/40, F16F3/00 Поглощающий аппарат железнодорожного транспортного средства / Беляев В.И., Ступин Д.А., Кеглин Б.Г.; заявитель и петентообладатель Государственное унитарное предприятие Всероссийский научно- исследовательский институт железнодорожного транспорта МПС России; заявл. 05.18.98, опубл. 10.12.12.

14. Бобров С.П., Баранов В.А., Селявина Т.В., Устинов Д.А., Ефимов И.Ю. Улучшение технологичности при производстве кольца резинометаллического без ухудшения показателей прочности связей изделия // Омский научный вестник 2017 - № 2 (152) – С. 20-23.

15. Трибельский И.А. [и др.]. Расчётно-эксперементальные методы проектирования сложных резинокордных конструкций: моногр. Омск: Изд-во ОмГТУ, 2011. 240 с.

OVERVIEW AND CLASSIFICATION OF STRUCTURES OF RUBBER-METAL SHOCK ABSORBERS AND METHODS THEIR APPLICATION

G.S. Russkikh, D.A. Ustinov

Omsk State Technical University

Presented by the rubber dampers ispiti serving various types of deformation. Described vane attenuator is used in the seismic isolation in the oil and gas industry and installed in rubber steel seismic isolation supports. The results of testing of the product. Showed similar designs in a variety of applications

Keywords: shock, deformation, seismic isolation supports, antivibration bearing, a ring of rubber

УДК 519.632; 539.182

ОБОБЩЕННЫЙ МЕТОД ТОЧЕЧНЫХ ИСТОЧНИКОВ ПОЛЯ В РЕШЕНИИ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА

С.Ю. Князев, Е.Е. Щербакова, А.А. Щербаков

Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону
ksy@donpac.ru, SherbakovaEE@mail.ru

Целью работы является разработка численного метода решения краевых задач для линейных уравнений эллиптического типа. Этот метод основан на приведении исходного уравнения математической физики к более простому неоднородному уравнению с известным фундаментальным решением. Для подтверждения эффективности предложенного численного метода решена двумерная и трехмерная краевые задачи с известными решениями

Ключевые слова: фундаментальное решение, метод фундаментальных решений, метод точечных источников, уравнения эллиптического типа, краевая задача

Метод точечных источников поля (МТИ) является одним из эффективных численных методов решения краевых задач для уравнений эллиптического типа. Обычно этот метод используется при решении краевых задач для уравнений Лапласа, Гельмгольца, бигармонического уравнения [1-6], при моделировании полей упругих напряжений и т.д. [7-10]. Для использования МТИ необходимо располагать фундаментальными решениями исходного уравнения в аналитическом виде. Однако, при решении некоторых задач математической физики фундаментальные решения неизвестны, что является препятствием для использования МТИ. В данной работе для решения задачи исходное уравнение приводится к более простому уравнению с известным фундаментальным решением [11-15].

Пусть известно фундаментальное решение $g(\mathbf{r},\mathbf{R})$ уравнения $L(\mathbf{r})U(\mathbf{r})=0$. Требуется найти в области Ω решение краевой задачи для неоднородного уравнения:

$$(L+l(\mathbf{r}))U(\mathbf{r})=f(\mathbf{r}),\ \mathbf{r}\in\Omega \qquad (1)$$

с условиями на границе $\partial\Omega$

$$\Lambda(\mathbf{r})U(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}),\ \mathbf{r} \in \partial\Omega, \qquad (2)$$

где L, $l(\mathbf{r})$, $\Lambda(\mathbf{r})$ – линейные операторы в области Ω и на границе $\partial\Omega$.

Ищем решение задачи (1, 2) в виде $U(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) + v(\mathbf{r})$, где $Lv = 0$.

Для неизвестной функции $u(\mathbf{r})$ получаем уравнение $Lu = f - l(\mathbf{r})u - l(\mathbf{r})v = \rho(\mathbf{r})$, правую часть которого $f - l(\mathbf{r})u - l(\mathbf{r})v = \rho(\mathbf{r})$ можно рассматривать как плотность $\rho(\mathbf{r})$ некоторого фиктивного заряда, распределенного в области Ω. Отсюда для функции $u(\mathbf{r})$ получаем интегральное уравнение

$$u(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} g(\mathbf{r},\mathbf{R})\left(f(\mathbf{R}) - l(\mathbf{R})v(\mathbf{R}) - l(\mathbf{R})u(\mathbf{R})\right) d\Omega_R\ . \qquad (3)$$

Для функции $v(\mathbf{r})$, как в МТИ, используем приближенное выражение $v(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^{Nq} q_k g(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}_k)$. Здесь N_q число моделирующих поле точечных зарядов q_k, располагаемых в точках, с координатами $\boldsymbol{\rho}_k$ за пределами области решения задачи, вблизи ее границы. Теперь уравнение (3) принимает вид

$$u(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} g(\mathbf{r},\mathbf{R})\left(f(\mathbf{R}) - l(\mathbf{R})\sum_{k=1}^{Nq} q_k g(\mathbf{R},\boldsymbol{\rho}_k) - l(\mathbf{R})u(\mathbf{R})\right) d\Omega_R\ . \qquad (4)$$

Подействуем на уравнение (4) оператором $l(\mathbf{r})$. Введя новую функцию $w(\mathbf{r}) \equiv l(\mathbf{r})u(\mathbf{r})$, получим для этой неизвестной функции интегральное уравнение

$$w(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} l(\mathbf{r})g(\mathbf{r},\mathbf{R})\left(f(\mathbf{R}) - w(\mathbf{R}) - l(\mathbf{R})\sum_{k=1}^{Nq} q_k g(\mathbf{R},\boldsymbol{\rho}_k)\right) d\Omega_R\ . \qquad (5)$$

Решая уравнение (5) численно, находим функцию $w(\mathbf{r})$, после чего, используя уравнение (4), записанное в виде $u(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} g(\mathbf{r},\mathbf{R})\left(f(\mathbf{R}) - l(\mathbf{R})\sum_{k=1}^{Nq} q_k g(\mathbf{R},\boldsymbol{\rho}_k) - w(\mathbf{R})\right) d\Omega_R$, находим искомую функцию $u(\mathbf{r})$.

При численном решении интеграл в (5) вычисляется, используя, например, метод прямоугольников, путем разбиения области решения на элементарные участки, внутри которых выбирают узловые точки, число которых N_u. Некоторые из узлов, числом $N_G = N_q$, располагаются на границе $\partial\Omega$. Для каждого узла записывается численный аналог уравнения (5). Получается N_u уравнений для $N_u + N_G$

неизвестных: для N_u значений функции $w(\mathbf{r})$ в N_u узловых точках и для $N_q = N_G$ зарядов q_k, располагаемых в точках с координатами $\boldsymbol{\rho}_k$. Полученную систему необходимо дополнить уравнениями, учитывающими граничные условия для решаемой задачи.

Подействуем на уравнение (5) при $\mathbf{r} \in \partial\Omega$ оператором $\Lambda(\mathbf{r})$:

$$\Lambda(\boldsymbol{r})u(\boldsymbol{r}) = \int_{\Omega} \Lambda(\boldsymbol{r})g(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})\left(f(\boldsymbol{R}) - l(\boldsymbol{R})\sum_{k=1}^{Nq} q_k g(\boldsymbol{R},\boldsymbol{\rho}_k) - w(\boldsymbol{R}) \right) d\Omega_R \ .$$

Теперь граничное условие (2) можно записать в виде

$$\int_{\Omega} \Lambda(\mathbf{r})g(\mathbf{r},\mathbf{R})\left(f(\mathbf{R}) - \sum_{k=1}^{Nq} q_k l(\mathbf{R})g(\mathbf{R},\boldsymbol{\rho}_k) - w(\mathbf{R}) \right) d\Omega_R + \sum_{k=1}^{Nq} q_k \Lambda(\mathbf{r})g(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho}_k) = \varphi(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Записав это соотношение для каждого из граничных узлов, получим недостающие $N_G = N_q$ линейных алгебраических уравнений. В результате образуется система из $N_n = N_u + N_G$ уравнений для N_u значений функций $w(\boldsymbol{r}_i)$ в N_u узловых точках $N_q = N_G$ зарядов q_k.

Ниже приводятся результаты решения тестовых задач, подтверждающих эффективность рассматриваемого методы при решении краевых задач для уравнений эллиптического типа.

Сначала решалась двумерная краевая задача. В области Ω, представляющей собой квадрат со стороной равной 2, центр которого совмещен с началом координат, решалась задача для уравнения

$$\Delta U(\mathbf{r}) + 2y^2 \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} + x^2 \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial y} + \sin(xy)U(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}), \ \boldsymbol{r} \in \Omega; \quad (7)$$

с условиями на границе $\partial\Omega$

$$U(\mathbf{r}) + \frac{xy}{4}\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} = \varphi(\mathbf{r}), \ \boldsymbol{r} \in \partial\Omega \, . \quad (8)$$

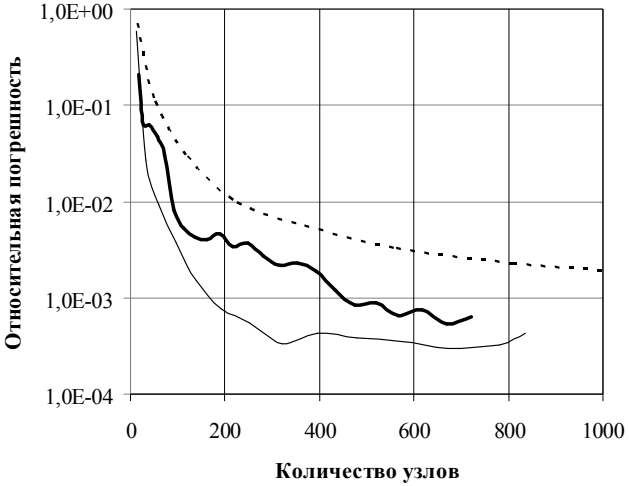
Функции $f(\mathbf{r})$ и $\varphi(\mathbf{r})$ в соотношениях (7), (8) подбирались таким образом, чтобы они соответствовали точному решению краевой задачи в виде: $U(\mathbf{r}) = U(x,y) = x^2 + y + \sin(xy)$. При решении краевой задачи оператору L в уравнении (1) соответствовал двумерный оператор Лапласа $L = \Delta$.

Далее решалась трехмерная задача Дирихле. В области Ω, представляющей собой куб со стороной равной 2, центр которого совмещен с началом координат, решалась задача для уравнения

$$\Delta U(\mathbf{r}) + 2y^2 \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} + x^2 \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial y} + \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial z} + \sin(xy) U(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}),\ \mathbf{r} \in \Omega. \qquad (9)$$

Функции в правой части уравнения (9) и в правой части условия Дирихле подбирались таким образом, чтобы они соответствовали точному решению в виде: $U(\mathbf{r}) = U(x, y, z) = x^2 + y + \sin(xy) - z$.

На рисунке представлены зависимости максимальных относительных погрешностей решаемых задач от количества используемых узлов. Жирная линия получена при аппроксимации интегралов в (5), (6) методом прямоугольников, тонкая – при использовании метода Гаусса с порядком 3. Пунктирная кривая представляет зависимость относительной погрешности трехмерной задачи для уравнения (9) от числа $N = N_n$. Видно, что при увеличении N погрешность решения обоих задач убывает достаточно быстро.



Зависимость максимальной относительной погрешности численного решения от количества узлов при решении двумерной и трехмерной краевой задачи

Полученные в данной работе результаты показывают, что поле, описываемое линейным уравнением эллиптического типа можно представить в виде суперпозиции полей точечных источников, удовлетворяющих более простому уравнению, решение которого нахо-

дится с помощью МТИ. Поэтому представленный численный метод можно рассматривать как обобщенный метод точечных источников поля (ОМТИ). Преимуществом ОМТИ по сравнению с традиционными методами численного решения краевых задач, таких как МКР или МКЭ, является возможность получения решения в аналитическом виде, что позволяет производить с этим решением соответствующие математические операции без заметной потери точности.

Литература

1. Fairweather G., Karageorghis A. The method of fundamental solutions for elliptic boundary value problems // Ad. Vol. Comput. Math. – 1998. – Vol. 9. – P. 69-95.

2. Бахвалов Ю.А., Князев С.Ю., Щербаков А.А., Щербакова Е.Е. Погрешность метода точечных источников при моделировании потенциальных полей в областях с различной конфигурацией //Изв. вузов. Электромеханика. – 2012. – № 5. – С. 17-21.

3. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е., Заиченко А.Н. Сравнительный анализ двух вариантов метода коллокаций при численном моделировании потенциальных полей // Изв. вузов. Электромеханика. – 2014. – № 1. – С. 17-19.

4. Князев С.Ю. , Щербакова Е.Е. Решение трехмерных краевых задач для уравнений Лапласа с помощью метода дискретных источников поля // Изв. вузов. Электромеханика.– 2015.– № 5.– С. 25-30.

5. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е., Енгибарян А.А. Численное решение краевых задач для уравнения Пуассона методом точечных источников поля // Вестник Донского гос. техн. унив-та. – 2014. – Т. 14. № 2 (77). – С. 15- 20.

6. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е., Заиченко А.Н. Численное решение краевых задач для неоднородных уравнений Гельмгольца методом точечных источников поля // Изв. вузов. Электромеханика. – 2014. – № 4. – С. 14-19.

7. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е., Щербаков А.А. Математическое моделирование полей упругих деформаций методом точечных источников поля // Математические методы в технике и технологиях – ММТТ. – 2015. – № 5 (75). – С. 21-23.

8. Князев С.Ю., Пустовойт В.Н., Щербакова Е.Е., Щербаков А.А. Моделирование трехмерных полей упругих деформаций с помощью метода точечных источников // Вестник Донского гос. техн. унив-та. – 2015. – Т. 15. № 4 (83). – С. 13- 23.

9. Князев С.Ю. Моделирование термомиграции с помощью метода граничных элементов и точечных источников поля // Изв. вузов. Электромеханика. – 2006. – № 5. – С. 11-15.

10. Лунин Л.С., Князев С.Ю., Середин Л.Ми др. Исследование стабильности термомиграции ансамбля линейных зон с помощью трехмерной компьютерной модели, построенной на основе метода точечных источников поля // Вестник Южного научного центра.– 2015. –Т. 11, № 4. – С. 9-15.

11. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е. Применение метода точечных источников поля с использованием фундаментальных решений, полученных численно // Изв. вузов. Электромеханика. – 2016. – № 5(547). – С. 5-10.

12. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е. Применение численных фундаментальных решений в методе точечных источников поля // Вестник Донского гос. техн. унив-та. – 2016. – Т. 16. № 4 (87). – С. 118- 125.

13. Князев С.Ю. Интегральное уравнение для численного решения стационарных квантово-механических задач // Вестник Донского гос. техн. унив-та. – 2016. – Т. 16. № 3 (86). – С. 79- 86.

14. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е. Метод численного решения стационарного уравнения Шредингера // Известия вузов. Физика. 2016. – Т. 59. № 10. – С. 87- 92.

15. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е. Решение уравнений эллиптического типа обобщенным методом точечных источников поля // Изв. вузов. Электромеханика. – 2017. Т. 60. – № 2. – С. 5-12.

THE GENERALIZED POINT-SOURCES METHOD IN SOLVING BOUNDARY VALUE PROBLEMS FOR ELLIPTIC EQUATIONS

S.Yu. Knyazev, E.E. Shcherbakova, A.A. Shcherbakov

Don State Technical University, Rostov-on-Don

The work objective is to develop a new universal numerical method for solving boundary value problems for linear elliptic equations. The proposed method is based on the transformation of the original mathematical physics equation to a simpler inhomogeneous equation with the known fundamental solution. To confirm the effectiveness of the proposed numerical method the two-dimensional and three-dimensional boundary value problems with the pre known solutions were resolved

Keywords: fundamental solution, the method of fundamental solutions, the point sources method, elliptic equation, boundary value problem

УДК 519.632; 539.182

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО ТИПА МЕТОДОМ КОЛЛОКАЦИЙ

С.Ю. Князев[1], Е.Е. Щербакова[1], А.А. Щербаков[2]

[1]Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону
[2]Новочеркасский электровозостроительный завод (НЭВЗ), Новочеркасск
ksy@donpac.ru

Показана возможность применения метода коллокаций при решении краевых задач для уравнений эллиптического типа. Для устранения плохой обусловленности системы уравнений, к которой приводится численное решение, корректируется расположение точек коллокации, производя случайным образом их небольшое смещение. Приводятся результаты решения двумерной и трехмерной тестовых задач, подтверждающих эффективность предложенной методики

Ключевые слова: уравнения эллиптического типа, краевая задача, метод коллокаций, число обусловленности, метод точечных источников

Численное решение трехмерных краевых задач для уравнений эллиптического типа может оказаться трудно разрешимой проблемой, даже если искомый потенциал является достаточно гладким. Определенные трудности могут возникнуть, если исходное уравнение не относится к стандартному типу уравнений математической физики, или если граничные условия содержат производные по нормали. В этих случаях численное решение краевой задачи с помощью метода конечных элементов (МКЭ) или метода конечных разностей (МКР) [1] может обладать слишком медленной сходимостью и не обеспечивать необходимую точность результата. В этих случаях можно попытаться решить краевую задачу с помощью метода коллокаций [2-3].

Пусть в области Ω с границей $\partial\Omega$ решается краевая задача для уравнения

$$L(\mathbf{r})U(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}),\ \mathbf{r} \in \Omega \qquad (1)$$

с условиями на границе $\partial\Omega$

$$\Lambda(\mathbf{r})U(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}),\ \mathbf{r} \in \partial\Omega, \qquad (2)$$

где L, $\Lambda(\mathbf{r})$ – линейные операторы в области Ω и на границе $\partial\Omega$; $f(\mathbf{r})$ и $g(\mathbf{r})$ – заданные функции в области Ω и на границе $\partial\Omega$. Пусть задана система линейно независимых функций $\{\varphi_i(\mathbf{r})\}$, обладающих в области Ω свойством полноты. Представим решение задачи (1), (2) в виде ряда $U(\mathbf{r}) = \sum_{i=0}^{\infty} C_i \varphi_i(\mathbf{r})$. Так как нахождение бесконечного числа коэффициентов разложения C_i практически невозможно, то будем искать приближенное решение задачи (1), (2) в виде конечной суммы

$$U_N(\mathbf{r}) = \sum_{i=0}^{N-1} c_i \varphi_i(\mathbf{r}). \qquad (3)$$

Располагаем в области Ω и на границе $\partial\Omega$ соответственно N_v и N_G узловых точек, точек коллокации. Общее число точек коллокации $N = N_v + N_G$ должно соответствовать числу коэффициентов в разложении (3). Координаты точек коллокации в области Ω обозначим $\mathbf{r}_k$, $k = 1 \div N_v$, а на границе $\partial\Omega$ $\mathbf{r}_k$, $k = (N_v + 1) \div N$. Для нахождения коэффициентов разложения c_i подставляем (3) в уравнение (1) и граничное условие (2) и требуем их точного выполнения в точках коллокации. В результате получается система линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{i=0}^{N-1} c_i L(\mathbf{r}_k)\varphi_i(\mathbf{r}_k) = f(\mathbf{r}_k), \quad k = 1 \div N_v, \qquad (4)$$

$$\sum_{i=0}^{N-1} c_i \Lambda(\mathbf{r}_k)\varphi_i(\mathbf{r}_k) = g(\mathbf{r}_k), \quad k = (N_v + 1) \div N. \qquad (5)$$

Основная проблема, возникающая при нахождении приближенного решения (3) связана с возможностью плохой обусловленности системы (4)-(5). Например, в [4] показано, что при интерполировании функции от двух переменных полиномами степени n определитель системы обращается в ноль, если узлы коллокации лежат на одной кривой порядка n. Аналогичный результат имеет место и для функций от трех переменных. Поэтому при регулярном, например, при равномерном расположении точек коллокации, избежать плохой обусловленности обычно не удается. Однако, если производить корректировку в расположении точек коллокации, производя случайным образом их небольшое смещение, то проблема, связанная с плохой обусловленностью системы (4)-(5), может быть устранена.

Ниже приведены результаты решения двумерной и трехмерной краевой задачи с помощью метода коллокации.

В области Ω, представляющей собой квадрат со стороной $l = 2$, центр которого совмещен с началом координат, решалось уравнение

$$\Delta U(\mathbf{r}) + \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} + \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial y} + \left(x + y^2\right) U(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}),\ \mathbf{r} \in \Omega \qquad (6)$$

с условиями на границе $\partial\Omega$

$$U(\mathbf{r}) - \frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{n}} = g(\mathbf{r}),\ \mathbf{r} \in \partial\Omega\,. \qquad (7)$$

Функции $f(\mathbf{r})$ и $g(\mathbf{r})$ в соотношениях (6), (7) подбирались таким образом, чтобы они соответствовали точному решению краевой задачи (6)-(7) в виде:

$$U(\mathbf{r}) = U(x, y) = 2 + y + \sin\left(x^2 + y^2\right).$$

Задавая в области Ω шаг по координате X равным h, x-координаты точек коллокации вычисляем с помощью соотношений

$$x_k = -l/2 + (k-1)h + 0{,}05(0{,}5 - rnd)h\,,\ k = 1 \div N_v\,,$$

где *rnd*- случайные числа из диапазона $0 \div 1$. Аналогичным образом задаются y- координаты и координаты узлов коллокации на границе $\partial\Omega$, а также узлы коллокации при решении трехмерной краевой задачи (см. ниже). Приближенное решение краевой задачи (4)-(5) искалось в виде полинома от двух переменных x, y, степени которого определялась полным числом точек коллокации N.

На рисунке представлена зависимость максимальной относительной погрешности от полного числа точек коллокации $N = N_n$ (жирная сплошная линия). Видно, что с ростом числа N от начального значения $N = 120$ до значения $N = 450$ погрешность решения уменьшается более чем на четыре порядка, от $\varepsilon_{max}=7{,}8\cdot10^{-3}$ до $\varepsilon_{max}=1{,}4\cdot10^{-8}$. При дальнейшем увеличении числа точек коллокации наблюдается слабый рост погрешности до значения $\varepsilon_{max}=4{,}5\cdot10^{-6}$ при $N = 1100$. Этот рост, видимо, связан с увеличением числа обусловленности, которое при $N = 1100$ имеет значение $C = 2{,}5\cdot10^{22}$.

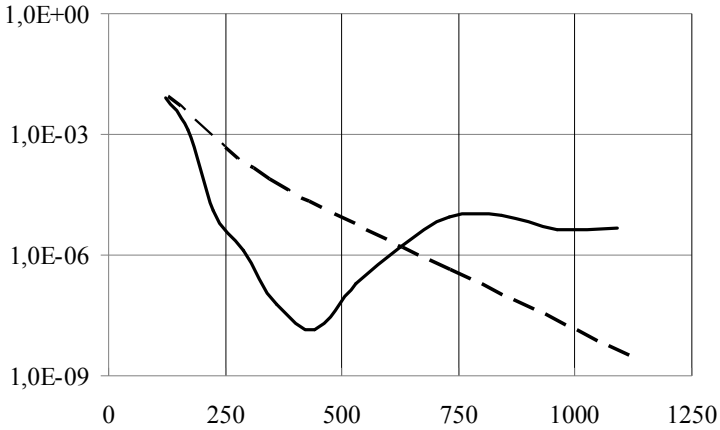
В области Ω, представляющей собой куб с ребром $l = 2$, решалась также трехмерная задачи Дирихле для уравнения

$$\Delta U(\mathbf{r}) + e^{3y}\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial x} + 2x^3\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial y} + 3\frac{\partial U(\mathbf{r})}{\partial z} + \left(x + y^2 + z^3\right)U(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}),\ \mathbf{r} \in \Omega\,. \qquad (8)$$

Функция $f(\mathbf{r})$ в правой части уравнения (8) подбиралась таким образом, чтобы она соответствовала точному решению задачи Дирихле для уравнения (8) в виде:

$$U(\mathbf{r}) = U(x, y, z) = x^2 + yz + + \sin y^2 .$$

Из рисунка видно, что погрешность численного решения трехмерной задачи убывает с ростом числа N по закону, близкому к экспоненциальному, достигая при N = 1100 значения $\varepsilon_{max}=2{,}4\cdot10^{-9}$. При этом число обусловленности имеет значение $C = 3{,}5\cdot10^{11}$, что значительно меньше, чем при решении двумерной задачи.



Зависимость максимальной относительной погрешности от количества точек коллокации для двумерной и трехмерной краевой задачи

Полученные результаты подтверждают возможность использования метода коллокации при решении не только двумерных, но и трехмерных краевых задач. По своим возможностям метод коллокаци, по видимому, близок к методу точечных источников поля (МТИ) [5-7]. Так же как и в МТИ решение с помощью метода коллокации (3) получается в аналитическом виде. Поэтому полученное решение можно без потери точности дифференцировать, производить с ним другие математические операции. Этим метод коллокации выгодно отличается от МКЭ и МКР.

Литература

1. Власова Е.А., Зарубин В.С., Кувыркин Г.Н. Приближенные методы математической физики: Учеб. для вузов. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001. – 700 с. (Сер. Математика в техн. университете; Вып. XIII).

2. Li ZC, Lu TT, Hu HY, Cheng AH-D. Trefftz and collocation methods. Southampton: MIT; 2007.

3. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е., Заиченко А.Н. Сравнительный анализ двух вариантов метода коллокаций при численном моделировании потенциальных полей // Изв. вузов. Электромеханика. – 2014. – № 1. – С. 17-19.

4. Березин, И.С. Методы вычислений / И.С. Березин , Н.П.Жидков. - Москва : Наука.- Т. 1. - 1966.- 632 с.

5. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е. Применение метода точечных источников поля с использованием фундаментальных решений, полученных численно // Изв. вузов. Электромеханика. – 2016. – № 5(547). – С. 5-10.

6. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е. Применение численных фундаментальных решений в методе точечных источников поля // Вестник Донского гос. техн. унив-та. – 2016. – Т. 16. № 4 (87). – С. 118- 125.

7. Князев С.Ю., Щербакова Е.Е. Решение уравнений эллиптического типа обобщенным методом точечных источников поля // Изв. вузов. Электромеханика. – 2017. Т. 60. – № 2. – С. 5-12.

NUMERICAL SOLUTION OF THREE – DIMENSIONAL BOUNDARY PROBLEMS FOR ELLIPTIC TYPE EQUATIONS BY COLLOCATION METHOD

S.Yu. Knyazev[1], E.E. Shcherbakova[1], A.A. Shcherbakov[2]

[1]Don State Technical University, Rostov-on-Don
[2] Novocherkassk Electric Locomotive Plant (NEVZ)

The aim of this work is to show the possibility of using the collocation method for solving boundary value problems for elliptic type equations. To eliminate the poor conditionality of the linear algebraic equations system, for which the numerical solution of the original problem is considered, the location of the collocation points is corrected by randomly generating a small displacement. The results of the solving two-dimensional and three-dimensional test problems, confirming the effectiveness of the proposed methodology are presented

Keywords: elliptic equations, boundary value problem, the collocation method, conditionality number, the point- sources method

СОДЕРЖАНИЕ

Абрамова О.П., Абрамов С.В. Поведение поля деформации связанных фрактальных структур с дырами 3

Абрамов В.С. Моделирование элементов крупномасштабных фрактальных структур Вселенной 11

Гетманова Е.Е. Особенности волн, формирующихся в цепочке несвязанных линейных осцилляторов 19

Бакулин П.А., Жога Л.В., Пиунов Е.М., Валешний И.В. Особенности формирования импульсов тока при постоянной механической нагрузке сегнетокерамической пластины в электрическом поле против вектора остаточной поляризации 26

Бакулин П.А., Жога Л.В., Пиунов Е.М., Гавришев В.В. Моделирование вида зависимости прочности сегнетокерамики от электрического поля изменением кинетических параметров разрушения 31

Балабан А.Л., Бахвалов Ю.А., Гречихин В.В. Электромагнитный расчет индукционного нагревателя забоя нефтяной скважины 37

Андронов И.Н., Богданов Н.П., Семиткина Е.В. Моделирование силового воздействия в сплавах с мартенситной неупругостью 43

Гудилов С.М. Моделирование магнитного поля дискообразного постоянного магнита 49

Заворотний А.А. Локальный четырехзондовый метод совместного измерения компонент тензора удельной электропроводности и коэффициента Холла в анизотропных полупроводниковых пленках 53

Заворотний А.А., Филиппов В.В. Математическое моделирование эффекта взаимовлияния контактов металл-анизотропный полупроводник на электрофизические характеристики друг друга 67

Филиппов В.В., Заворотний А.А., Мицук С.В., Лузянин С.Е. Распределение электрических полей при холловских измерениях в анизотропных полупроводниковых кристаллах 77

Зюбин А.С., Зюбина Т.С., Кравченко О.В., Соловьев М.В., Добровольский Ю.А. Выяснение механизма формирования диборана при гидролизе борогидрида магния с помощью квантово-химического моделирования 83

Зюбина Т.С., Джабиев Т.С., Зюбин А.С., Добровольский Ю.А. Механизм формирования озона при гидролизе гексагональных кластеров $(MnO)_3$, $(MnO)_6$ и $(Mn\ SO_4)_3$. Квантово-химическое моделирование 91

Зюбина Т.С., Зюбин А.С., Покатович Г.А., Варламов Д.А., Добровольский Ю.А., Волохов В.М., Волохов А.В., Амосова Е.С. Детали суперкомпьютерного моделирования Li-ионных источников тока новых типов 99

Засовская М.А. Моделирование процесса гидролиза тионилхлорида 107

Джимох С.О., Завьялов Д.В., Конченков В.И., Крючков С.В. Исследование энергетического спектра сверхрешетки, состоящей из чередующихся полосок однослойного и двухслойного графена 115

Романюк Д.А., Корнеев С.А., Корнеев В.С. Термодинамическое описание термомеханических свойств упругого элемента в квадратичном приближении по свободной энергии 123

Кожевникова П.В. Петрофизическое моделирование в нефтегазопромысловой геологии 131

Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Квантовохимическое исследование структурных изомеров k,k-дифтороктанов 136

Кунцев В.Е. Метод пассивной гидродинамической томографии проницаемого пласта 139

Приньков А.С., Трофимов Е.П. Представление уравнений математической физики в JSON-формате 147

Рапаков Г.Г., Лебедева Е.А., Абдалов К.А., Горбунов В.А. Исследование метода пространственных ассоциативных правил в задаче медико-экологического мониторинга 149

Серкова В.И. Методика оценки успешности прогноза геолого-технических мероприятий 157

Смирнов Ю.Г., Ивенина И.В. О возможности определения влагосодержания нефтепродуктов с использованием метода электрокинетической звуковой амплитуды 163

Климова И.В., Смирнов Ю.Г. Применение методов нечеткого моделирования для установления связи между величиной индекса неканцерогенной опасности и заболеваемостью персонала 169

Русских Г.С., Устинов Д.А. Обзор и классификация конструкций резинометаллических амортизаторов и методы их применения 181

Князев С.Ю., Щербакова Е.Е., Щербаков А.А. Обобщенный метод точечных источников поля в решении краевых задач для уравнений эллиптического типа 191

Князев С.Ю., Щербакова Е.Е., Щербаков А.А. Численное решение трехмерных краевых задач для уравнений эллиптического типа методом коллокаций 197

Научное издание

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XVIII Международного семинара
(г. Воронеж, 30 июня 2017 г.)

Часть 1

В авторской редакции

Подписано в печать 15.09.2017.
Формат 60×84/16. Бумага для множительных аппаратов.
Усл. печ. л. 12,3. Уч.-изд. л. 12,0. Тираж 350 экз.
Заказ № 113.

Отдел оперативной полиграфии ВГТУ
394006 Воронеж, ул. 20-лет Октября, 84