

ISSN 2077-3110

# **ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ**

**Материалы XX Международного семинара**

**Часть 1**

**Воронеж 2019**

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Российская академия наук

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный  
технический университет»

ФГБУН «Институт проблем химической физики РАН»

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XX Международного семинара  
(г. Воронеж, 1 декабря 2018 г.)

Часть 1

Воронеж 2019

УДК 53.072:519.673(06)

ББК 22.1я4

Ф503

**Физико-математическое моделирование систем:** материалы XX  
Ф503 Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2019. Ч. 1. 152 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.

УДК 53.072:519.673(06)

ББК 22.1я4

### 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*  
Е.Г. Андреева (ОмГТУ, г. Омск, Россия)  
И.С. Баткин (университет г. Оттава, Канада)  
А.И. Болдырев (университет шт. Юта, США)  
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)  
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)  
Ю.М. Чувильский (МГУ, г. Москва, 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

© ФГБОУ ВО «Воронежский государственный  
технический университет», 2019

## ПОЛЕ ДЕФОРМАЦИИ СВЯЗАННОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ С ЭЛЕМЕНТАМИ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО ТИПА

О. П. Абрамова, С. В. Абрамов

Донецкий национальный университет  
[oabramova@ua.fm](mailto:oabramova@ua.fm)

Методом численного моделирования исследовано поведение поля деформации связанной фрактальной структуры с элементами цилиндрического типа. Показано, что аттракторы структур зависят от переменных полуосей, перпендикулярных осям цилиндров. Наличие переменных полуосей и модулей приводит к стохастическому поведению комплексного поля деформации таких структур. Поле деформации связанной структуры также зависит от порядка следования отдельных операторов полей смещений.

Ключевые слова: связанные фрактальные структуры, аттракторы, комплексное поле деформации, упорядочение операторов, численное моделирование.

### Введение

Квантовая обработка информации, квантовые вычисления требуют использования законов квантовой механики [1] при создании квантовых компьютеров. При этом возникает необходимость теоретического и экспериментального моделирования явлений квантового перепутывания, квантовой телепортации, декогеренции квантовых состояний активных объектов [2]. В качестве активных объектов могут выступать различные наноструктуры и метаматериалы [3]. В [4, 5] изучены особенности стохастического состояния поля деформации связанных фрактальных многослойных наносистем, наноловушек, квантовых точек с учетом вариации переменных параметров. Исследованию взаимовлияния и упорядочения отдельных структур, аттракторов, стохастических процессов в связанной фрактальной структуре посвящены работы [6 - 9]. Целью данной работы является исследование поведения аттракторов и поля деформации связанных фрактальных структур с элементами цилиндрического типа.

### Связанная структура с элементами цилиндрического типа

Рассматривается фрактальная связанная структура (I, II), состоящая из двух фрактальных эллиптических цилиндров ( $i = 1, 2$ ), находящаяся в объемной дискретной решетке  $N_1 \times N_2 \times N_3$ , узлы которой задаются целыми числами  $n, m, j$ . По аналогии с [8, 9] нелинейные уравнения для безразмерной функции смещения  $u = u_2$  узла решетки имеют вид

$$u = u_2 = \sum_{i=1}^2 u_{Ri}; \quad u_{Ri} = R_i k_{ui}^2 (1 - 2 \operatorname{sn}^2(u_2 - u_{0i}, k'_{ui})); \quad (1)$$

$$k_{ui}^2 = (1 - \alpha_i) / Q_i; \quad k'_{ui} = (1 - k_{ui}^2)^{1/2}; \quad p_{0i} = p'_{0i} + p'_{1i}n + p'_{2i}m + p'_{3i}j; \quad (2)$$

$$Q_i = p_{0i} - b_{1i}(n - n_{0i})^2 / n_{ci}^2 - b_{2i}(m - m_{0i})^2 / m_{ci}^2 - b_{3i}(j - j_{0i})^2 / j_{ci}^2, \quad (3)$$

где  $u_0$  – постоянное (критическое) смещение;  $\alpha_i$  – фрактальная размерность поля деформации  $u$  вдоль оси  $Oz$  ( $\alpha_i \in [0,1]$ ); переменные модули  $k_u$  являются функциями от индексов  $n, m, j$  узлов объемной дискретной решетки; функции  $Q_i$  определяют вид фрактальной структуры, тип аттракторов и учитывают взаимодействие узлов, как в плоскости основной прямоугольной дискретной решетки  $N_1 \times N_2$ , так и межплоскостные взаимодействия. Параметры  $p_{0i}, p'_{3i}, b_{1i}, b_{2i}, b_{3i}, n_{0i}, n_{ci}, m_{0i}, m_{ci}, j_{0i}, j_{ci}$  характеризуют различные фрактальные структуры;  $R_i$  определяют ориентацию полей деформации отдельных структур в связанной системе. В общем случае все параметры могут зависеть от индекса слоя  $j$  и безразмерного времени  $t$ . Особые точки (аттракторы) поля деформации связанной фрактальной структуры располагаются на поверхности, ядро которой определяется из условия

$$Q_1 \cdot Q_2 = 0. \quad (4)$$

Если поверхность (4) пересечь плоскостью  $j = j_k$ , то получим уравнение изолиний. Учет межплоскостных взаимодействий (зависимостей от  $j$ ) приводит к изменению постоянных полуосей ( $n_{ci}, m_{ci}$ ) в (3) на переменные ( $n'_{ci}, m'_{ci}$ ) полуоси эллиптических цилиндров

$$(n'_{ci})^2 = a_{1i}n_{ci}^2; \quad (m'_{ci})^2 = a_{2i}m_{ci}^2. \quad (5)$$

При моделировании зависимости  $a_{1i}, a_{2i}$  определялись в виде

$$\begin{aligned} a_{1i} &= 1 + (p'_{1i}n + p'_{2i}m + p'_{3i}j) / p'_{0i} - b'_{3i}(j - j_{0i})^2 / (j_{ci}^2 p'_{0i}); \\ a_{2i} &= 1 + (p''_{1i}n + p''_{2i}m + p''_{3i}j) / p''_{0i} - b''_{3i}(j - j_{0i})^2 / (j_{ci}^2 p''_{0i}). \end{aligned} \quad (6)$$

Отметим, что при решении реальных задач зависимости (6) должны определяться экспериментально. Наличие переменных полуосей приводит к изменению аттракторов (4), при этом функции  $Q_i$  моделируем выражениями

$$Q_i = a_{0i}(p'_{0i} - b_{1i}(n - n_{0i})^2 / (n'_{ci})^2 - b_{2i}(m - m_{0i})^2 / (m'_{ci})^2); \quad a_{0i} = 1. \quad (7)$$

При численном моделировании полагалось, что  $N_1=240, N_2=240, \alpha_i=0.5, u_{0i}=29.537, p_{0i}=1.0423, b_{1i}=b_{2i}=1, n_{0i}=121.1471, m_{0i}=120.3267, n_{c1}=m_{c1}=57.4327, n_{c2}=m_{c2}=28.7164, j_{0i}=31.5279, j_{ci}=11.8247, p'_{1i}=p'_{2i}=0, p'_{3i}=0.1368, p''_{3i}=0.1547, b'_{31}=b''_{31}=0, b'_{32}=1, b''_{32}=-1$ . На рис. 1 дано поведение аттракторов, полученное на основе выражений (4) – (7). Из выражений (5) следует, что изменение поведения функций  $a_{1i}, a_{2i}$  от  $j$  (рис. 1 а) приводит к существенному изменению полуосей внутреннего цилиндра (кривые 3, 4) при постоянных полуосях внешнего цилиндра (кривые 1, 2).

При  $a_{1i}=a_{2i}=1$  значения полуосей не зависят от  $j$ . В этом случае аттракторы представляют собой две концентрические окружности (рис. 1 б). При

изменении  $j$  форма аттракторов существенно меняется (рис. 1 в – рис. 1 и), что свидетельствует о взаимовлиянии отдельных структур между собой и изменении формы сечений цилиндров, перпендикулярных основной оси.

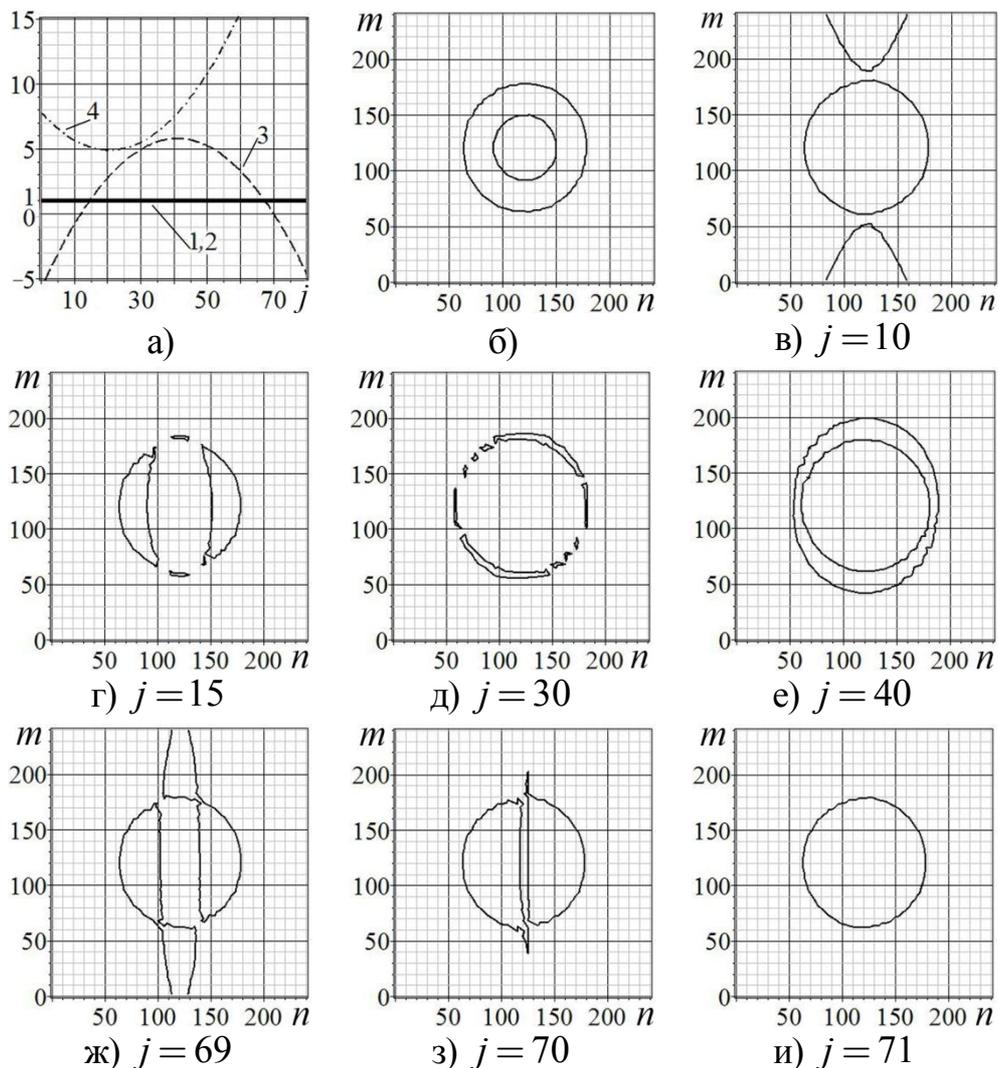


Рис. 1. Поведение аттракторов: (а) кривые 1, 2, 3, 4 – функции  $a_{11}$ ,  $a_{21}$ ,  $a_{12}$ ,  $a_{22}$ ; (б) для постоянных полюсов  $n_{ci}$ ,  $m_{ci}$ ; (в-и) для переменных полюсов  $n'_{ci}$ ,  $m'_{ci}$

Наличие переменных полюсов приводит к существенным изменениям поведения поля деформации  $u$  связанной системы из (1) – (3): кроме реальной части смещений  $\text{Re}u$  появляется мнимая часть  $\text{Im}u$ . Явный вид результирующей стохастической поверхности существенно зависит от порядка следования отдельных слагаемых в сумме (1), которые могут быть интерпретированы как отдельные операторы, описывающие суммарный стохастический процесс [8, 9]. Появление стохастичности также связано с наличием переменных модулей  $k_{ui}$ ,  $k'_{ui}$  (2). В данной работе итерационная процедура по индексу  $n$  моделирует стохастический процесс на прямоугольной решетке с размерами  $N_1 \times N_2$ .

В качестве примера на рис. 2 приведено поведение  $\text{Re}u$  и  $\text{Im}u$  безразмерной функции смещения  $u$  связанной структуры (I, II), состоящей из двух фрактальных круговых цилиндров с постоянными полуосями: структура I – внешний цилиндр с полуосями  $n_{c1} = m_{c1}$ ; структура II – внутренний цилиндр с полуосями  $n_{c2} = m_{c2}$ . Связанной фрактальной структуре (I, II) в выражениях (1) соответствует упорядоченный оператор

$$u = u_{R1} + u_{R2}. \quad (8)$$

Аттрактор данной структуры приведен на рис. 1 б. Поле деформации такой структуры является существенно стохастическим вдоль границ круговых цилиндров и между ними. Волнообразный характер поведения  $\text{Re}u$  (рис. 2 в) вне границы внешнего цилиндра объясняется наличием переменных модулей  $k_u$  в выражениях (1). Мнимая часть функции смещения  $\text{Im}u$  (рис. 2 г, д, е) свидетельствует о наличии эффективного затухания.

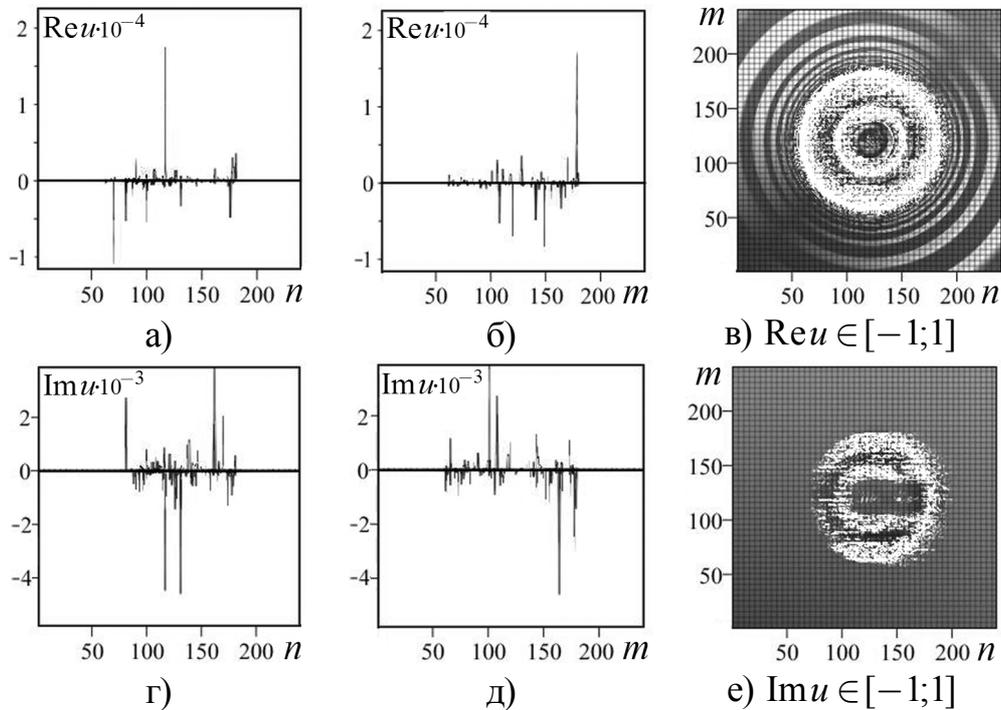


Рис. 2. Поведение поля деформации  $u$  связанной системы (I, II): (а, б, г, д) – проекции на плоскости  $nOu$ ,  $mOu$ ; (в, е) – сечения (вид сверху)

Перестановка отдельных операторов полей смещений в связанной цилиндрической структуре (I, II) приводит к структуре (II, I), которой соответствует упорядоченный оператор

$$u = u_{R2} + u_{R1}. \quad (9)$$

При этом стохастический процесс изменяется, что приводит к отклонению

$$\delta u = (u_{R1} + u_{R2}) - (u_{R2} + u_{R1}) \neq 0 \quad (10)$$

поля деформации, реализуемого в процессе итераций. Наблюдаются комплексные отклонения  $\text{Re} \delta u \neq 0$ ,  $\text{Im} \delta u \neq 0$  (рис. 3). На фоне стохастических пиков

для  $\text{Im} \delta u$  характерно наличие шумовой дорожки (рис. 3 г, д). Причем, уровень шума (амплитуда шума для  $\text{Im} \delta u$ ) приблизительно равна  $5 \cdot 10^{-24}$ , что находится вблизи теоретического значения  $0.497889116 \cdot 10^{-23} = 3 / N_a$ , где  $N_a = 6.025438 \cdot 10^{23}$  – число Авагадро. Эта шумовая дорожка представляет собой стохастическое кольцо, внутренность которого является регулярной областью (рис. 3 е).

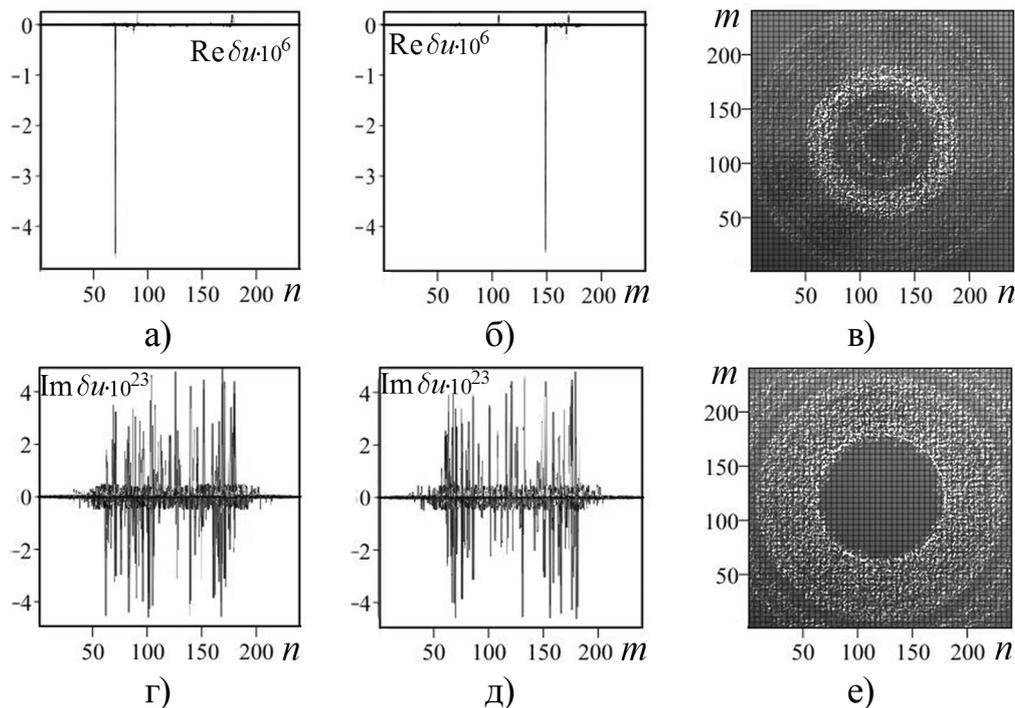


Рис. 3. Поведение разности функций смещения  $\delta u$ : (а, б, г, д) – проекции на плоскости  $nOu$ ,  $mOu$ ; сечения (вид сверху) (в)  $\text{Re} \delta u \in [-10^{-8}; 10^{-8}]$ , (е)  $\text{Im} \delta u \in [-10^{-23}; 10^{-23}]$

### Выводы

Для связанной фрактальной структуры, состоящей из элементов цилиндрического типа, исследовано поведение аттракторов и поля деформации. Различные формы аттракторов свидетельствуют о взаимовлиянии отдельных структур между собой и изменении сечений (переменные полуоси), перпендикулярных основной оси цилиндров.

На примере связанной фрактальной структуры из двух круговых цилиндров с постоянными полуосями показано, что поле деформации является комплексным. Поле деформации такой структуры является существенно стохастическим вдоль границ круговых цилиндров и между ними. Волнообразный характер поведения реальной части функции смещения  $\text{Re} u$  вне границы внешнего цилиндра объясняется наличием переменных модулей  $k_u$ . Мнимая часть функции смещения  $\text{Im} u$  свидетельствует о наличии эффективного затухания.

Явный вид результирующей стохастической поверхности существенно зависит от порядка следования отдельных слагаемых в сумме (1), которые могут быть интерпретированы как отдельные операторы, описывающие суммарный стохастический процесс. Наблюдаются комплексные отклонения  $\text{Re}\delta u \neq 0$ ,  $\text{Im}\delta u \neq 0$ . На фоне стохастических пиков для  $\text{Im}\delta u$  характерно наличие шумовой дорожки. Эта шумовая дорожка представляет собой стохастическое кольцо, внутренность которого является регулярной областью.

Результаты могут быть использованы при описании нейронных сетей с переменными параметрами, в медицине при моделировании кровеносных сосудов, для квантовой обработки информации.

#### Литература

1. Nielsen M. and Chuang I. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press, New York, 2010. 698 p.
2. Boumeister D., Eckert A., Zeilinger A. Physics of Quantum Information. Springer, New York, 2001. 325 p.
3. Нелинейности в периодических структурах и метаматериалах / под ред. Ю.С. Кившаря и Н.Н. Розанова. М.: Физматлит, 2014. 384 с.
4. Абрамов В.С. Квантовые точки во фрактальной многослойной наносистеме // Известия РАН. Сер. Физическая. 2017. Т. 81, № 5. С. 625–632.
5. Абрамов В.С. Активные наноэлементы с переменными параметрами во фрактальных квантовых системах // Известия РАН. Сер. Физическая. 2018. Т. 82, № 8. С. 1167–1172.
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. Взаимовлияние аттракторов и отдельных стохастических процессов в связанных фрактальных структурах // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. 2017. № 1. С. 50-60.
8. Абрамова О.П. Упорядочение операторов полей смещений отдельных квантовых точек, эллиптических цилиндров в связанных фрактальных структурах // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. 2018. № 1. С. 3-14.
9. Абрамова О.П., Абрамов С.В. Влияние упорядочения операторов полей смещений отдельных квантовых точек на поле деформации связанной фрактальной структуры // ФММС: материалы XIX Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «ВГТУ», 2018. С. 3-10.

## THE DEFORMATION FIELD OF THE COUPLED FRACTAL STRUCTURE WITH ELEMENTS OF CYLINDRICAL TYPE

O. P. Abramova, S. V. Abramov

Donetsk National University

By the numerical modelling method the behavior of the deformation field of the coupled fractal structure with elements of cylindrical type was investigated. It is shown that the attractors of the structures depend on variable semiaxes, which are perpendicular to the axes of the cylinders. The presence of variable semiaxes and modules lead to the stochastic behavior of the complex deformation field of such structures. The deformation field of the coupled structure also depends on the ordering of the displacement fields separate operators.

Keywords: coupled fractal structures, attractors, complex deformation field, ordering of operators, numerical modelling.

## ВЗАИМОСВЯЗИ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛЬНОГО НАНООБЪЕКТА И ФРАКТАЛЬНЫХ КОСМОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

В. С. Абрамов

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина  
[vsabramov@mail.ru](mailto:vsabramov@mail.ru)

Теоретически исследуются взаимосвязи основных параметров модельного нанобъекта и фрактальных космологических объектов типа черных дыр, нейтронных звезд. На примере кварцевой наночастицы, захваченной в оптическую ловушку и помещенной в вакуум, получены оценки предельной частоты вращения частицы в лазерном поле с круговой поляризацией, размера наночастицы. На примере атомных дефектов в нанотрубках нитрида бора получены оценки длин волн квантовой эмиссии отдельных фотонов. Свойства наночастиц зависят от давления, состояния физического вакуума и космологических параметров.

Ключевые слова: модельный нанобъект, фрактальные космологические объекты, оптические ловушки, наночастицы, частота вращения, физический вакуум.

### Введение

Лауреатами Нобелевской премии по физике 2018 года стали А. Эшкин, Ж. Мору и Д. Стрикленд за открытия в области лазерных технологий. А. Эшкин предложил использовать оптические ловушки, разработал технологию "оптического пинцета", которая позволяет манипулировать нанобъектами с помощью лазера [1]. Ж. Мору и Д. Стрикленд изучали сжатие усиленных чирпированных оптических импульсов [2]. Для сжатия импульсов используется отражение от дифракционных решеток. При этом использование периодических структур и метаматериалов [3] приводит к различным нелинейным эффектам. Фемтосекундная лазерная когерентная спектроскопия позволяет выявить особенности поведения активных объектов в таких нелинейных системах [4]. В [5] в качестве активного объекта исследуется кварцевая наночастица в вакууме, захваченная в оптическую ловушку. При этом спиновый момент импульса лазерного света передается механическому угловому моменту частицы. Возникает вращение одиночных 100 нм частиц на частотах порядка 1 ГГц. Атомноподобные дефекты в двумерном гексагональном нитриде бора (hBN) в последнее время стали перспективными для квантовой информатики. В [6] исследуется однофотонная квантовая эмиссия из атомных дефектов в нанотрубках нитрида бора (BNNT). Эта система проявляет высокую стабильность при комнатной температуре, что является привлекательным для создания различных оптико-механических приборов.

С другой стороны, такие наночастицы [5, 6] являются модельными нанобъектами [7] для изучения физических свойств вакуума. Привлечение гипотезы иерархического строения Вселенной [8, 9] дает возможность использовать эти экспериментальные результаты в космологии при исследовании анизотроп-

ных моделей [10] фрактальных космологических объектов, сверхизлучения [10, 11] гравитационных волн, реликтовых фотонов от бинарных черных дыр, нейтронных звезд, природы частиц темной материи и темной энергии [12, 13]. При описании различных нелинейных физических моделей возникают особые точки (аттракторы), линии, поверхности, особые объемные структуры (странные аттракторы). Многие физические свойства вблизи указанных особенностей носят стохастический характер, возникает необходимость моделирования стохастических процессов. Аттракторы и поле деформации, взаимовлияние аттракторов и стохастических процессов в связанных фрактальных многослойных наносистемах исследовались в работах [14 - 16].

Целью данной работы является описание основных характеристик модельного нанообъекта и их связей с параметрами фрактальных космологических объектов.

### Описание модельного нанообъекта

Для описания основных характеристик модельной наночастицы используем связи энергий покоя бозона Хиггса  $E_{H0}=125.03238$  ГэВ и гравитационного поля  $E_G=12.11753067$  мкэВ из работ [10, 11]

$$E_{H0} / E_G = \nu_{H0}^* / \nu_{G0} = N_{HG}; \quad E_G / \nu_{G0} = E_{H0} / \nu_{H0}^* = 2\pi\hbar. \quad (1)$$

Здесь  $\hbar$  – постоянная Планка. С учетом выражений (1) находим параметр  $N_{HG} = 1.031830522 \cdot 10^{16}$ . Численные значения характерных частот равны  $\nu_{G0} = 2.9304515$  ГГц,  $\nu_{H0}^* = 3.0237293 \cdot 10^{25}$  Гц. На основе этих характерных частот находим частоты гравитона  $\nu_G = \nu_{G0} / N_a$  и эффективного бозона Хиггса  $\nu_{H0} = \nu_{H0}^* / N_a$ . Здесь число Авагадро  $N_a = 6.025438 \cdot 10^{23}$ . Численные значения  $\nu_G = 4.8634664 \cdot 10^{-15}$  Гц,  $\nu_{H0} = 50.182731$  Гц.

Для ускоренно расширяющейся Вселенной в [9] получены основные соотношения связей параметра  $|\xi_{0H}|^2$  с массами покоя эффективного атома  $m_H$  и бозона Хиггса  $M_{H0}$  в виде

$$|\xi_{0H}|^2 = m_H / M_{H0} = M_H / m_{H0} = E_H / E_{H0} = R_H / R_{H0}; \quad M_{Ha} = N_a M_H; \\ M'_{H0} = N_a m_{H0}; \quad R_H = 2GM_{Ha} / c_0^2; \quad R_{H0} = 2GM'_{H0} / c_0^2. \quad (2)$$

Здесь  $M_H = N_a m_H = 24.41158758$  г и  $m_{H0} = N_a M_{H0} = 134.2770693$  г – молярные массы эффективного атома и бозона Хиггса;  $E_H = 22.73090194$  ГэВ – энергия покоя эффективного атома;  $R_H = 21.84067257$  мкм,  $R_{H0} = 120.1356321$  мкм допускают интерпретацию радиусов Шварцшильда черных дыр с массами  $M_{Ha}$ ,  $M'_{H0}$ ;  $G = 6.672 \cdot 10^{-8}$  см<sup>3</sup>г<sup>-1</sup>с<sup>-2</sup> – гравитационная постоянная Ньютона;  $c_0$  – скорость света в вакууме. С учетом численного значения  $|\xi_{0H}|^2 = 0.181800122$  из (2) в [9] были получены основные спектральные параметры теории

$$|S'_{01}| = 0.039541282, S'_{02} = 0.03409, S'_{03} = 0.460458718, S'_{04} = 0.53409. \quad (3)$$

Радиусы  $R_H$ ,  $R_{H0}$  являются характерными параметрами, которые необходимо учитывать при моделировании активных микрообъектов и их использовании в лазерных нанотехнологиях. Возникает необходимость захвата, движения, перемещения, вращения наночастиц лазерным полем. В [5] вращение наночастицы в форме гантели достигалось лазером с круговой поляризацией. Лазер с линейной поляризацией заставляет вибрировать наночастицу. В нашей модели для оценки предельной частоты вращения наночастицы используем выражение

$$\nu_{rot} = 2Q_{H3} |\chi_{ef}| \nu_{G0}. \quad (4)$$

Здесь параметр  $Q_{H3} = 0.700790572$  определяет положения точки перегиба для функции  $Q_G$ , локального минимума для функции  $V_Q$ , нуля функции  $A_Q$  из работы [9] для модели ускоренно расширяющейся Вселенной. Параметр  $|\chi_{ef}| = 0.250425279$  описывает эффективную восприимчивость в анизотропной модели фрактальных космологических объектов [10, 11]. На основе выражения (4) находим оценку  $\nu_{rot} = 1.0285631$  ГГц, которая находится вблизи экспериментально [5] полученной частоты  $1.029$  ГГц при давлении  $7.2 \cdot 10^{-6}$  мбар. Частота вращения зависит от давления. Экспериментально [5] при давлении  $1.1 \cdot 10^{-5}$  мбар фиксируется сигнал при  $1.31$  ГГц, что соответствует частоте вращения  $655$  МГц. В нашей модели частота вращения  $\nu'_{c2}$  и плотность холодной темной материи  $\Omega'_{c2}$  определяются из выражений [10]

$$\nu'_{c2} = \Omega'_{c2} \nu_{G0}; \quad \Omega'_{c2} = \nu_{\gamma b}^2 / 4 |\lambda|^2 N; \quad \nu_{\gamma b}^2 = v_0^2 / \Omega'_{c2}. \quad (5)$$

Здесь частота  $\nu_{\gamma b} = 3.974973236$  ГГц,  $\Omega'_{c2} = 0.224091707$ , эффективная скорость Ферми  $\nu_{\gamma b} = 14.34353643 \cdot 10^6$  см  $\cdot$  с $^{-1}$ , связанные с нейтронными звездами; скорость  $v_0 = 6.783540245 \cdot 10^6$  см  $\cdot$  с $^{-1}$  в модели плоской космологии. С учетом (5) находим численные значения  $\nu'_{c2} = 656.6899$  МГц,  $2\nu'_{c2} = 1.3133798$  ГГц, которые близки к указанным выше значениям частот из эксперимента [5]. Это указывает на существенную роль давления при изменении частоты вращения наночастицы, зависимости ее свойств от состояния физического вакуума и космологических параметров.

Для описания других характеристик модельного нанобъекта запишем выражения для основных энергий

$$\varepsilon_{G00} = N'_0 E_G |\xi_{0H}|^2; \quad \varepsilon_{G01} = N'_{01} E_G |\xi_{0H}|^2; \quad \varepsilon_{G02} = N'_{02} E_G |\xi_{0H}|^2; \quad (6)$$

$$E_{g00} = z'_\mu \varepsilon_{G00} = z'_\mu n_G \varepsilon_{\mu 00}; \quad E_{g01} = z'_\mu \varepsilon_{G01} = z'_\mu n_G \varepsilon_{\mu 01}; \quad E_{g02} = z'_\mu \varepsilon_{G02} = z'_\mu n_G \varepsilon_{\mu 02}.$$

Параметры  $N'_0 = 3.73846796 \cdot 10^5$  и  $N'_{01} = 3.795550194 \cdot 10^5$ ,  $N'_{02} = 3.680500523 \cdot 10^5$  учитывают наличие Бозе конденсата и поля Хиггса [9]. На основе (6) находим численные значения  $\varepsilon_{G00} = 823.5727356$  мэВ,  $\varepsilon_{G01} = 836.1477723$  мэВ,  $\varepsilon_{G02} = 820.8026915$  мэВ. Далее с учетом космологического красного смещения  $z'_\mu = 7.184181$  [9] и числа квантов  $n_G = 3$ , которые переносятся гравитационными волнами [10, 11], на основе (6) находим остальные энергии  $E_{g00} = 5.916695599$  эВ,  $E_{g01} = 6.007036939$  эВ,  $E_{g02} = 5.824953291$  эВ;  $\varepsilon_{\mu00} = 274.5242452$  мэВ,  $\varepsilon_{\mu01} = 278.7159241$  мэВ,  $\varepsilon_{\mu02} = 270.2675638$  мэВ. Отметим, что энергия  $E_{g00}$  близка к энергетической щели 5.95 эВ для атомных дефектов в нанотрубках нитрида бора (BNNT) [6], из которых экспериментально наблюдали эмиссию отдельных фотонов.

На основе энергий из (6) и спектральных параметров (3) находим энергетические спектры

$$\varepsilon_{g0x} = E_{g00}S'_{0x}; \quad \varepsilon_{g1x} = E_{g01}S'_{0x}; \quad \varepsilon_{g2x} = E_{g02}S'_{0x}; \quad (7)$$

$$\varepsilon_{G0x}^* = \varepsilon_{G00}S'_{0x}; \quad \varepsilon_{G1x}^* = \varepsilon_{G01}S'_{0x}; \quad \varepsilon_{G2x}^* = \varepsilon_{G02}S'_{0x}; \quad (8)$$

$$\varepsilon_{\nu0x} = \varepsilon_{\mu00}S'_{0x}; \quad \varepsilon_{\nu1x} = \varepsilon_{\mu01}S'_{0x}; \quad \varepsilon_{\nu2x} = \varepsilon_{\mu02}S'_{0x}. \quad (9)$$

Спектр (7) дает возможность выполнить оценки для среднего диаметра точечного дефекта  $d_a$ , рамановского сдвига  $1/\lambda_{RS}$  в спектре BNNT по формулам

$$2d_a = \lambda_{g24} |\chi_{ef}|; \quad \lambda_{RS} = 2\pi n_G (1 + \Omega_{0\nu}) \lambda_{g14}; \quad \lambda_{g24} = a_\lambda / \varepsilon_{g24}; \quad \lambda_{g14} = a_\lambda / \varepsilon_{g14}.$$

Здесь постоянный параметр  $a_\lambda = 1239644.01$  мэВ·нм, плотность нейтрино  $\Omega_{0\nu} = 0.002939801$  [10, 11]. Численные значения  $d_a = 49.892844$  нм и  $2d_a = 99.785688$  нм близки к средним оценкам размеров наночастиц 50 нм и 100 нм из работ [6] и [5], соответственно. Рамановский сдвиг  $\lambda_{RS} = 7304.6019$  нм практически совпадает со значением  $1/\lambda_{RS} = 1369$  см<sup>-1</sup> из эксперимента [6]. Далее находим разность энергий между ветвями спектра (7)  $\delta\varepsilon_{g1} = \varepsilon_{g13} - \varepsilon_{g12} - \varepsilon_{g21} = 2330.886518$  мэВ и соответствующую длину волны  $\lambda_{\delta1} = a_\lambda / \delta\varepsilon_{g1} = 531.8337$  нм. Указанный переход между ветвями спектра с длиной волны  $\lambda_{\delta1}$  близок к длине волны 532 нм возбуждающего зеленого лазера из [6]. Переход с разностью энергий  $\delta\varepsilon_{g1} / 2 = 1165.443259$  мэВ и длиной волны  $2\lambda_{\delta1} = 1063.6674$  нм близок к длине волны 1064 нм лазера, используемого в [6] для оптической модуляции. В работе [6] были получены два различных дефекта в BNNT (два эмиттера) для наблюдения фотолюминесценции. Максимальное излучение отдельных фотонов из этих эмиттеров было получено на длинах волн 571 нм и 569 нм. В нашей модели разности энергий между ветвями спектра (7) и соответствующие длины волн равны:

$$\delta\varepsilon_{g2} = \varepsilon_{g13} - 3\varepsilon_{g22} = 2170.274555 \text{ мЭВ}, \quad \lambda_{\delta 2} = a_{\lambda} / \delta\varepsilon_{g2} = 571.19225 \text{ нм}; \quad (10)$$

$$\delta\varepsilon_{g3} = \varepsilon_{g13} - 3\varepsilon_{g22} + \varepsilon_{g11} - \varepsilon_{g21} = 2177.474377 \text{ мЭВ}, \quad \lambda_{\delta 3} = a_{\lambda} / \delta\varepsilon_{g3} = 569.3036 \text{ нм}.$$

Эти значения близки к экспериментальным данным для эмиттеров [6].

Ветви спектра (9) находятся внутри запрещенной зоны спектра (7) и зависят от температуры. Стабильная квантовая эмиссия фотонов наблюдается в широкой области температур, включая комнатную. Оценка верхней границы для температуры порядка 800 К [6]. С учетом энергетического спектра (9) находим оценку верхней границы температуры по формуле

$$T_{\nu s} = a_T (\varepsilon_{\nu 13} + \varepsilon_{\nu 12}) = 799.84687 \text{ К}; \quad a_T = 5.802778417 \text{ К} \cdot (\text{мЭВ})^{-1}. \quad (11)$$

На основе соотношений из [10, 11] для космологических фрактальных объектов, учитывающих модель сверхизлучения Дикке, запишем выражения для отношения ускорений

$$g_0 / g_{SE} = n_G (z'_{A2} - z'_{\mu} + I_m I_0^{-1}) / 2. \quad (12)$$

Здесь ускорение свободного падения на поверхности Земли  $g_0 = 980.665 \text{ см} \cdot \text{с}^{-2}$ ;  $g_{SE}$  – ускорение Земли к Солнцу; обычное красное смещение  $z'_{A2} = 1034.109294$ ; отношение максимальной  $I_m$  к начальной  $I_0$  интенсивностей излучения  $I_m I_0^{-1} = 81.06580421$ . С учетом выражения (12) находим численное значение  $g_{SE} = 0.590056 \text{ см} \cdot \text{с}^{-2}$ . С учетом основного параметра  $n_{A0} = 58.04663887$  для черных дыр из [10, 11], параметра  $N_{HG}$  из (1) на основе условия

$$g_{SE} N_{HG} = g_{nS} n_{A0} \quad (13)$$

находим оценку гравитационного ускорения  $g_{nS} = 1.0488769 \cdot 10^{12} \text{ м} \cdot \text{с}^{-2}$  на поверхности нейтронной звезды, которая согласуется с оценкой  $10^{12} \text{ м} \cdot \text{с}^{-2}$  из [5].

### Выводы

На основе гипотезы иерархического строения Вселенной установлены связи параметров фрактальных космологических объектов типа черных дыр, нейтронных звезд и модельного нанобъекта. В качестве активного нанобъекта рассмотрена кварцевая наночастица, захваченная в оптическую ловушку и помещенная в вакуум. Получены оценки размера этой наночастицы и предельной частоты вращения в лазерном поле с круговой поляризацией. Показано, что частота вращения зависит от свойств физического вакуума. В качестве других активных нанобъектов рассмотрены атомные дефекты в нанотрубках нитрида бора. Получены оценки длин волн квантовой эмиссии отдельных фотонов от таких эмиттеров.

### Литература

1. Ashkin A. Optical Trapping and Manipulation of Neutral Particles Using Lasers. World Scientific Publishing Company. 2006. – 940 p.
2. Strickland D., Mourou G. Compression of amplified chirped optical pulses // Optics Communications. 1985. Vol. 56. No. 3. – P. 219-221.

3. Нелинейности в периодических структурах и метаматериалах / под ред. Ю. С. Кившаря и Н. Н. Розанова. М.: Физматлит, 2014. – 384 с.
4. Самарцев В. В., Никифоров В. Г. Фемтосекундная лазерная спектроскопия. М.: Тривант. 2017. – 401 с.
5. Reimann R., Doderer M., Hebestreit E. et al. GHz Rotation of an Optically Trapped Nanoparticle in Vacuum. arXiv:1803.11160v2 [physics.optics] 21 Jul 2018. 5 p.
6. Ahn J., Xu Z., Bang J. et al. Stable emission and fast optical modulation of quantum emitters in boron nitride nanotubes. arXiv:1806.06146v1 [quant-ph] 15 Jun 2018. 4 p.
7. Абрамов В. С. Активные наноэлементы с переменными параметрами во фрактальных квантовых системах // Известия РАН. Сер. Физическая. 2018. Т. 82, № 8. – С. 1167–1172.
8. Abramov V. Higgs Field and Cosmological Parameters in the Fractal Quantum System / XI International Symposium on Photon Echo and Coherent Spectroscopy (PECS-2017). EPJ Web Conf. 2017. 161, 02001. 2 p.
9. Abramov V.S. Cosmological Parameters and Higgs Boson in a Fractal Quantum System / CMSIM Journal. 2017. No 3. – P. 441-455.
10. Абрамов В. С. Анизотропная модель и переходные сигналы от бинарных космологических объектов: черных дыр, нейтронных звезд // Вестник ДонНУ. Сер. А: Естественные науки. 2018. № 1. – С. 55-68.
11. Абрамов В. С. Сверхизлучение в анизотропных моделях фрактальных космологических объектов // Материалы XIII Международной научной школы «Наука и инновации-2018» (Йошкар-Ола, 2-8 июля 2018 г.). – С. 27-39.
12. Hooper D. The empirical case for 10-GeV dark matter // Dark Universe. 2012. No 1. – P. 1-23.
13. Suh P. K. Dark Matter and Energy in the Universe of Symmetric Physics // IJARPS. 2018. V. 5. – P. 19-34.
14. Abramova O. P., Abramov A. V. Attractors and Deformation Field in the Coupled Fractal Multilayer Nanosystem // CMSIM Journal. 2017. No 1. – P. 16-26.
15. Абрамова О. П. Взаимовлияние аттракторов и отдельных стохастических процессов в связанных фрактальных структурах // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. 2017. № 1. – С. 50-60.
16. Абрамова О. П. Упорядочение операторов полей смещений отдельных квантовых точек, эллиптических цилиндров в связанных фрактальных структурах // Вестник Донецк. ун-та. Сер. А. 2018. № 1. – С. 3-14.

## RELATIONSHIPS OF THE PARAMETERS OF A MODEL NANOOBJECT AND FRACTAL COSMOLOGICAL OBJECTS

V. S. Abramov

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

Theoretically the relationships between the basic parameters of a model nanoobject and fractal cosmological objects such as black holes and neutron stars are investigated. Using the example of a silica nanoparticle trapped in an optical trap and placed in a vacuum, estimates of the limiting frequency of rotation of a particle in a laser field with circular polarization and the size of the nanoparticle are obtained. Using the example of atomic defects in boron nitride nanotubes, we obtained estimates of the wavelengths of quantum emission of separate photons. The properties of nanoparticles depend on pressure, state of physical vacuum and cosmological parameters.

Keywords: model nanoobject, fractal cosmological objects, optical traps, nanoparticles, frequency of rotation, physical vacuum.

СПОНТАННОЕ ВОЗНИКНОВЕНИЕ ПОПЕРЕЧНОЙ ЭДС  
В ДВУМЕРНОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ С МОДИФИЦИРОВАННЫМ  
ЭЛЕКТРОННЫМ СПЕКТРОМ

В. Л. Абдрахманов<sup>1</sup>, Д. В. Завьялов<sup>1</sup>, С. В. Крючков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Волгоградский государственный технический университет

<sup>2</sup> Волгоградский государственный социально-педагогический университет  
[369565@gmail.com](mailto:369565@gmail.com), [sinegordon@gmail.com](mailto:sinegordon@gmail.com), [svkruchkov@yandex.ru](mailto:svkruchkov@yandex.ru)

В работе исследовано спонтанное возникновение электрического поля поперечного по отношению к тянущему в двумерной сверхрешетке с неаддитивным энергетическим спектром, не сводящимся к аддитивному никаким поворотом координат.

Ключевые слова: сверхрешетка, неаддитивный спектр, спонтанное поле.

В работе [1] теоретически исследована анизотропия проводимости и высокочастотные свойства двумерной сверхрешетки с неаддитивным законом электронной дисперсией при наличии сильного статического электрического поля. Вычисления проводились для оригинальной модели электронного спектра. Основными усилиями авторов [1] были поиск механизмов, позволяющих реализовать высокочастотную отрицательную дифференциальную проводимость в диапазоне с положительной статической дифференциальной проводимостью. Энергетический спектр, который был использован в [1] имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \Delta_0 + \Delta_1 \left( 1 - \frac{1}{2} (\cos(p_x d_x) + \cos(p_y d_y)) \right) + \Delta_2 \cos(p_x d_x) \cos(p_y d_y), \quad (1)$$

Здесь  $p_x, p_y$  – проекции квазиимпульса вдоль осей координат,  $d_x, d_y$  – периоды сверхрешетки в соответствующих направлениях. Спектр (1) обладает двумя важными особенностями. Во-первых, он периодичен в импульсном пространстве. Во-вторых, он неаддитивен. Причем неаддитивность спектра имеет нативный характер, то есть не устраняется поворотом координатных осей. Это позволяет надеяться, что в двумерной сверхрешетке со спектром (1) возможно проявление других уникальных эффектов.

Анизотропные электрические свойства квадратной сверхрешетки со спектром  $\varepsilon(\mathbf{p}) = \Delta_1 \left( 1 - \frac{1}{2} (\cos(p_x d_x) + \cos(p_y d_y)) \right)$  были исследованы в работе [2].

Найдем плотность тока вдоль оси  $Ox$  сверхрешетки со спектром (1) под действием постоянного электрического поля с напряженностью  $\mathbf{E} = \{E_x, E_y\}$ . Для решения задачи воспользуемся квазиклассическим приближением. Плотность тока определяется стандартным образом

$$j_x = e \sum v_x(\mathbf{p})f(\mathbf{p}, t), \quad (2)$$

где

$$v_x = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial p_x}. \quad (3)$$

Неравновесная функция распределения  $f(\mathbf{p}, t)$  является решением кинетического уравнения Больцмана, столкновительный член которого выберем в приближении частоты столкновений  $\nu$ , которую в дальнейшем считаем постоянной. Таким образом, уравнение Больцмана имеет вид

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial t} + e\mathbf{E} \frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial \mathbf{p}} = -\nu(f(\mathbf{p}, t) - f_0(\mathbf{p})), \quad (4)$$

где  $f_0(\mathbf{p})$  – равновесная функция распределения. Решение уравнения (4) имеет следующий вид:

$$f(\mathbf{p}, t) = \nu \int_{-\infty}^t dt' \exp(-\nu(t - t')) f_0(\mathbf{p}'(t')), \quad (5)$$

где  $\mathbf{p}'(t')$  представляет собой решение классического уравнения движения электрона

$$\frac{d\mathbf{p}'}{dt'} = e\mathbf{E}, \quad (6)$$

с начальным условием  $t' = t, \mathbf{p}' = \mathbf{p}$ .

Подставляя решение уравнения (6) в (2), (3), (5) и считая электронный газ невырожденным, получим следующее выражение для плотности тока

$$\begin{aligned} j_x = j_0 & \left( \Delta_{12} \varepsilon_x \left( 1 + (\varepsilon_x - \varepsilon_y)^2 \right) \left( 1 + (\varepsilon_x + \varepsilon_y)^2 \right) A \left( \Delta_{12}, \frac{\Delta_2}{T} \right) + \right. \\ & \left. + 2\varepsilon_x (1 + \varepsilon_x^2) (1 + \varepsilon_x^2 - \varepsilon_y^2) B \left( \Delta_{12}, \frac{\Delta_2}{T} \right) \right) / \\ & / (1 + \varepsilon_x^2) \left( 1 + (\varepsilon_x - \varepsilon_y)^2 \right) \left( 1 + (\varepsilon_x + \varepsilon_y)^2 \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Здесь  $\Delta_{12} = \Delta_1/\Delta_2$ ,  $T$  – температура в энергетических единицах,  $\varepsilon_x, \varepsilon_y = eE_x d_x/\hbar\nu, eE_y d_y/\hbar\nu$  – напряженности электрических полей в безразмерных единицах,

$$\begin{aligned} A(x, y) &= \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \exp\left(\frac{1}{2}xy \cos(\alpha)\right) I_1\left(\frac{1}{2}y(x + 2\cos(\alpha))\right), \\ B(x, y) &= \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \exp\left(\frac{1}{2}xy \cos(\alpha)\right) I_1\left(\frac{1}{2}y(x + 2\cos(\alpha))\right) \cos(\alpha), \end{aligned}$$

$I_1(x)$  – модифицированная функция Бесселя первого рода мнимого аргумента.

Допустим теперь, что образец разомкнут в направлении оси  $OX$ . В этом случае выполняется условие  $j_x = 0$ . С учетом выражения (7) получим

$$\Delta_{12}\varepsilon_x \left(1 + (\varepsilon_x - \varepsilon_y)^2\right) \left(1 + (\varepsilon_x + \varepsilon_y)^2\right) A \left(\Delta_{12}, \frac{\Delta_2}{T}\right) + 2\varepsilon_x(1 + \varepsilon_x^2)(1 + \varepsilon_x^2 - \varepsilon_y^2)B \left(\Delta_{12}, \frac{\Delta_2}{T}\right) = 0. \quad (8)$$

Решим это уравнение относительно поля  $\varepsilon_x$ . Получим, что уравнение имеет следующие корни

$$\varepsilon_x = 0, \quad (9)$$

$$\varepsilon_x = \pm \sqrt{\frac{-2 + \varepsilon_y^2 + AB(-1 + \varepsilon_y^2)\Delta_{12} - \sqrt{\varepsilon_y^2(\varepsilon_y^2 - 8AB\Delta_{12} - 4AB^2\Delta_{12}^2)}}{2 + AB\Delta_{12}}}, \quad (10)$$

$$\varepsilon_x = \pm \sqrt{\frac{-2 + \varepsilon_y^2 + AB(-1 + \varepsilon_y^2)\Delta_{12} + \sqrt{\varepsilon_y^2(\varepsilon_y^2 - 8AB\Delta_{12} - 4AB^2\Delta_{12}^2)}}{2 + AB\Delta_{12}}}. \quad (11)$$

Здесь  $AB = A \left(\Delta_{12}, \frac{\Delta_2}{T}\right) / B \left(\Delta_{12}, \frac{\Delta_2}{T}\right)$ . Таким образом видно, что в случае разомкнутого по оси  $OX$  образца может существовать ненулевое электрическое поле  $\varepsilon_x$  (при условии, что это решение является устойчивым, для чего необходимо выполнение условия  $dj_x/d\varepsilon_x > 0$ ). Из (9)-(11) видно также, что при выполнении условия  $0 < AB < \frac{\sqrt{2}-1}{2\Delta_{12}}$  тянущее поле, при котором становятся возможными ненулевые решения уравнения (8) определяется выражением

$$\varepsilon_y = \pm \sqrt{-\sqrt{\frac{1 - 4AB\Delta_{12}}{AB^2\Delta_{12}^2}} + \frac{1 - AB\Delta_{12}}{AB\Delta_{12}}},$$

при  $AB > \frac{\sqrt{2}-1}{2\Delta_{12}}$  поле равно

$$\varepsilon_y = \sqrt{8AB\Delta_{12} + 4AB^2\Delta_{12}^2}.$$

Проиллюстрируем вышесказанное графиками (рис. 1) левой части выражения (8) в зависимости от  $\varepsilon_x$ , построенными при нескольких значениях  $\varepsilon_y$  (при типичных значениях параметров сверхрешетки и комнатной температуре).

Отметим, что подобная задача была решена ранее [3] для сверхрешетки со спектром  $\varepsilon(\mathbf{p}) = \Delta_0 + \Delta_2 \cos(p_x d_x) \cos(p_y d_y)$ . При этом наш результат переходит в результат [3] при  $\Delta_{12} = 0$  и условие разомкнутости образца вдоль оси  $OX$  примет вид

$$\varepsilon_x(1 + \varepsilon_x^2 - \varepsilon_y^2) = 0. \quad (12)$$

Из (12) следует, что при  $\varepsilon_y \leq 1$  решением (12) может быть только  $\varepsilon_x = 0$ . Однако при  $\varepsilon_y > 1$  этот корень теряет устойчивость, и появляется новая пара

устойчивых корней  $\varepsilon_x = \pm\sqrt{\varepsilon_y^2 - 1}$ . Эту ситуацию иллюстрирует следующий график левой части (12) в зависимости от  $\varepsilon_x$ , построенными при нескольких значениях  $\varepsilon_y$  (рис. 2).

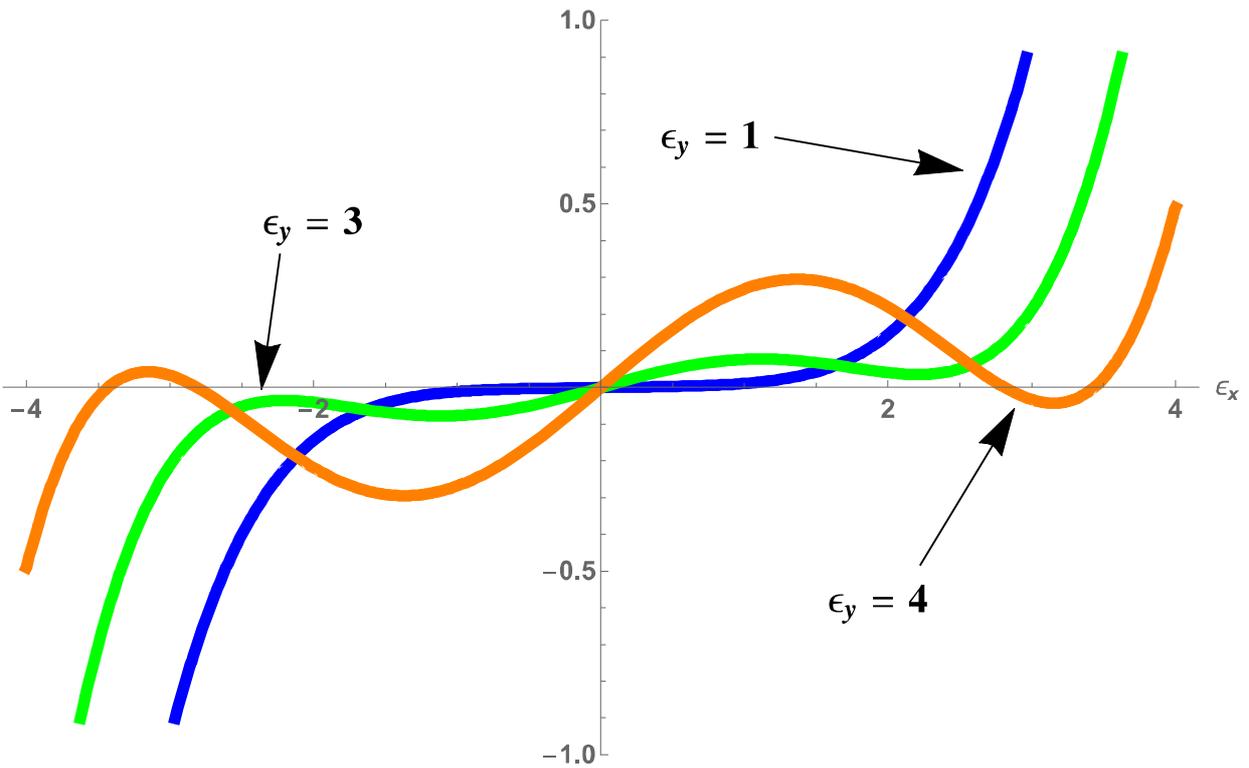


Рис. 1

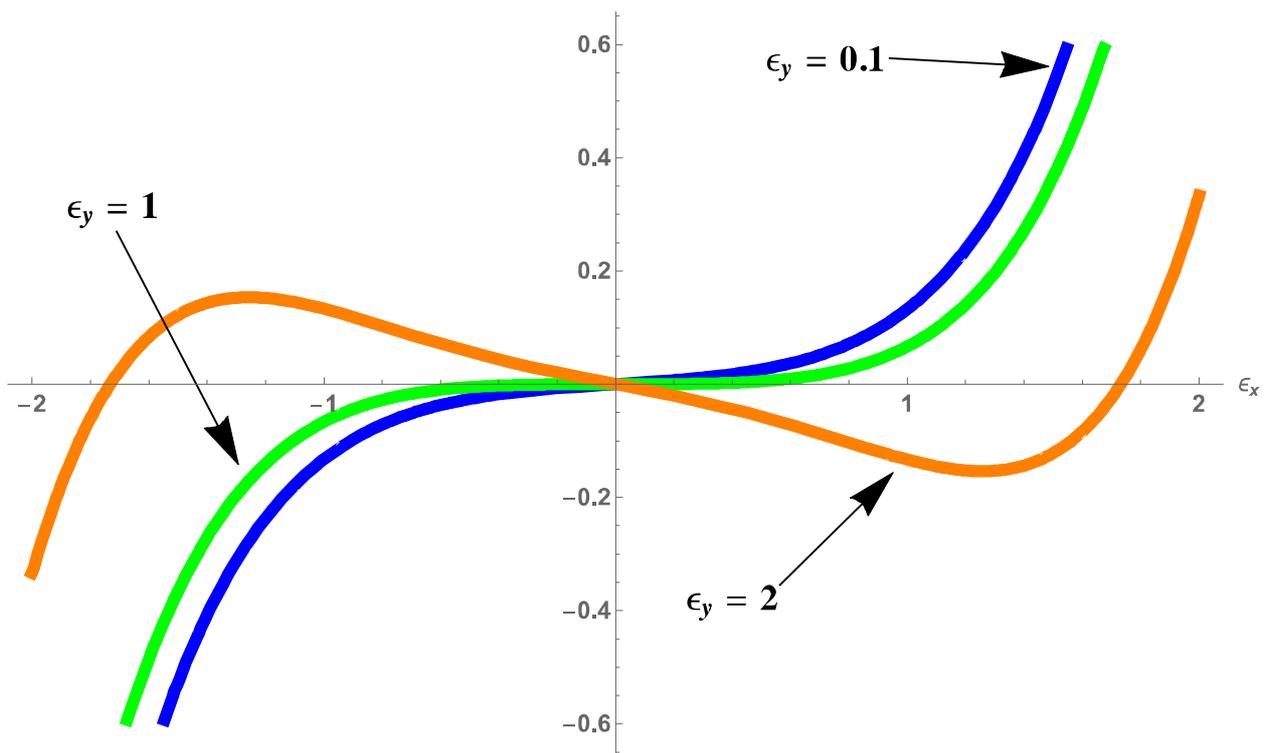


Рис. 2

Этот результат можно трактовать как спонтанное возникновение поперечного поля при изменении тянущего. В нашем же случае (как видно из рис. 1) при появлении новой пары устойчивых корней корень  $\varepsilon_x = 0$  устойчивости не теряет, и у системы возможно существование нескольких различных по модулю значений поперечного поля. Таким образом, спонтанно поперечное поле, отличное от нуля, не возникнет, но при возбуждении внешним импульсом с напряженностью, направленной вдоль оси  $OX$ , вполне возможно достигнуть перехода системы из одного устойчивого состояния в другое с  $\varepsilon_x \neq 0$ .

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.

#### Литература

1. M. L. Orlov, Yu. A. Romanov, L. K. Orlov, *Microelectronics Journal*, 36, 396, (2005)
2. Д. В. Завьялов, С. В. Крючков, *Journal of Nano- and Electronic Physics*, 5, 04001, (2017)
3. Г. М. Шмелев, Э.М. Эпштейн, *Физика твердого тела*, 34, 2565, (1992)

### SPONTANEOUS EMERGENCE OF TRANSVERSE EMF IN TWO-DIMENSIONAL SUPERLATTICE WITH MODIFIED ELECTRONIC SPECTRUM

V. L. Abdrakhmanov<sup>1</sup>, D. V. Zav'yalov<sup>1</sup>, S. V. Kryuchkov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Volgograd State Technical University

<sup>2</sup>Volgograd State Socio-Pedagogical University

In this work we investigate the spontaneous emergence of an electric field transverse with respect to the pulling one in a two-dimensional superlattice with a non-additive energy spectrum which can't be reduced to an additive one by any rotation of the coordinates.

Keywords: superlattice, non-additive spectrum, spontaneous field.

## ЧИСЛЕННОЕ ПОСТРОЕНИЕ ПОЛОЖИТЕЛЬНОГО РЕШЕНИЯ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОДНОГО НЕЛИНЕЙНОГО ИНТЕГРО- ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Г. Э. Абдурагимов

Дагестанский государственный университет, Махачкала  
[gusen\\_e@mail.ru](mailto:gusen_e@mail.ru)

В данной работе посредством численной реализации итерационного процесса осуществляется построение положительного решения краевой задачи для одного нелинейного интегро-дифференциального уравнения второго порядка, существование и единственность которого ранее было установлено автором в работе [1].

Ключевые слова: краевая задача, положительное решение, итерации.

В данной работе посредством численной реализации итерационного процесса осуществляется построение положительного решения краевой задачи для одного нелинейного функционально-дифференциального уравнения второго порядка, существование и единственность которого ранее было установлено автором в работе [1].

Рассмотрим краевую задачу

$$x''(t) + 0,8(2t)^{1/4} \int_0^1 x(s) ds + \frac{1}{(t+1)^2} \left( \int_0^1 x(s) ds \right)^2 = 0, \quad 0 < t < 1, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} x(0) - 9x'(0) &= 0, \\ 10x(0) - 99x'(0) - x'(1) &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

Сведем краевую задачу (1)-(2) к задаче Коши в интегральной форме

$$x(t) = -0,64\sqrt[4]{2} \frac{4}{9} t^{9/4} \int_0^1 x(s) ds + (\ln(1+t) - t) \left( \int_0^1 x(s) ds \right)^2 + \alpha(t+9), \quad (3)$$

где  $\alpha$  – произвольное число, соответствующему начальному условию  $x'(0) = \alpha$ .

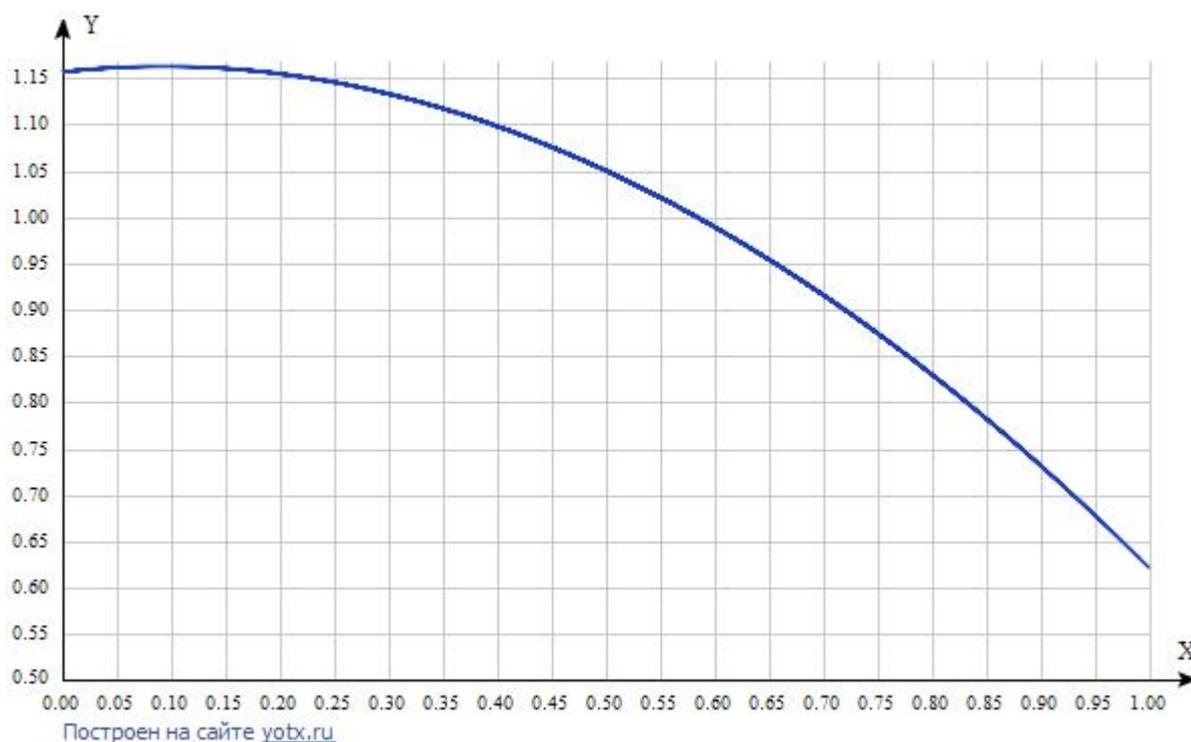
Опираясь на соответствующие априорные оценки [1] положительного решения задачи (1)-(2) и в силу достаточной малости составляющих (3), можно утверждать, что рассматриваемый итерационный процесс сходится.

При численной реализации метода простой итерации решения уравнения (3) для подсчета интеграла мы воспользовались квадратурной формулой трапеции с равномерной сеткой. Соответствующие итерационные расчеты осуществляем до тех пор, пока с необходимой точностью не найдем число  $\alpha^*$ , обеспечивающее выполнение разностного аналога второго граничного условия краевой задачи (1)-(2).

В соответствии с вышеприведенной схемой, результат численных расчетов, полученный интерполированием сеточного решения задачи (1)-(2) (см. таблицу), представлен в виде графика положительного решения задачи (1)-(2) на рисунке.

Положительное решение задачи (1)-(2) при  $\alpha^* = 0.1285$

$t$	0,00	0,10	0,20	0,30	0,40	0,50	0,60	0,70	0,80	0,90	1,00
$x$	1,16	1,16	1,15	1,13	1,10	1,05	0,99	0,92	0,83	0,73	0,62



Литература

1. Абдурагимов, Г. Э. О существовании и единственности положительного решения краевой задачи для одного нелинейного функционально – дифференциального уравнения второго порядка / Г. Э. Абдурагимов // Известия вузов. Серия: Математика. – 2006. – № 5. – С. 3-7.

NUMERICAL REALIZATION OF THE POSITIVE SOLUTION  
OF A BOUNDARY VALUE PROBLEM TYPE FOR A SECOND-ORDER  
NONLINEAR INTEGRAL-DIFFERENTIAL EQUATION

G. E. Abduragimov

Dagestan State University, Makhachkala

On the basis, through the numerical realization of the iterative process, a positive solution of the boundary-value problem for one nonlinear second-order integro-differential equation is constructed, the existence and uniqueness of which was previously established by the author in [1].

Keywords: boundary value problem, positive solution, iterations.

## ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ ФОНОННОГО СПЕКТРА НЕЛИНЕЙНОГО КРИСТАЛЛА $\text{BaGaGe}_2\text{S}_6$

И. В. Будкин, С. А. Климин, Б. Н. Маврин

Институт спектроскопии Российской академии наук, Москва  
[klimin@isan.troitsk.ru](mailto:klimin@isan.troitsk.ru)

Выполнен расчет фоновых свойств кристалла  $\text{BaGaGe}_2\text{S}_6$  из первых принципов. Вычисленные частоты оптических фононов находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными. Получены дисперсионные зависимости и плотность фоновых состояний.

Ключевые слова: первопринципные вычисления, фононы, плотность состояний, нелинейный кристалл.

Кристалл  $\text{BaGaGe}_2\text{S}_6$  – это перспективный нелинейный материал для применений в средней ИК-области спектра (2-10 мкм), генерации второй гармоники, параметрического усиления света. Этот кристалл, а также его селеновый аналог  $\text{BaGaGe}_2\text{Se}_6$ , были синтетически получены совсем недавно [1, 2] и их нелинейные характеристики находятся на уровне лучших материалов нелинейной оптики, используемых на практике [1-3]. Оптические свойства данных кристаллов еще недостаточно изучены. В данной работе мы представляем результаты расчета фоновых свойств кристалла  $\text{BaGaGe}_2\text{S}_6$  из первых принципов.

Расчет проводился в рамках теории функционала плотности (DFT) в базе плоских волн (PW) с использованием программного пакета Abinit [5]. Обменно-корреляционное взаимодействие электронов учитывалось псевдопотенциалом PBE-GGA с сохранением нормы. При обрезании плоских волн был использовано пороговое значение 1360 эВ для кинетической энергии. В качестве валентных электронов были использованы конфигурации  $2s^2$ ,  $4s^2 4p^1$ ,  $4s^2 4p^2$  и  $3s^2 3p^4$  для атомов Ba, Ga, Ge и S, соответственно. Обратим внимание, что кристаллическая структура (пространственная группа R3) содержит одну особенность, осложняющую математическое моделирование, и требующую нестандартного подхода к расчету. Дело в том, что галлий и германий делят одну и ту же кристаллографическую позицию 9b [2]. В результате возникает разупорядочение, приводящее к усложнению колебательного спектра. Для расчета в случае разупорядоченной структуры был использован подход, называемый «генерирование алхимического потенциала» [5]. Суть метода состоит в смешивании потенциалов отдельных атомов (галлия и германия) в стехиометрической пропорции. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось по волновым векторам, соответствующим сетке Монкхорста-Пека  $4 \times 4 \times 4$ . Фононные свойства вычислялись в приближении теории линейного отклика.

Первым этапом вычислений является релаксация структуры. Критерий сходимости для сил при релаксации составлял  $10^{-2}$  эВ/Å. Релаксация структуры проводилась двумя способами. В одном случае происходило фитирование

только положений атомов (расчет 1), в другом – релаксировались как положения атомов, так и постоянные решетки (расчет 2).

Выполненный теоретико-групповой анализ показывает, что в кристалле есть два типа колебаний, невырожденные колебания симметрии А и вырожденные – симметрии Е. Оптические колебания описываются следующей формулой:

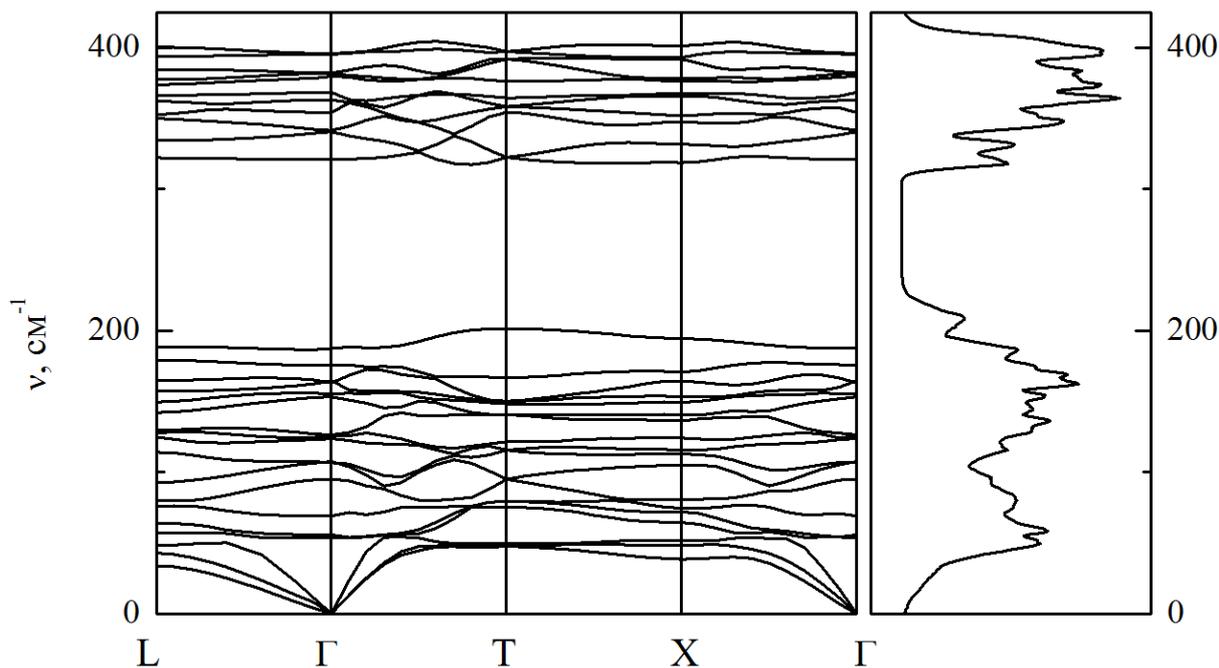
$$\Gamma^{\text{opt}} = 9A \oplus 9E. \quad (1)$$

В таблице приведены вычисленные двумя способами частоты фононов, а также известные экспериментальные данные (две колонки для каждого способа – частоты поперечных и продольных фононов). Сравнение частот показывает, что оба расчета качественно хорошо воспроизводят экспериментальный спектр. В частности, отметим, что экспериментальный спектр содержит энергетическую щель в диапазоне 200-320 см<sup>-1</sup>. Эта щель воспроизводится в расчете и обусловлена тем, что частоты валентных колебаний Ge-S находятся выше частот деформационных и трансляционных колебаний. Отметим, что средняя ошибка в воспроизведении частот существенно меньше в случае расчета 1 (3%), чем для расчета 2 (7%). Это различие связано, вероятно, с недостатком алхимического псевдопотенциала для описания неупорядоченности решетки кристалла.

Вычисленные и экспериментальные частоты в см<sup>-1</sup> в центре зоны Бриллюэна. Расчет 1: релаксация только положений атомов (параметры ячейки фиксированы на экспериментальных значениях). Расчет 2: релаксация параметров ячейки и положений атомов

Симметрия	Расчет 1		Расчет 2		Эксперимент [4]
	TO	LO	TO	LO	
E	63	65	54	56	63
A	69	78	60	69	65
A	93	93	95	95	100
E	105	106	107	108	114
A	125	125	123	123	
E	127	128	126	126	136
E	157	159	153	156	162
E	162	163	163	165	173
A	171	178	168	175	177
A	186	189	184	187	195
A	315	315	296	296	323
E	338	340	314	315	327
A	348	359	315	327	344
E	362	367	335	340	
A	381	383	347	349	387
E	388	390	352	352	379
A	388	399	352	365	408
E	396	424	365	382	408

Вычисленные дисперсия и плотность фоновых состояний для кристалла  $\text{BaGaGe}_2\text{S}_6$  приведены на рисунке. На нем достаточно наглядно видна щель в спектре фоновых возбуждений. Отметим, что фоновый спектр достаточно короткий (частоты не выше  $400 \text{ см}^{-1}$ ), что является важным для практических применений в ИК-области спектра.



Дисперсия фоновых мод и плотность фоновых состояний кристалла  $\text{BaGaGe}_2\text{S}_6$

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 18-32-00588).

#### Литература

1. Lin X., Guo Y., et al. // *J. Solid State Chemistry*. 2012, V.172 P.172-177.
2. Badikov V. V.; Badikov D. V., et al. // *Optical Materials Express*. 2016, V.6. P.2933-2938.
3. Ионин А. А., Киняевский И. О., и др. // VII Международная конференция по фотонике и информационной оптике: сборник научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2018. С.312-313
4. Будкин И. В., Маврин Б. Н., и др. // Материалы XXIII Международной конференции «Оптика и спектроскопия конденсированных сред». Краснодар. 2017. С.341-344.
5. <https://www.abinit.org/>

### AB INITIO CALCULATION OF THE PHONON SPECTRUM OF NONLINEAR $\text{BaGa}_2\text{GeS}_6$

I. V. Budkin, S. A. Klimin, B. N. Mavrin

Institute of Spectroscopy RAS, Troitsk, Moscow

Ab initio calculation of the phonon properties of nonlinear  $\text{BaGa}_2\text{GeS}_6$  was performed. Calculated phonon energies are in reasonably good accordance with the experimental data. Phonon dispersion curves and density of the phonon states are calculated.

Keywords: ab initio calculations, phonons, density of states, nonlinear crystal.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ АЛКИЛИРОВАНИЯ И СУЛЬФИРОВАНИЯ ПРИ ПРОИЗВОДСТВЕ АБСК

А. А. Бунаев, И. М. Долганов, И. О. Долганова,  
Э. Д. Иванчина, М. А. Пасюкова, Т. А. Гиль

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
[aiurbunaev@gmail.com](mailto:aiurbunaev@gmail.com)

Разработанная на языке объектно-ориентированного программирования Delphi 7 программа позволяет рассчитывать основные показатели процессов алкилирования бензола и сульфирования ЛАБ.

Ключевые слова: АБСК, математическое моделирование, алкилирование, сульфирование.

На сегодняшний день программные комплексы, разработанные с помощью объектно-ориентированных языков, имеют значение не только для создания и применения автономного и обособленного программного обеспечения специфического прикладного значения, но и для прогнозирования и мониторинга режимов и условий работы промышленных установок на предприятиях любой отрасли [1]. При этом химическая технология не является каким-либо особым исключением.

Несмотря на определенные положительные тенденции в области математического моделирования, некоторые вопросы, касающиеся оптимизации комплексной работы взаимосвязанных промышленных объектов, установок и аппаратов, остаются нерешенными [2]. Так, при изменении технологического режима может повыситься эффективность одного реактора, но при этом понизится качество продуктов последующих стадий или даже может произойти сбой в работе производственной цепи в целом.

В настоящее время наблюдается спрос на синтетические моющие средства на основе линейных алкилбензолов (ЛАБ) и их производных – алкилбензол сульфокислот (АБСК). Широкое распространение и использование этих веществ связано с их безопасностью для окружающей среды, что, в свою очередь, вызывает необходимость в повышении производительности соответствующих промышленных установок [3].

Возможность внедрения компьютерной математической модели на реальное, действующее производство определяется, главным образом, ее адекватностью – сходимостью экспериментальных и расчетных данных о процессе. Таким образом, в целях достижения требуемой точности необходимо составить решение обратной кинетической задачи: найти кинетические параметры процесса, используя известные экспериментальные данные [4].

Таким образом, разработка компьютерной программы моделирования процесса производства АБСК включает в себя такие этапы, как:

- 1) построение схемы реакций с участием углеводов;
- 2) анализ термодинамики – возможности протекания этих реакций в полученной схеме;
- 3) определение режимов работы реакторов: гидродинамического и теплового;
- 4) создание математической модели и ее реализация в виде программного обеспечения.

На рис. 1 представлено основное диалоговое окно программы, разработанной на языке Delphi 7.

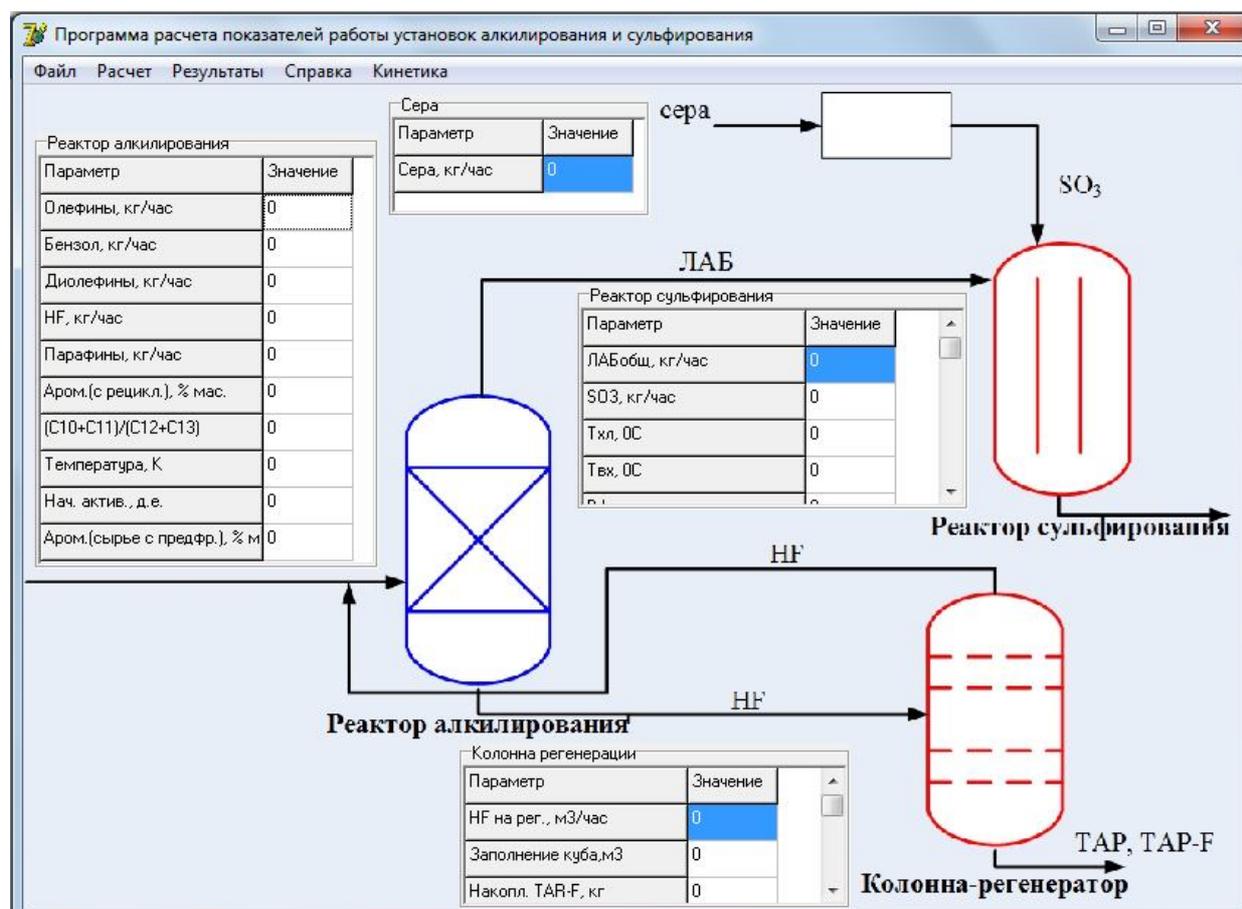


Рис. 1. Графический интерфейс программы

Данная моделирующая система процессов алкилирования и сульфирования предусматривает реализацию таких функций, как типовые расчеты при заданных определенных составах сырья и технологических параметрах, расчет массивов исходных данных из файла, оптимизация работы установки алкилирования и колонный регенерации кислотного катализатора этого процесса, а также корректировка кинетических параметров [5].

В основе этой модели лежит следующий алгоритм:

- 1) Сначала находятся околооптимальные области значений искомых кинетических параметров методом сканирования. Результатом этого шага является нахождение совокупности локальных минимумов целевой функции и величин погрешности при найденных кортежах значений параметров.

2) Полученные на предыдущем шаге области значений исследуются с помощью симплексного метода оптимизации, которая проводится для всех наборов данных, имеющих свой состав сырья и продуктов. В качестве итоговой погрешности выбирается максимальная из величин погрешности отдельных наборов параметров.

3) Если не удастся найти набор параметров, позволяющих описать процесс с какой-то требуемой точностью, то необходимо переопределить интервалы поиска и начать выполнение алгоритма заново.

Для наглядного иллюстрирования данная методика решения была отработана с получением зависимости выхода АБСК от количества ароматических соединений в сырье процесса алкилирования.

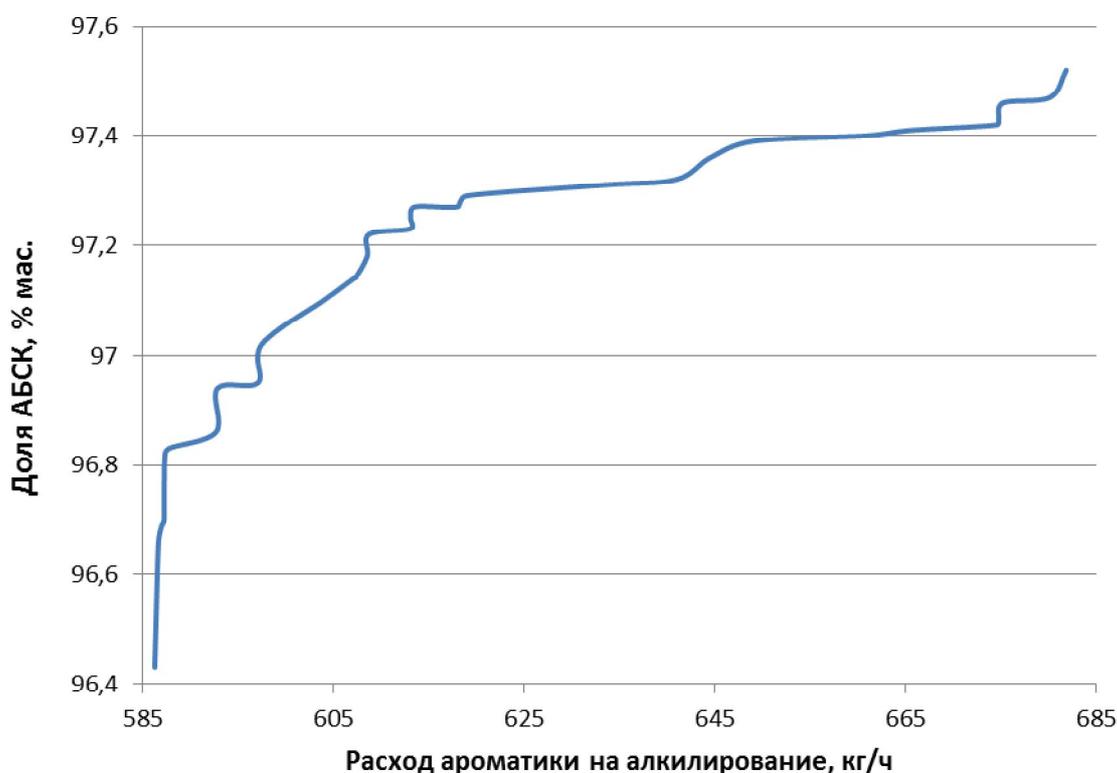


Рис. 2. Зависимость выхода АБСК от расхода ароматики на алкилирование

График на рис. 2 демонстрирует, что с увеличением расхода ароматических соединений, идущих на процесс алкилирования, доля АБСК в потоке продуктов сульфирования, соответственно, возрастает.

Таким образом, был разработан алгоритм поиска кинетических параметров реакций для процессов сульфирования и алкилирования, что, по сути, определяет все остальные их параметры. Также модель была реализована с помощью языка Delphi 7 и протестирована.

#### Литература

1. Долганова И. О., Ивашкина Е. Н., Иванчина Э. Д. Математическое моделирование в задачах повышения эффективности работы установки производства линейных алкилбензолов // Известия ТПУ. – 2011, №3. – С. 109-112.

2. Долганова И. О., Фетисова В. А., Шнидорова Н. О., Иванчина Э. Д. Разработка и программная реализация алгоритма решения обратной кинетической задачи для процесса алкилирования бензола олефинами C10-C14 // Известия ТПУ. - 2010, №3. – С. 117-121.

3. Шнидорова Н. О., Долганова И. О., Долганов И. М., Кочегурова Е. А. Создание компьютерной моделирующей системы процесса алкилирования со схемой превращения различного уровня детализации // Известия ТПУ. – 2010, №5. – С. 57-61.

4. Долганов И. М., Киргина М. В., Ивашкина Е. Н., Иванчина Э. Д., Долганова И. О. Оптимизация аппаратурного оформления процесса дегидрирования высших алканов с использованием метода математического моделирования // Известия ТПУ. – 2012. – № 3. – С. 84-88.

5. Долганов И. М., Францина Е. В., Афанасьева Ю. И., Иванчина Э. Д., Кравцов А. В. Моделирование промышленных нефтехимических процессов с использованием объектно-ориентированного языка Delphi // Известия ТПУ. – 2010, №5. – С. 53-57.

## SIMULATION OF THE PROCESSES OF ALKYLATION AND SULFONATION IN THE PRODUCTION OF ALKYL BENZENESULFONIC ACID

A. A. Bunaev, I. M. Dolganov, I. O. Dolganova, E. D. Ivanchina,  
M. A. Pasyukova, T. A. Gil

National Research Tomsk Polytechnic University

The given program designed with the object-oriented programming language Delphi 7 allows to calculate the main indicators of the processes of alkylation of benzene and sulfonation of linear alkylbenzenes.

Keywords: alkylbenzenesulfonic acid, mathematical modeling, alkylation, sulfonation.

## МОДЕЛЬ ТЕХНИЧЕСКОГО ЗРЕНИЯ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ДЕФЕКТОВ НА ИЗОБРАЖЕНИЯХ АСФАЛЬТА

П. В. Васильев, А. В. Сеничев, М. В. Ступина, А. О. Головинов, О. С. Христич

Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону  
[lyftzeigen@mail.ru](mailto:lyftzeigen@mail.ru)

Авторы данной работы предлагают подход, реализующий идентификацию дефектов на изображениях асфальта. Для решения задачи применяется нейросетевой подход. Построена модель сверточной нейронной сети, с учетом особенностей решаемой задачи. Модель предъявляет низкие требования к объему обучающей выборки, применяется аугментация данных, проведена тонкая настройка модели в рамках задачи. Предложенная модель имеет высокую степень повторяемости и может быть использована в различных задачах сегментации.

Ключевые слова: идентификация дефектов, машинное обучение, сверточные нейронные сети, дорожное покрытие.

Инфраструктуры общественного назначения подвержены естественному процессу старения. В связи с этим требуется проведение более частых процедур контроля. Эффективные стратегии мониторинга состояния могут помочь инженерам в надлежащем планировании работ по обслуживанию и ремонту дорожных покрытий, что приведет к значительному сокращению расходов на обслуживание жизненного цикла дорожного покрытия. Своевременное обнаружение проблемных участков и эффективное управление техническим обслуживанием гарантируют постоянную доступность объектов инфраструктуры. Оценка критического состояния дорожного покрытия прошла много этапов от применения ручных методов фото-фиксации до использования высокоскоростной цифровой техники.

Россия входит в пятерку стран с самой большой протяженностью автомобильных дорог и федеральных магистралей. Для инфраструктур большой протяженности требуются системы мониторинга, которые объединяют в себе простоту использования, высокую скорость, надежность и качество работы.

Для проведения контроля состояния дорожного покрытия могут применяться системы фото и видеонаблюдения. Оценка и анализ собранных данных в ручном режиме может продолжаться очень долго. Поэтому время, необходимое для проведения фактического осмотра и дальнейшей оценки состояния объектов контроля, может превышать срок их эксплуатации.

В данной работе предлагается подход, который задействует технологии машинного обучения. Это позволяет автоматизировать процесс оценки качества дорожного покрытия. Предлагаемый подход заключается в обучении сверточной нейронной сети на основе данных, размеченных вручную. Таким образом, система научится распознавать основные виды повреждений объектов контроля и проводить их оценку. Это позволит существенно повысить скорость обследования дорожного полотна и сократить материальные издержки.

## Предлагаемый метод

Для проведения идентификации дефектов на изображениях дорожного покрытия, нужно определить, что является дефектом, а что нет. Другими словами, нужно провести сегментацию изображения и выделить соответствующие классы. Данный тип задач, в последнее время, эффективно решается с помощью специально разработанных архитектур сверточных нейронных сетей, таких, например, как SegNet [1], U-Net [2].

Изображения дорожного покрытия имеют свою специфику. Она заключается в небольшом диапазоне серого цвета и небольшой разнице между фоном и целевым объектом изображения. Помимо этого, на изображениях могут присутствовать большое количество шумов и посторонних объектов. Изображения могут содержать различные типы дефектов, разного размера и формы.

На данный момент, существует большое количество наборов данных, на основе которых, можно провести обучение нейронной сети [3, 4]. Эти наборы данных включают в себя оригинальные изображения дорожного покрытия и соответствующие им изображения-маски, показывающие наличие или отсутствие дефектов. Так как изображения с дефектами на дорожном покрытии имеют свою специфику, авторы предлагают собственную упрощенную модель глубокой сверточной нейронной сети. Для сегментации изображения предлагается Fully convolutional neural network [5] со структурой Encoder-Decoder. На вход системы подается изображение дорожного покрытия, а на выходе получается бинарное изображение. Таким образом, в качестве результата, получается сегментированное изображение, показывающее наличие и отсутствие дефектов.

## Архитектура

На рис. 1 показана архитектура предлагаемой глубокой сверточной нейронной сети. Нейронная сеть состоит из двух частей – сверточной и разверточной. Сверточная часть выполняет функцию извлечения признаков. Она преобразует входное изображение в многомерное представление признаков. Разверточная сеть играет роль генератора, который создает сегментированное изображение на основе признаков, полученных от сверточной сети. Последний сверточный слой сети с сигмовидной активационной функцией генерирует сегментированное изображение, другими словами, карту вероятностей присутствия дефекта того же размера, что и входное изображение.

Первая часть сети состоит из 5 сверточных слоев с наборами фильтров (256, 128, 64, 64, 64). Применяется инструмент batch normalization (BN) [6]. В качестве активационных функций применяется «выпрямитель» rectified linear unit (ReLU). Далее следуют слои субдискретизации (Pooling) с окном 2x2, таким образом происходит уменьшение изображения в 2 раза после его прохождения через этот слой. Вторая часть сети является зеркальным отражением первой части. Для того чтобы восстановить размер изображения до исходного и сформировать карту вероятностей, на основе признаков входного изображения, применяются upsampling слои в комбинации со сверточными слоями. Предложенная нейронная сеть имеет 10 сверточных слоев и 929 665 обучаемых параметров.

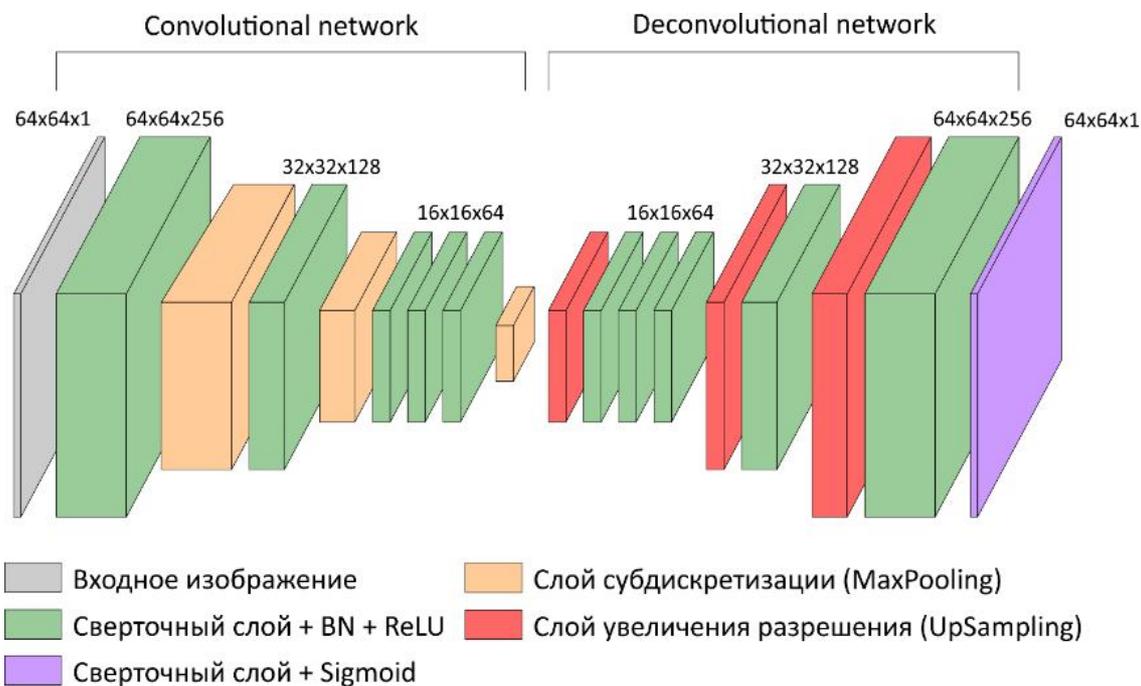


Рис. 1. Архитектура предложенной сети

### Подготовка набора данных

Для обучения построенной модели используется набор данных CrackForest [4]. Проводится его аугментация (искусственное увеличение набора данных), так как обучение и работа нейронной сети основана на Path-based подходе. Каждый фрагмент изображения подвергается вращению, отражению и деформации. Он разделяется на обучающую, тестовую и валидационную выборки. Для каждого изображения из обучающей и тестовой выборки случайно выбираются фрагменты размером 64x64. Исследования показали, что в рамках поставленной задачи, гамма-коррекция изображений способствует увеличению качества работы нейронной сети. На рис. 2 показаны изображения, полученные в результате аугментации данных, и соответствующие им маски, применяемые для обучения нейронной сети.

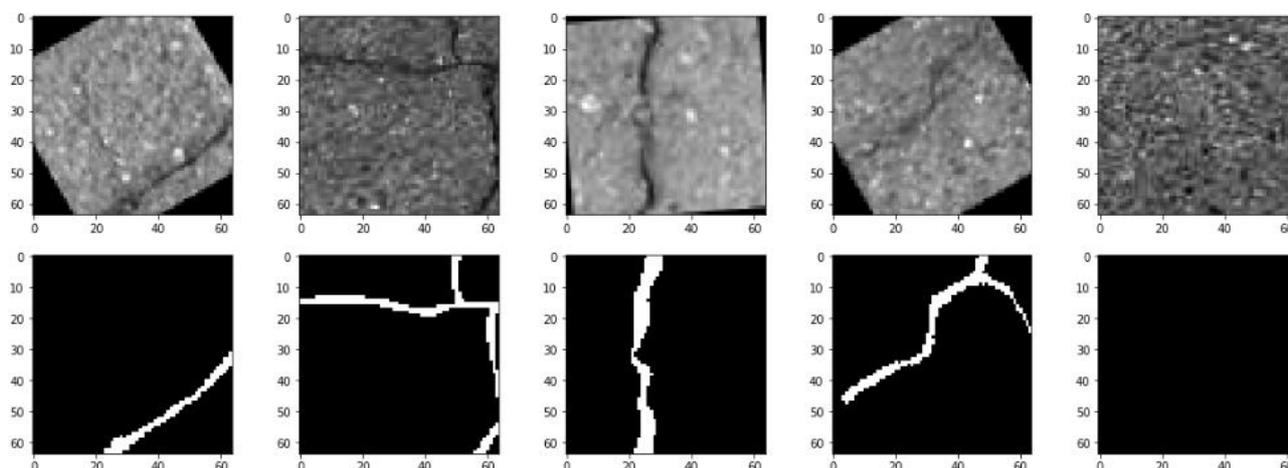


Рис. 2. Изображения и соответствующие им бинарные маски, полученные в результате аугментации данных

## Обучение нейронной сети

В связи со спецификой исследуемой области, для обучения и оценки работы нейронной сети применяются метрики *intersection over union* (IoU, коэффициент Жаккара) и эквивалентная ей бинарная мера схожести *dice* (мера Сёрнсена). В качестве функции потерь используется функция  $1 - J$ .

$$J(A, B) = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|}, \quad S(A, B) = \frac{2|A \cap B|}{|A| + |B|}$$

Инициализация весов в слоях нейронной сети осуществляется методом Glorot. Выполняется *batch normalization* [6] для уменьшения внутреннего ковариационного сдвига путем нормализации входных распределений каждого слоя.

Для обучения используется алгоритм оптимизации Adam (Method for Stochastic Optimization) [7].

Обучение нейронной сети проходит в несколько этапов. На первом этапе сеть обучается на небольшом объеме данных (30% от основного набора), 5 эпох. На втором этапе сеть обучается на полном объеме данных необходимое количество эпох.

Для реализации разработанной архитектуры ГСНН используются фреймворки Keras и Tensorflow.

## Результаты

После обучения нейронной сети, производится валидация на тестовых данных. Каждый фрагмент изображения подается на вход нейронной сети, а на выходе получается сгенерированная карта вероятностей наличия дефекта. Полученное предположение сети сравнивается с истинным значением. В связи со специфическим соотношением площади дефекта к площади всего изображения, а также двоичной (однобитовой) маски и действительного (4-байтового) генерируемого изображения, значения метрик IoU и Dice имеют характерные значения. Качество, подготовленного набора данных, оказывает большое влияние на обучение и результат работы нейронной сети. В некоторых случаях, в результате работы нейронной сети, наблюдается наличие дефектов, хотя на истинных изображениях дефект отсутствует (ошибка разметки) или наоборот. Что сказывается на общей оценке качества работы представленной модели. В целом, оценка точности работы нейронной сети, предложенными метриками, может иметь субъективный характер. Поэтому не стоит воспринимать приведенные значения как абсолютные.

В рамках данной работы, была проведена оценка некоторых моделей FCN-нейронных сетей. Результаты приведены в таблице. В скобках указано количество фильтров на первой части сети. Количество фильтров на второй части сети зеркально отражено на рис. 1.

Для обработки изображений высокого разрешения применяется метод скользящего окна с заданным шагом, регулирующим скорость обработки и де-

тализацию. Несколько изображений из валидационного набора и результат обработки их нейронной сетью представлены на рис. 3.

### Точность работы некоторых моделей нейронных сетей

Архитектура сети	Точность работы
10 слоев (256, 128, 64, 64, 64, ...), 929 665 параметров	Dice: <b>73.81%</b> , IoU: <b>34.88%</b>
16 слоев (32, 32, 16, 16, 16, 8, 8, 8, ...), 43 441 параметров	Dice: 70.40%, IoU: 33.24%
12 слоев (32, 32, 16, 16, 8, 8, ...), 37 537 параметров	Dice: 67.57%, IoU: 32.12%

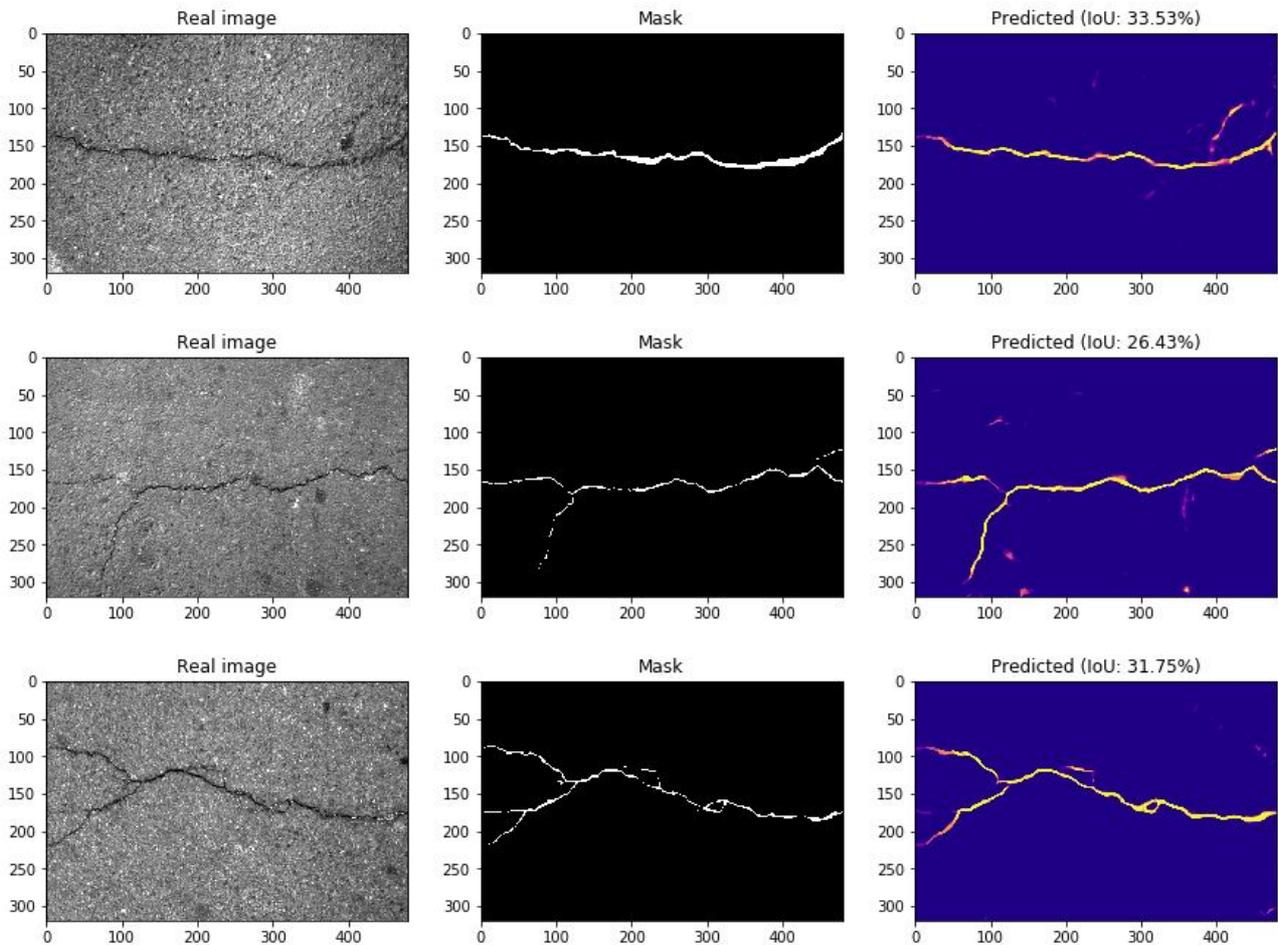


Рис. 3. Валидационные изображения, обработанные обученной нейронной сетью

### Заключение

Разработана модель сверточной искусственной нейронной сети, способная решать задачу сегментации дефектов на изображениях дорожного покрытия. Данная модель нацелена на возможное применение в различных областях в рамках решения задач сегментации и идентификации. Предлагается метод построения обучающей выборки с учетом небольшого объема исходного набора данных. Проведена тонкая настройка разработанной нейронной сети с учетом

специфики решаемой задачи. Разработанная система может проводить автономную обработку большого объема данных, содержащих изображения дорожного покрытия. В результате, согласно используемым метрикам, FCN показывает следующие результаты: IoU – 0.3488, Dice – 0.7381.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №18-31-00024.

#### Литература

1. V. Badrinarayanan, A. Kendall and R. Cipolla, "SegNet: A Deep Convolutional Encoder-Decoder Architecture for Image Segmentation," in IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol. 39, no. 12, pp. 2481-2495, Dec. 1 2017.
2. Ronneberger O., Fischer P., Brox T. (2015) U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation. In: Navab N., Hornegger J., Wells W., Frangi A. (eds) Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention – MICCAI 2015. MICCAI 2015. Lecture Notes in Computer Science, vol 9351. Springer, Cham.
3. Eisenbach, M., Stricker, R., Seichter, D., Amende, K., Debes, K., Sesselmann, M., Ebersbach, D., Stöckert, U., Gross, H.-M. How to Get Pavement Distress Detection Ready for Deep Learning? A Systematic Approach. in: Int. Joint Conf. on Neural Networks (IJCNN), Anchorage, USA, pp. 2039-2047, IEEE 2017.
4. Y. Shi, L. Cui, Z. Qi, F. Meng and Z. Chen, "Automatic Road Crack Detection Using Random Structured Forests," in IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems, vol. 17, no. 12, pp. 3434-3445, Dec. 2016.
5. E. Shelhamer, J. Long and T. Darrell, "Fully Convolutional Networks for Semantic Segmentation," in IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, vol. 39, no. 4, pp. 640-651, April 1 2017.
6. S. Ioffe and C. Szegedy, "Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift," CoRR, vol. abs/1502.03167, 2015.
7. Kingma, Diederik & Ba, Jimmy. (2014). Adam: A Method for Stochastic Optimization. International Conference on Learning Representations.

## VISION MODEL FOR IDENTIFYING DEFECTS IN ASPHALT IMAGES

P. V. Vasilev, A. V. Senichev, M. V. Stupina, A. O. Golovinov, O. S. Khristich

Don State Technical University, Rostov-on-Don

The authors of this paper propose an approach that implements the identification of defects in images of asphalt. To solve the problem, a neural network approach is used. A model of a convolutional neural network has been built, taking into account the characteristics of the problem being solved. The model imposes low requirements on the size of the training sample, data augmentation is applied, and the model is fine-tuned as part of the task. The proposed model has a high degree of repeatability and can be used in various segmentation problems.

Keywords: defect identification, machine learning, convolutional neural networks, pavement.

ВОССТАНОВЛЕНИЕ СПЕКТРА АНСАМБЛЕЙ ВОЛН  
В ЦЕПОЧКЕ НЕСВЯЗАННЫХ ЛИНЕЙНЫХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Е. Е. Гетманова

ООО «Дистанционный репетитор», Москва  
[elge@mail.ru](mailto:elge@mail.ru)

В работе показано, как, действуя серией импульсов, восстановить все возможные волны в цепочке линейных несвязанных осцилляторов, либо восстановить определенные волны. Показано, какие серии импульсов не приводят к восстановлению волн.

Ключевые слова: волны в системе несвязанных линейных осцилляторов, восстановление волн в цепочке.

В работе [1] показано, что действие импульса силы на цепочку (систему) несвязанных линейных осцилляторов (маятников) с плавно меняющимися собственными частотами формирует волны. Волны создаются группами (волновыми группами) маятников. Разность фаз между соседними маятниками в волновых группах меняется в интервале существования волн, но в любой момент времени внутри этого интервала имеет одно и то же значение. Волны, созданные идентичными волновыми группами, объединяются в ансамбли (совокупности) волн. Если закон изменения собственных частот маятников задан в виде  $\omega_{0s} = 5s, \text{ с}^{-1}, s = 1, 2, \dots, 400$ , а частота внешней силы  $\omega = 10^3, \text{ с}^{-1}, T = 2\pi/\omega$ , то время полного цикла формирования ансамблей волн в цепочке составляет  $200T$  (положение всех маятников в моменты  $T$  и  $201T$  одинаково). В процессе формирования волн будет участвовать четыреста маятников. При условии бесконечного числа маятников полный цикл формирования ансамблей может рассматриваться как единица времени, которая определяется значениями  $\omega_{0s}$  и  $\omega$ . Спектр ансамблей показывает моменты времени, когда разность фаз между маятниками в волновых группах ансамблей кратна  $2\pi$ . В [2] установлено, что действие второго импульса, в общем случае, уменьшает число ансамблей волн в системе, создает узловые маятники (маятники, которые имеют нулевую энергию и не совершают колебания по окончании действия импульса). Это приводит к сокращению времени существования волн по сравнению с временем их существования после действия первоначального импульса.

В настоящей работе показано, как, действуя серией дополнительных импульсов, восстановить все ансамбли волн, либо восстановить только ансамбли с требуемым минимальным числом волн, которые будут в дальнейшем реализовываться в цепочке. А также определить, какие серии импульсов не приведут к восстановлению волн.

Восстановлением волн некоторого ансамбля называется процесс, в результате которого волны будут иметь интервал существования такой же, как и после действия первоначального импульса. Сдвиг фаз между маятниками в

волновых группах восстановленных ансамблей в некоторый момент времени становится кратным  $2\pi$ .

Выбирая моменты начала действия серии импульсов определенным образом, можно восстановить волны всех ансамблей, восстановить волны определенных ансамблей, либо не восстановить волны никаких ансамблей.

После действия первоначального импульса в течение полного цикла преобразований ансамблей волн возникают временные интервалы, в которых формируются ансамбли с одинаковым числом волн. К примеру, в моменты  $ts=50,5T$  и  $150,5T$  между маятниками в волновых группах  $1+4i$ ,  $2+4i$ ,  $3+4i$ ,  $4+4i$ ,  $i=0,1,\dots,99$ , разность фаз кратна  $2\pi$ , и вблизи указанных моментов времени существует ансамбль, включающий четыре волны. В этом же интервале существуют ансамбли с другим (большим четверем) числом волн, а также ансамбли с кратным четверем числом волн.

Поскольку действие второго импульса, начало которого определяется произвольным моментом  $T_1$ , в общем случае сокращает как спектр ансамблей, так и интервал существования волн [2], то рассмотрим действие второго импульса с началом  $T_1=49T$ .

### **Восстановление всех ансамблей волн в системе**

При действии серии импульсов, начало которых определяется моментами  $(49+200n)T$ , где  $n$  – целое число, каждый новый импульс формирует в цепочке такой же набор ансамблей, как и созданный после действия первоначального импульса, но формирование ансамблей нового набора будет сдвинуто по времени на величину начала действия импульса. При выбранных моментах начала действия серии импульсов, в каждом новом наборе интервалы существования всех ансамблей будут совпадать, смещения, вызываемые действием повторных импульсов, будут складываться, и значительно превышать смещение, вызванное действием первоначального импульса, узловые маятники получают энергию и включаются в процесс колебаний. В цепочке восстановятся все возможные ансамбли волн. Энергия соседних маятников в цепочке будет незначительно отличаться. Смещение маятников  $x_s(t)$  в моменты времени, когда сдвиг фаз между маятниками в волновых группах кратен  $2\pi$ , после действия семнадцатого (включая первоначальный) импульса  $T_{16}=3049T$  показан для ансамблей с двумя (рис. 1а) и четырьмя (рис. 1б) волнами. Аналогичный результат получается при действии серии импульсов, начала которых определяется  $(51+200n)T$ ,  $(149+200n)T$ ,  $(151+200n)T$ . Начало цикла преобразований ансамблей волн определяется моментом  $T_1$ .

### **Восстановление определенных ансамблей волн в цепочке**

Поскольку в цепочке в течение полного цикла преобразований ансамблей существует несколько временных интервалов, в которых формируются ансамбли с одинаковым числом волн, то продемонстрируем, что происходит с волнами при выборе моментов времени начала действия серии импульсов в интервалах формирования идентичных (с одинаковым числом волн) ансамблей волн. К при-

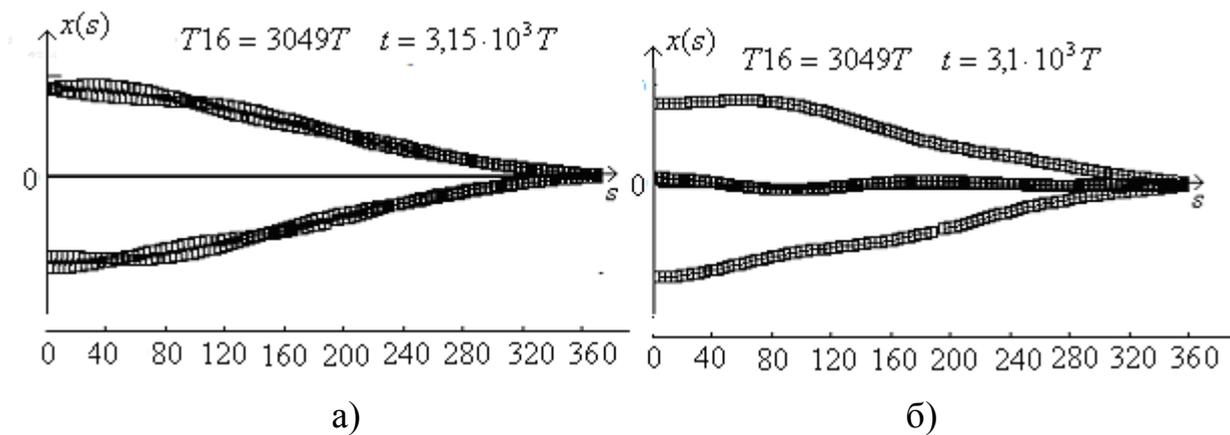


Рис. 1

меру, если начало действия серии импульсов определяется моментами  $(49 + 100n)T$ , где  $n$  – целое число, энергия четных и нечетных маятников будет отличаться. Нечетные маятники в процессе действия импульса не будут получать энергию. Поэтому в цепочке сформируются только ансамбли четных волн, которые в свою очередь будут формировать лишь волны из четных маятников. Смещение маятников при формировании ансамблей из двух (рис. 2а) и четырех (рис. 2б) волн, созданных из четных маятников после семнадцати (включая первоначальный) импульсов  $T16 = 1549T$ , в момент, когда сдвиг фаз между маятниками в волновых группах кратен  $2\pi$ . Энергия соседних четных маятников отличается незначительно, четные узловые маятники получают энергию и участвуют в процессе колебания. Начало цикла преобразования определяется временем  $T1$ .

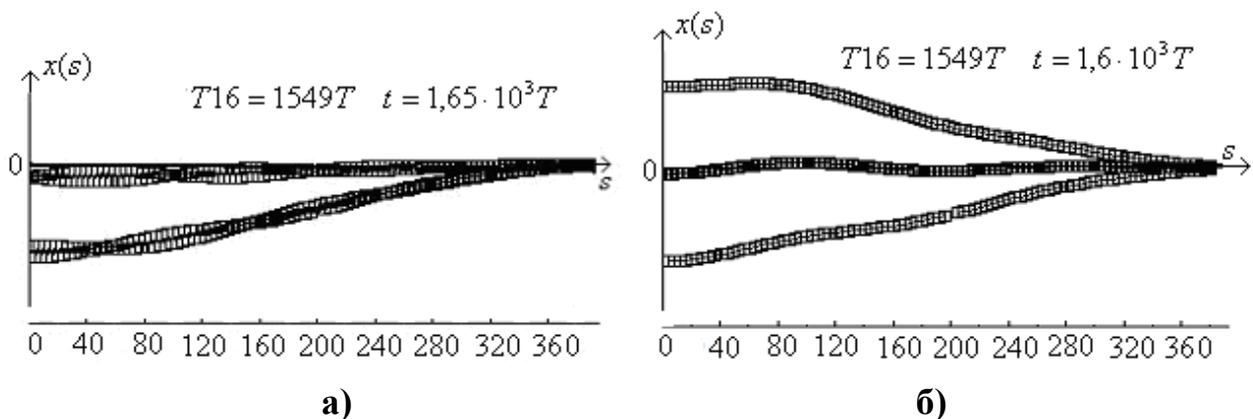


Рис. 2

### Образование полос в спектре и узловых маятников

Если начала действия импульсов соответствуют  $49T, 151T, 249T, 351T, 449T, 551T...$ , то восстановления волн не происходит. В моменты времени  $ts1$ , когда сдвиг фаз между маятниками в волновых группах, созданных после действия импульсов  $49T, 249T, 449T...$  кратен  $2\pi$ , сдвиг фаз между этими же ма-

ятниками в волновых группах, созданных после действия импульсов  $151T, 351T, 551T...$  будет равен  $2\pi n_1 \pm \Delta\varphi$ . И наоборот, в моменты времени  $ts_2$ , когда сдвиг фаз между маятниками в волновых группах ансамблей  $151T, 351T, 551T...$  кратен  $2\pi$ , сдвиг фаз в этих же волновых группах ансамблей  $49T, 249T, 449T...$  равен  $2\pi n_2 \mp \Delta\varphi$ . Не существует моментов времени, при которых сдвиг фаз между маятниками в волновых группах кратен  $2\pi$ , а значит, длительность волн в ансамблях не восстанавливается. Возникают узловые маятники, энергия распределяется по группам маятников.

Минимальный сдвиг фаз  $\Delta\varphi/2$  между маятниками в волновых группах достигается в момент  $(ts_1 + ts_2)/2$ . На рис. 3а показаны четыре волны с минимально возможным в интервале их существования сдвигом фаз между маятниками в волновых группах. Помимо ансамблей с числом волн, кратным четырем, которые разделены на полосы, формируются также волны с нечетным числом волн. На рис. 3б показано шесть из тридцати трех волн, соответствующего ансамбля (момент  $(ts_1 + ts_2)/2$ ).

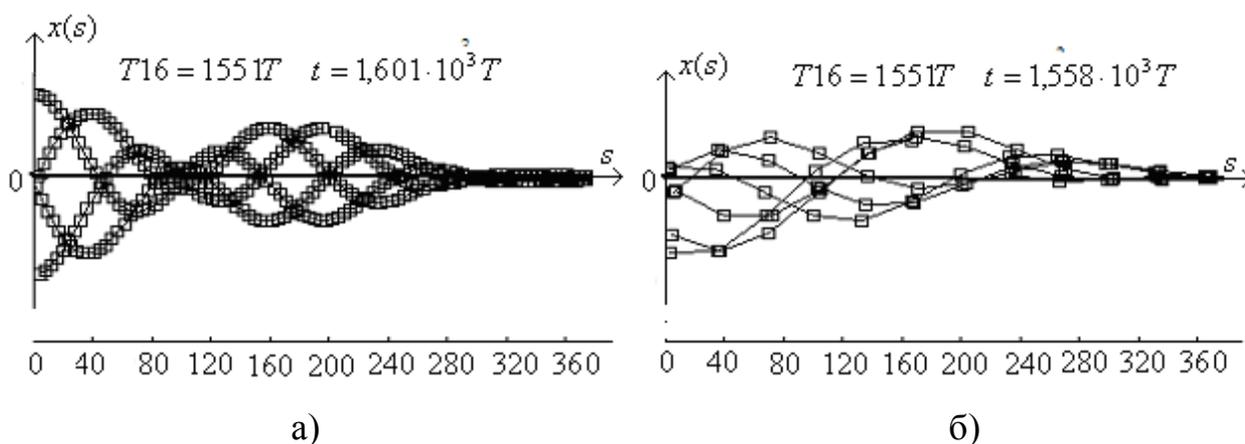


Рис. 3

### Выводы

1. Действие второго импульса, в общем случае, нарушает порядок формирования волн, который был создан после действия первоначального импульса, уменьшает количество ансамблей волн, и сокращает время их существования.

Восстановление всех ансамблей в цепочке (приведение процесса колебаний в состояние, которое было создано после действия первоначального импульса), осуществляется при действии на цепочку серии импульсов, с началом  $T1 + 200nT$ . Значение  $200T$  определяет период цикла преобразования ансамблей (время, за которое в цепочке сформированы все возможные ансамбли волн и маятники возвратились в состояние, которое имели после окончания действия первоначального импульса). При бесконечном числе маятников время полного цикла преобразования определяется собственными частотами маятников и частотой внешней силы и представляет собой единицу времени данной цепочки. После

действия импульсов  $T_1 + 200nT$  восстанавливаются все ансамбли волн, при этом время начала цикла преобразования смещается на величину  $T_1$ .

2. В цепочке в течение полного цикла преобразований ансамблей, существует несколько временных интервалов, в которых формируются ансамбли с одинаковым числом волн. Выбор начала действия серии импульсов в таких интервалах, смещенных относительно моментов  $ts$ , когда в волновых группах волн формируется сдвиг кратный  $2\pi$ , в сторону либо уменьшения, либо увеличения указанного времени, восстанавливается только часть ансамблей волн.

3. Выбор начала действия серии импульсов в моменты, как увеличения, так и уменьшения времени  $ts$ , не приводит к восстановлению волн в ансамблях, а вызывает деление спектра ансамблей на полосы, образованию узловых маятников, сокращению интервала существования и искажению волн в ансамблях.

#### Литература

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

2. Гетманова Е. Е. Формирование устойчивых энергетических областей в цепочке несвязанных линейных осцилляторов // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIX Междунар. семинара. – Воронеж: ВГТУ. – 2018. – С. 40-46.

## RECONSTRUCTION OF THE SPECTRUM OF WAVE ENSEMBLES IN A CHAIN OF UNLINKED LINEAR OSCILLATORS

E. E. Getmanova

Company “DistTutor”, Moscow

The influence of a series of pulses on the recovery of waves in a chain of unlinked linear oscillators is studied in the work. It is shown which series pulses restore only certain waves or do not lead to the recovery waves at all.

Keywords: waves in system of unlinked linear oscillators, recovery of waves in a chain.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОЛИЧЕСТВА РАСТВОРИТЕЛЯ НА ЭНЕРГИЮ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНОВ В НАФИОН-ПОДОБНЫХ МЕМБРАНАХ

А. С. Зюбин, Т. С. Зюбина, Е. А. Сангинов, Р. Р. Каюмов, Ю. А. Добровольский

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка  
[zyubin@icp.ac.ru](mailto:zyubin@icp.ac.ru)

В рамках кластерного подхода с использованием функционала плотности ВЗLYP и базиса 6-31G\* выполнено квантово-химическое моделирование удаления катионов лития и аммония от функциональной группы  $-\text{O}-\text{CF}_2-\text{CF}_2-\text{SO}_3^-$ , характерной для нафион-подобных полимерных мембран, в присутствии разного количества молекул диметилсульфоксида. Найдено, что в рассмотренных системах при малом количестве молекул растворителя ( $n \leq 4$ ) катион достаточно жестко связан с анионом. При увеличении  $n$  не входящие в первую координационную сферу молекулы растворителя могут выполнять роль поляризуемой диэлектрической прослойки между катионом и анионом, что при умеренных затратах энергии ( $\sim 0.3$  эВ) позволяет увеличивать расстояние между ними до 7 - 14 Å.

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, функционал плотности, полимерные нафион-подобные мембраны с ДМСО, взаимодействие катион - анион.

### Введение

Одной из ключевых задач создания недорогих, долговечных и энергоёмких электрохимических источников питания является поиск новых электролитов. Весьма перспективными в этой области представляются системы на основе мембран типа Нафион, пластифицированные ДМСО ( $\text{O}=\text{S}(\text{CH}_3)_2$ ), которые содержат в своем составе сульфонатные функциональные ( $-\text{CF}_2\text{SO}_3^-$ ), в связи с их высокими механическими свойствами, отсутствием проблем с поляризацией и широким диапазоном рабочих температур [1-5]. Определяющее влияние на транспортные свойства электролитов оказывают ассоциация и сольватация ионов, и исследование этих процессов является важной задачей в области ионики. По этим причинам недавно были выполнены экспериментальные исследования особенностей ионного транспорта в полимерном электролите на основе мембраны Нафион-115 в  $\text{NH}_4^+$ -форме, пластифицированного ДМСО [6]. В этой работе было обнаружено ступенчатое изменение ионной проводимости и энергии активации проводимости мембран от содержания пластификатора. Для понимания механизма влияния количества молекул растворителя на характер взаимодействия катион - анион в подобных системах на молекулярном уровне и объяснения найденных особенностей изменения ионной проводимости существенную помощь может оказать квантово-химическое моделирование. Поэтому целью данной работы является изучение влияния количества молекул ДМСО на энергию отделения катионов  $\text{Li}^+$  и  $\text{NH}_4^+$  от сульфогруппы нафионоподобных материалов с помощью квантово-химических расчетов на современном уровне.

## Методика расчетов

Квантово-химическое моделирование было выполнено в кластерном приближении с использованием хорошо зарекомендовавшего себя в молекулярных расчетах гибридного функционала плотности B3LYP [7, 8] с валентно-двухэкспонентным базисом 6-31G\*, включающим поляризационные функции, с помощью программного комплекса GAUSSIAN [9]. В качестве модельных систем были взяты содержащий сульфогруппу фрагмент цепочки нафiona ( $C_5OF_{11}SO_3$ ) и от трех до 12 молекул ДМСО. Расстояние между атомом серы  $SO_3$ -группы и катионом сканировалось от минимального, определяемого оптимизацией, и до такой величины, когда относительная энергия системы возрастает до 0.5 - 0.7 эВ относительно минимума.

## Обсуждение результатов

### 1. Системы с катионом лития.

При наличии трех молекул ДМСО (рис. 1) все они координируются к катиону, который при этом связан с атомом кислорода сульфогруппы. При увеличении расстояния Li-S молекулы ДМСО остаются связанными с катионом, потенциальная энергия системы при этом быстро растет (до 0.6 эВ при  $R(Li-S)=6 \text{ \AA}$ ). Четыре ДМСО могут формировать две близких по энергии структуры, в одной из которых катион связан с сульфогруппой и тремя ДМСО (рис. 1, а), а в другой – с четырьмя (рис. 1, с), которые могут легко переходить друг в друга. При близком контакте катион-анион реализуется первый вариант, а при увеличении расстояния Li-S более энергетически выгодным становится второй. Энергия системы медленно меняется в интервале расстояний Li-S 3 - 6.5  $\text{ \AA}$ , но затем начинает быстро расти (рис. 2).

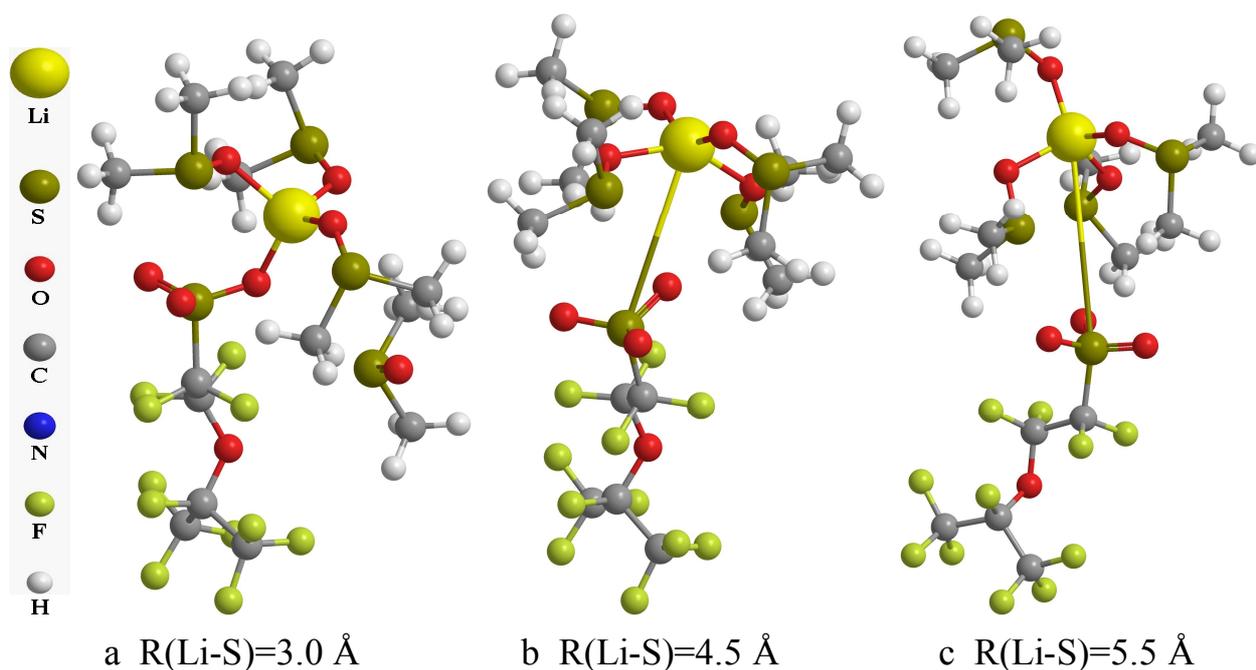


Рис. 1. Система с четырьмя молекулами ДМСО вокруг  $-SO_3^-Li^+$

При увеличении количества молекул ДМСО в системе ( $n=6$  и  $12$ ) ситуация оказывается похожей (рис. 3, 4), но здесь не участвующие в формировании первой координационной сферы вокруг катиона молекулы растворителя по мере увеличения расстояния катион-анион создают между ними дополнительную прослойку, что существенно увеличивает диапазон изменений этого расстояния ( $3-11 \text{ \AA}$  для  $n=6$  и  $4-16 \text{ \AA}$  для  $n=12$ ) при небольших затратах энергии ( $\sim 0.3$  эВ). Необходимость реорганизации "облака" ДМСО при изменении расстояния Li-S приводит к появлению небольших ( $\sim 0.2$  эВ) потенциальных барьеров (рис. 2).

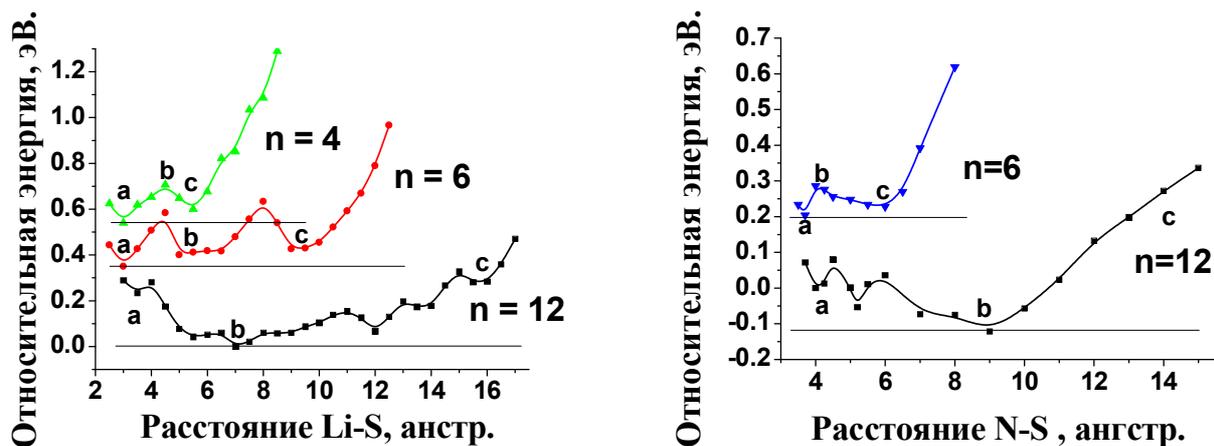


Рис. 2. Потенциальные кривые по расстояниям Li-S и N-S в системах с разным количеством ДМСО вокруг ионов. Горизонтальные линии – начала отсчета энергии для каждой из них

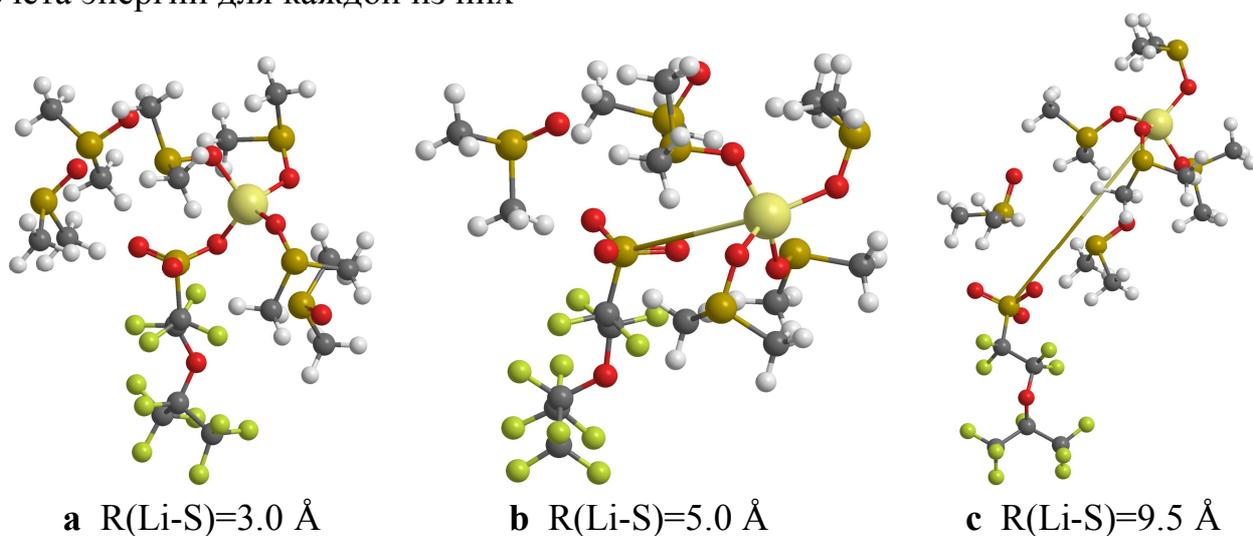
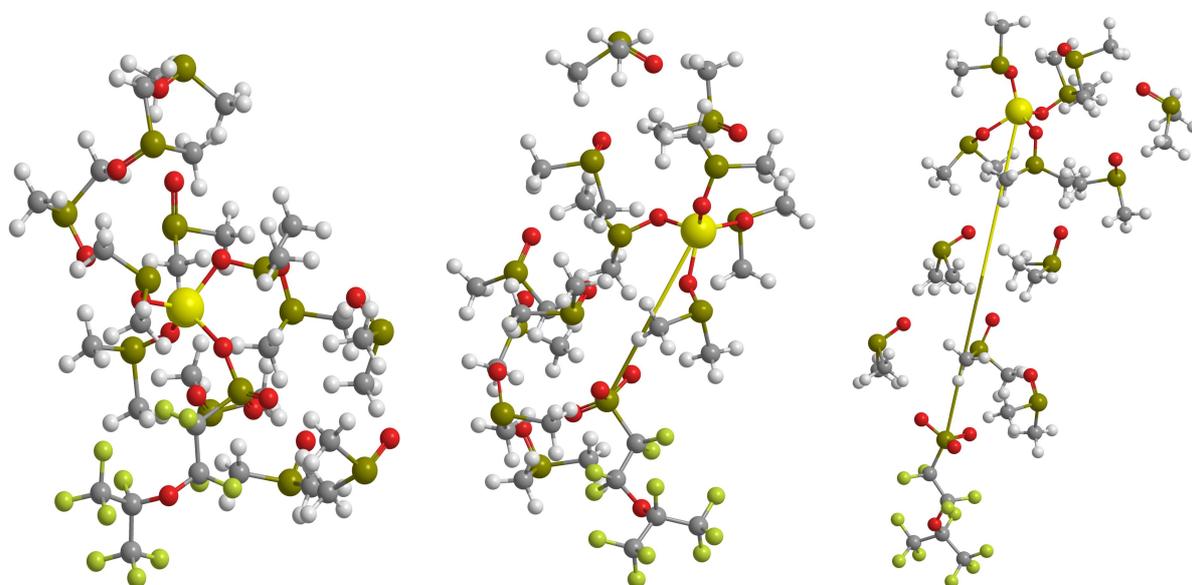


Рис. 3. Система с шестью молекулами ДМСО вокруг  $-\text{SO}_3^-\text{Li}^+$

## 2. Системы с катионом аммония.

Как и для  $\text{Li}^+$ , для  $\text{NH}_4^+$  характерным координационным числом в данных системах является 4, но вследствие наличия связей N-H расстояния N-O в первой координационной сфере аммония оказываются почти на  $1 \text{ \AA}$  больше, чем Li-O в похожих конфигурациях ( $1.8$  и  $2.8 \text{ \AA}$  соответственно). В результате первая координационная сфера аммония по размеру больше, чем у лития, но основные тенденции отличаются мало. При наличии четырех молекул ДМСО разделение ионов в данной системе ведет к быстрому росту относительной энергии.



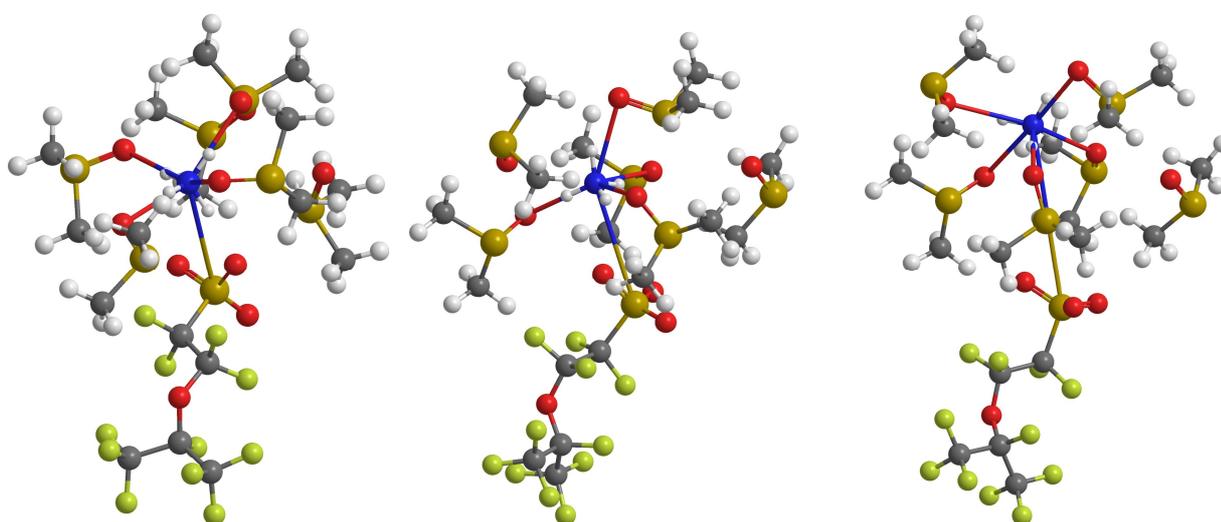
**a**  $R(\text{Li-S})=3.5 \text{ \AA}$

**b**  $R(\text{Li-S})=7.0 \text{ \AA}$

**c**  $R(\text{Li-S})=14.0 \text{ \AA}$

Рис. 4. Система с двенадцатью молекулами ДМСО вокруг  $-\text{SO}_3^- \text{-Li}^+$

При увеличении количества молекул ДМСО ( $n = 6$  и  $12$ ) не участвующие в формировании первой координационной сферы вокруг катиона молекулы растворителя по мере увеличения расстояния катион - анион создают между ними дополнительную прослойку, что существенно увеличивает диапазон изменений этого расстояния. При  $n = 6$  (рис. 5) наиболее выгодна структура (а) с трехкратной координацией катиона по ДМСО, при увеличении расстояния N-S система перестраивает окружение катиона и проходит через небольшой барьер, после чего энергия системы медленно меняется до расстояния  $\sim 7 \text{ \AA}$  (рис. 2). При  $n = 12$  (рис. 6) картина получается в основных чертах похожей, но "облако" ДМСО охватывает еще и фтор-углеродную цепочку. В такой системе катион может уходить от аниона на большое расстояние.



**a**  $R(\text{S-N})=3.7 \text{ \AA}$

**b**  $R(\text{S-N})=4.0 \text{ \AA}$

**c**  $R(\text{S-N})=6.0 \text{ \AA}$

Рис. 5. Система с шестью молекулами ДМСО вокруг  $-\text{SO}_3^- \text{-NH}_4^+$

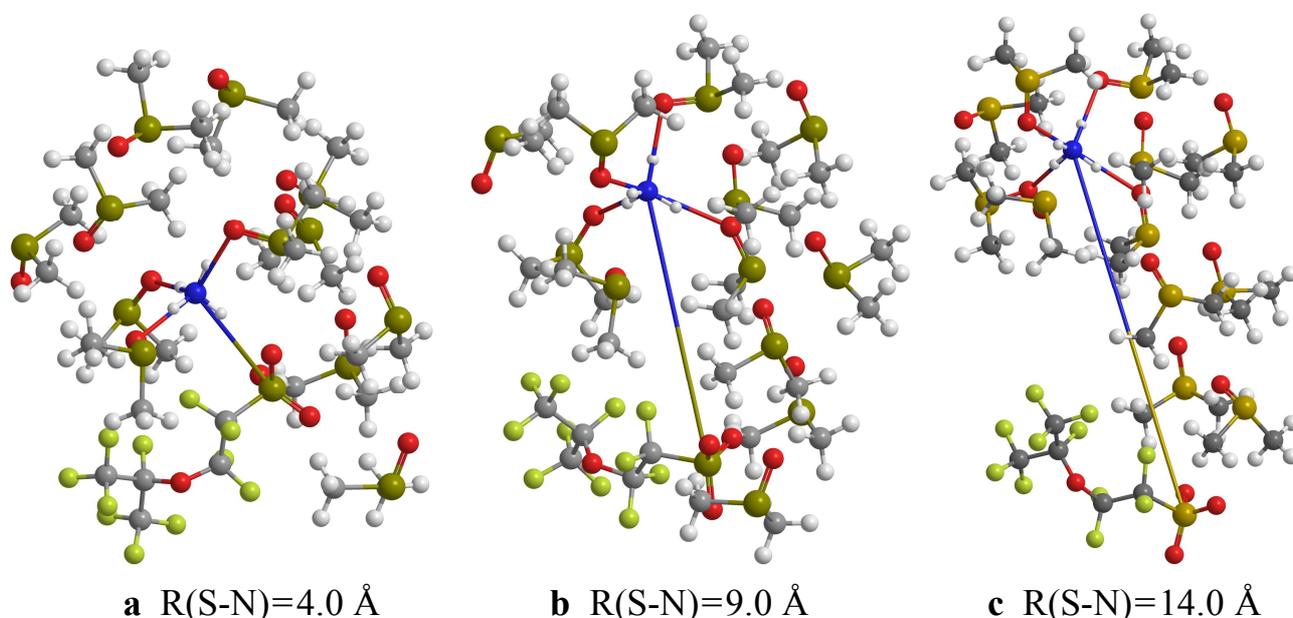


Рис. 6. Система с двенадцатью молекулами ДМСО вокруг  $-\text{SO}_3^- \text{-NH}_4^+$

Резюмируя полученные в данной работе результаты, можно сказать, что в рассмотренных системах с малым количеством ДМСО ( $n \leq 4$ ) катион достаточно жестко связан с анионом и не может удаляться от него на большие расстояния. При увеличении  $n$  не входящие в первую координационную сферу молекулы растворителя могут выполнять роль поляризуемой диэлектрической прослойки между катионом и анионом, что при затратах энергии  $\sim 0.3$  эВ позволяет увеличивать расстояние между ними при  $n=6$  до  $\sim 7 \text{ \AA}$ , а при  $n=12$  до  $\sim 10 - 14 \text{ \AA}$ .

Данная работа выполнена на ВЦ ИПХФ РАН при финансовой поддержке РФФИ (грант № 17-79-30054)

#### Литература

1. P. Aldebert, M. Guglielmi, M. Pineri, Polym. J. 23 (1991) 399–406.
2. S. Sachan, C. A. Ray, S. A. Perusich, Polym. Eng. Sci. 42 (2002) 1469–1480.
3. W. Navarrini, B. Scrosati, S. Panero, A. Ghielmi, A. Sanguineti, G. Geniram, J. Power Sources 178 (2008) 783–788.
4. Zh. Jin, K. Xie, X. Hong, J. Mater. Chem. 1 (2013) 342–347.
5. E. A. Sanginov, E. Yu. Evshchik, R. R. Kayumov, Yu. A. Dobrovol'skii, Russ. J. Electrochem. 51 (2015) 986–990.
6. R. R. Kayumov, L. V. Shmygleva, E. A. Sanginov, A. I. Karelin, A. P. Radaeva, A. S. Zyubin, T. S. Zyubina, D. V. Anokhin, D. A. Ivanov, Y. A. Dobrovolsky, Electrotransport properties of  $\text{NH}_4^+$ -Nafion plasticized by dimethyl sulfoxide, Electrochim. Acta, in press.
7. Becke A. D. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. P. 5648.
8. Johnson B. J., Gill P. M. W., Pople J. A. // J.Chem.Phys. 1993. V.98. P.5612.
9. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, et al., Gaussian 09, Revision B.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.

# THE INFLUENCE OF SOLVENT AMOUNT ON THE INTERACTION ENERGY BETWEEN IONS IN NAFION-LIKE MEMBRANES: QUANTUM-CHEMICAL MODELING

A. S. Zyubin, T. S. Zyubina, E. A. Sanginov, R. R. Kayumov,  
L. V. Shmygleva, Yu. A. Dobrovolsky

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

Within the cluster approach using the density functional B3LYP and 6-31G\* basis set, quantum chemical modeling of removal of lithium and ammonium cations from the functional group  $-\text{O}-\text{CF}_2-\text{CF}_2-\text{SO}_3^-$ , typical for Nafion-like polymer membranes, in the presence of different amounts of dimethyl sulfoxide molecules was performed. It is found that in the considered systems, with a small number of solvent molecules ( $n \leq 4$ ), the cation is rigidly bound to the anion. When  $n$  is increased, solvent molecules which are not included in the first coordination sphere can act as a polarizable dielectric layer between the cation and anion, which at moderate energy costs ( $\sim 0.3$  eV) allows increasing the distance between them to 7 - 14 Å.

Keywords: quantum-chemical simulation, density-functional theory, nafion-like polymer membranes with dimethyl sulfoxide, cation - anion interaction.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В XNafion \* 12DMSO,  
X = Li, Na, K, Rb, Cs

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

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка  
[zyubin@icp.ac.ru](mailto:zyubin@icp.ac.ru)

Изучены особенности переноса ионов в полимерных электролитах на основе Нафiona, пластифицированных диметилсульфоксидом (XNafion \* 12DMSO, X = Li, Na, K, Rb, Cs). Выявлены причины наличия экстремумов на графике ионной проводимости в ряду Li, Na, K, Rb, Cs.

Ключевые слова: ионная проводимость, Nafion, ДМСО.

Среди твердых полимерных электролитов одноионно-проводящие мембраны типа Нафiona привлекают наибольшее внимание из-за высокой ионной проводимости, механической и химической и электрохимической стабильности. Ранее экспериментально были обнаружены необычные зависимости проводимости и энергии активации проводимости пластифицированных диметилсульфоксидом (ДМСО) электролитов на основе нафiona XNafion в зависимости от радиуса катиона ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Rb}^+$ ,  $\text{Cs}^+$ ). Целью настоящего исследования является изучение влияния природы щелочных ионов на перенос заряда полимерного электролита XNafion \* 12DMSO, где X = Li, Na, K, Rb, Cs.

Электролит был сконструирован как 142-атомный кластер  $(\text{CF}_3)_2\text{CFO}(\text{CF}_2)_2\text{SO}_3^-\text{X}^+ \cdot 12((\text{CH}_3)_2\text{SO})$  (называемый далее как XNafion\*12DMSO, X=Li, Na, K, Rb, Cs, аналогичный среднему повторяющемуся фрагменту коммерческого иономера Нафiona. Расчеты проводились с использованием пакетов программ VASP и GAUSSIAN09 на уровне PBE/PAW и V3LYP,wB97XD/6-31G(d, p) (для S, O, C, H, Li, Na, K), LanL2DZ (для Rb и Cs).

На рис. 1 показаны профили минимальных путей миграции катиона вдоль расстояния R(X-S) между атомом серы  $\text{SO}_3$ -группы и катионом  $\text{X}^+$  для комплекса XNafion \* 12DMSO (X = Li, Na, K, Rb, Cs). Существуют несколько минимумов на потенциальных поверхностях движения катионов в зависимости от расстояния R(X-S). Необходимость реорганизации массива молекул ДМСО с изменением расстояния X-S приводит к появлению небольших (~ 0.2 эВ) потенциальных барьеров и образованию малых локальных минимумов.

Характер основных минимумов рассчитанных комплексов на примерах X=Li и X=Cs показан на рис. 2.

Минимум типа I в области  $R(\text{X-S}) = 3,5 \div 5 \text{ \AA}$  соответствует структурам, в которых кислород  $\text{SO}_3$ -группы ( $\text{O}_s$ ) и катион находятся в прямом контакте (так называемая контактная ионная пара). Вторая группа минимумов (тип II) в области  $R(\text{X-S}) = 5 \div 8 \text{ \AA}$  соответствует структурам, в которых ион  $\text{X}^+$  связан с атомами кислорода ( $\text{O}_d$ ) молекул ДМСО, некоторые из которых Н-коорди-

нируются с кислородом  $\text{SO}_3$ -группы (так называемая ионно-ионная пара растворителей) и в пространстве между ионами присутствует одиночный слой растворителя. Третья группа минимумов (тип III,  $R(\text{X-S}) = 8 \div 11 \text{ \AA}$ ) относится к структурам, в которых не присутствуют молекулы ДМСО, связанные одновременно с ионом  $\text{X}^+$  и с  $\text{SO}_3$ -группой (так называемая растворитель - разделенная ионная пара).

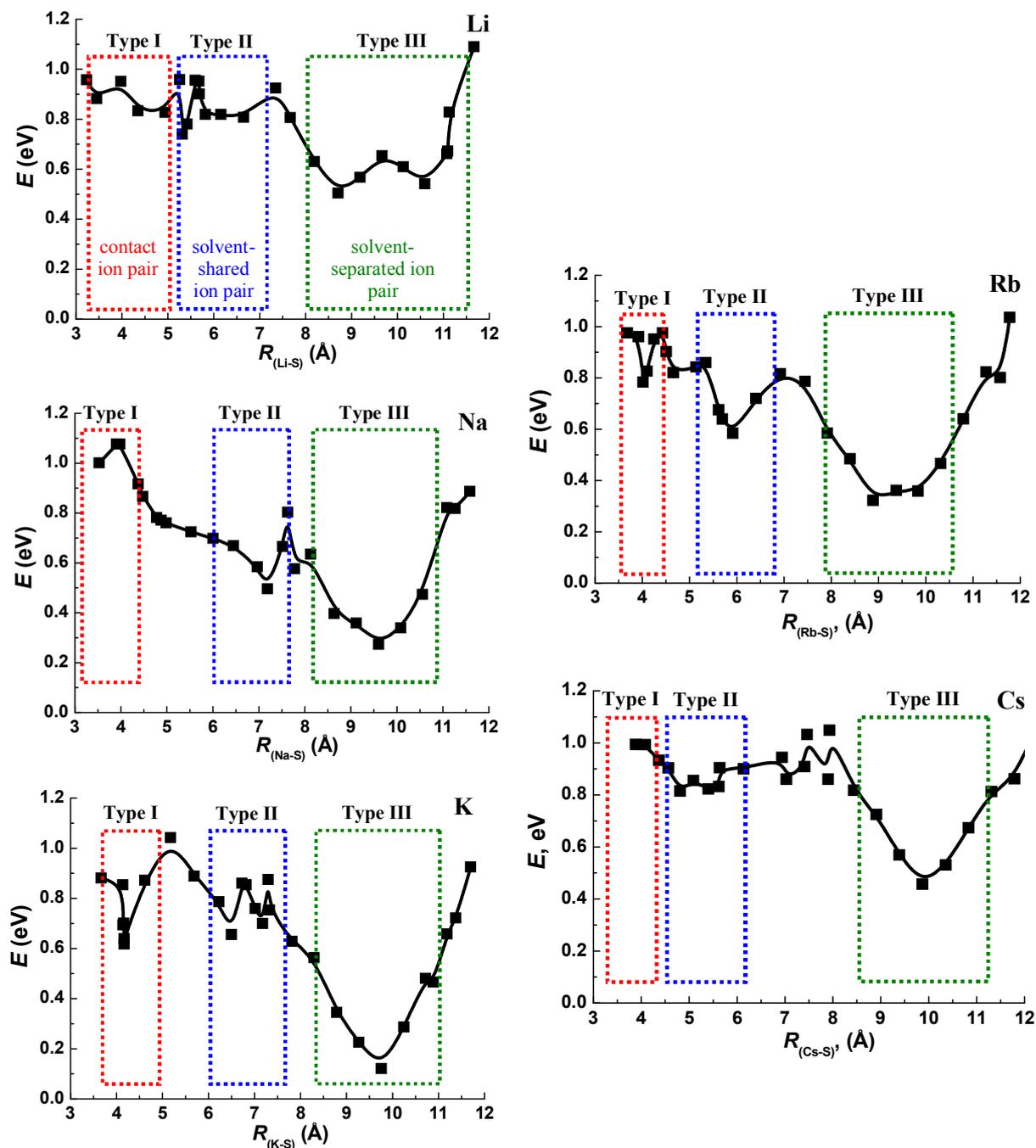


Рис. 1. Минимальные энергетические пути движения катионов в зависимости от расстояния  $R(\text{X-S})$  между атомом серы  $\text{SO}_3$ -группы и катионом  $\text{X}^+$  для  $\text{XNaFion} * 12\text{DMSO}$  ( $\text{X} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$ )

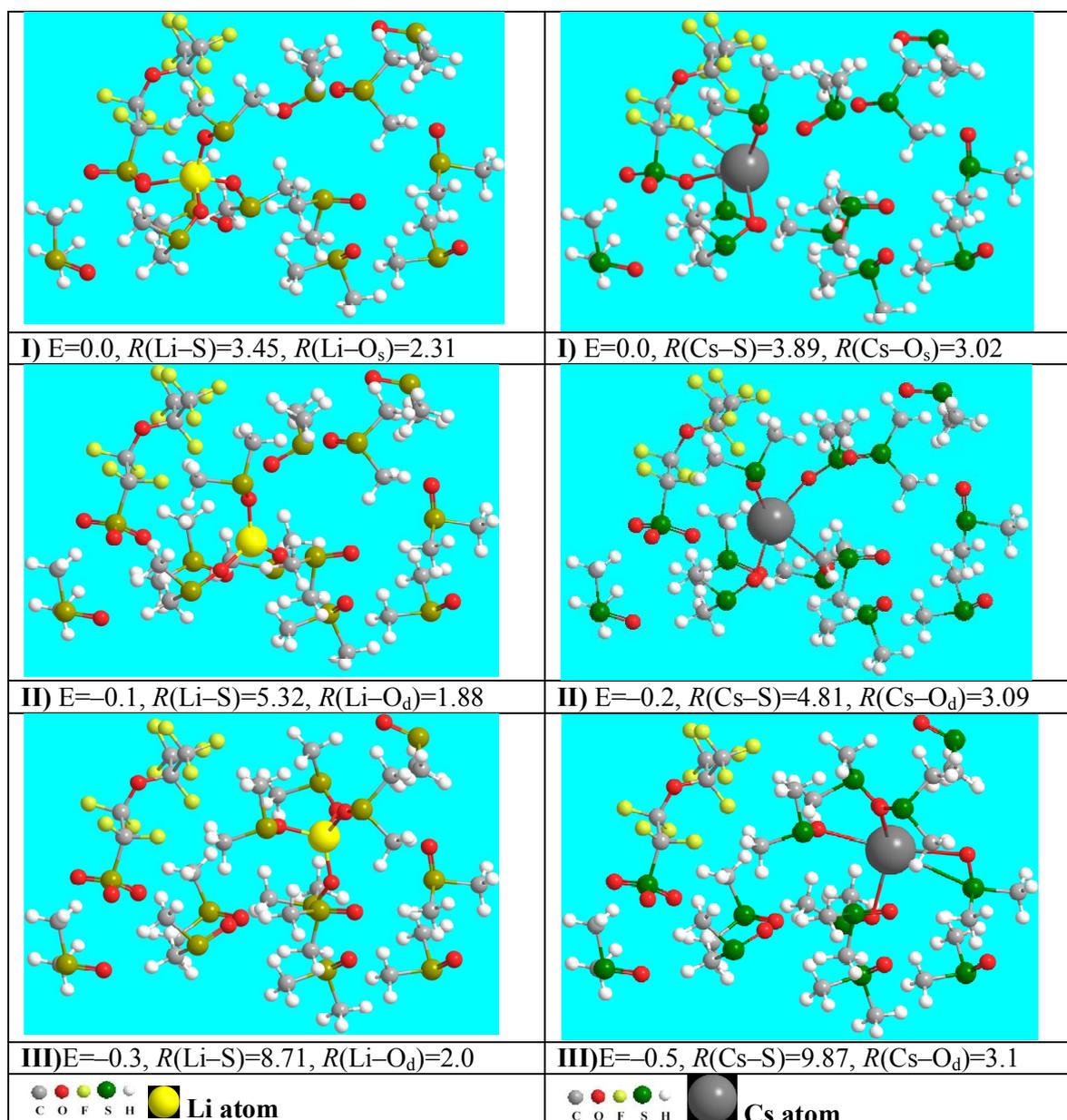


Рис. 2. Структуры и относительные энергии комплексов XNafion\*12DMSO (X = Li и Cs) в соответствии с рис. 1 (I, II и III)

Мы рассмотрели изолированный модельный кластер сольватированного иономера, который не учитывает влияние соседних анионов. В реальной системе, как следует из оценки концентрации сольватированных ионов,  $\text{SO}_3^-$ -группы расположены на среднем расстоянии 10-15 Å. Поэтому можно предположить, что перемещение катионов на 8-10 Å приведет к увеличению энергии системы из-за стерических помех. Эти предположения хорошо согласуются с результатами квантово-химического моделирования бесконечных нановолокон LiNafion\*nDMSO, где было показано наличие минимумов, соответствующих структурам II и III типов, но энергия III типа выше, чем у II типа из-за влияния соседнего аниона. Однако барьеры миграции, в основном определяемые перегруппировкой ДМСО, существенно не меняются в присутствии соседних  $\text{SO}_3^-$ -групп. Поэтому в дальнейшем в работе рассматривались только миграционные барьеры для обсуждения влияния катионной природы на перенос ионов.

Таким образом, в случае ионных форм лития и цезия переход от структуры типа I, в котором катион непосредственно связан с  $O_s$  ( $SO_3$ -группой) со структурой III типа, в которой катион окружен молекулами ДМСО, происходит с небольшими барьерами ( $\sim 0.2$  эВ). В случае натрия, калия, рубидия для перехода от структуры типа I к типу III, необходимо преодолеть барьеры 0.3-0.4 эВ. Эти результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными об энергиях проводимости активации 0.26 (Li<sup>+</sup>), 0.37-0.38 (Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>), 0.27 (Rb<sup>+</sup>) и 0.20 (Cs<sup>+</sup>) эВ.

На примере модельных структур  $X^+(DMSO)_2$  показано, что положительный заряд (по Малликену) на атоме X растет в ряду X = Li, Na, K, Rb, Cs. При X = Li, Na положительный заряд перетекает на группы  $CH_3$ . При X = Rb, Cs заряды изменяются на атомах кислорода и серы молекул ДМСО (что показывает их принципиальное отличие от Li и Na). Атом калия является смешанным вариантом, когда изменения зарядов на группах  $CH_3$  и атомах серы сходны по величине. Следует подчеркнуть, что только часть заряда находится на  $X^+$ -катионе. Оставшийся заряд распределяется на сольватной оболочке, однако суммарный заряд сольватированного катиона (катион плюс первый слой сольватной оболочки) во всех расчетах близок к единице.

Как видно из потенциальных кривых на рис. 1, для комплексов  $Na^+$  и  $K^+$  найдены самые высокие миграционные барьеры на пути структура I – структура III. С увеличением радиуса катиона при его смещении увеличивается количество молекул ДМСО, участвующих в реорганизации, расстояния, на которых молекулы должны быть сдвинуты, и, соответственно, энергетические барьеры. С другой стороны, с увеличением радиуса катиона энергия сольватации уменьшается. В связи с этим найдены минимальные энергетические барьеры для смещения катиона лития из-за наименьшего размера и эффективного распределения заряда вдоль сольватной оболочки. В случае ионов рубидия и цезия низкие барьеры обусловлены наименьшей энергией сольватации. Кроме того, эти катионы демонстрируют значительные взаимодействия с атомом серы молекулы ДМСО, что приводит к появлению нового канала катионной проводимости в системе. В результате последнего устраняется необходимость значительной реорганизации молекул ДМСО для перемещения катионов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (контракт № 17-79-30054). Расчеты проводились в Вычислительном центре при Институте проблем химической физики РАН.

## MODELING OF THE CHARGE TRANSPORT IN XNafion\*12DMSO, X = Li, Na, K, Rb, Cs

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

Institute of Problem of Chemical Physics RAS, Chernogolovka

The features of ion transfer in polymer electrolytes based on Nafion plasticized with dimethyl sulfoxide (XNafion \* 12 DMSO, X = Li, Na, K, Rb, Cs) were studied. The reasons for the presence of extremes on the graph of ionic conductivity in the series Li, Na, K, Rb, Cs.

Keywords: ionic conductivity, Nafion, DMSO.

# КОНЕЧНО-РАЗНОСТНАЯ СХЕМА ДЛЯ СТОХАСТИЧЕСКИ ВОЗМУЩЕННОГО СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ *SIN-GORDON* ВБЛИЗИ ПЕРЕНОРМИРОВАННОГО КВАНТОВЫМИ ЗАКОРОТКАМИ ОДНОСОЛИТОННОГО РЕШЕНИЯ

Н. В. Кирпиченкова, В. Я. Кирпиченкова, К. В. Крыжановский

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)  
им. М.И. Платова, Новочеркасск  
[wkirpich@rambler.ru](mailto:wkirpich@rambler.ru)

Разработаны статистически усредненные конечно-разностные схемы для нахождения усредненного численного решения основного уравнения математической модели вихревых токов в неупорядоченном *S-I-S* (*S* – сверхпроводник, *I* – изолятор) контакте – стохастически возмущенного (случайными квантовыми закоротками в неупорядоченном *I*-слое) стационарного уравнения *sin-Gordon* вблизи односолитонного решения невозмущенного уравнения.

Ключевые слова: математическое моделирование, конечно-разностная схема, вихрековые процессы, стохастически возмущенное стационарное уравнение *sin-Gordon*, неупорядоченный контакт, квантовые закоротки, односолитонное решение.

## 1. Постановка задачи

Математическая модель для исследования электродинамики вихреково-го солитона (флюксона) в рассматриваемом неупорядоченном (с примесями в *I*-слое) *S-I-S* контакте, основное уравнение которой имеет вид стохастически возмущенного уравнения *sin-Gordon* [1-3]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = k[1 + v(x)] \sin \varphi + \delta_r, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad t \geq 0, \quad (1)$$

где

$$k = \langle \lambda_J^{-2} \rangle = \left( \frac{\pi \mu_0 d \Delta}{\hbar} \right) \langle g \rangle, \quad v(x) = \frac{g(x) - \langle g \rangle}{\langle g \rangle}, \quad (2)$$

$\langle g \rangle$  – средняя туннельная проводимость неупорядоченного *I*-слоя,  $v(x)$  – случайная функция – относительное отклонение случайной туннельной проводимости неупорядоченного *I*-слоя от своего среднего значения – пространственный «шум» туннельной проводимости *I*-слоя,  $c_0$  – скорость Свихарта,  $\delta_r$  – нормированная плотность тока «смещения», компенсирующая радиационные потери флюксона, движущегося в неупорядоченном контакте,  $d = L_z + 2\lambda_L$ ,  $\lambda_L$  – лондоновская глубина проникновения магнитного поля в *S*-берега.

Контакт находится при температуре  $T = 0$  во внешнем магнитном поле  $(0, H_y, 0)$ . Одинаковые *S*-берега контакта разделены плоским *I*-слоем с характерными размерами: длина  $L_x \gg \lambda_J$  (длинный контакт), который в рамках рассматриваемой модели формально может считаться бесконечным, ширина  $L_y \ll \lambda_J$

(узкий контакт)  $\lambda_J$  – джозефсоновская глубина проникновения магнитного поля в контакт, толщина  $L_z \sim 10 a$ , где  $a \sim 10^{-10}$  м – межатомное расстояние. Высота потенциального барьера (моделирующего)  $I$ -слой:  $U_0 = \text{const}$ . Внутри  $I$ -слоя случайно распределены одинаковые притягивающие электроны примеси, на которых происходит рассеяние туннелирующих через  $I$ -слой электронов.  $N \gg 1$  – полное число примесей в  $I$ -слое,  $\Gamma_N = \{\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_N\}$  – их случайная пространственная конфигурация в  $I$ -слое,  $\bar{r}_i$  – координаты примесей.  $E_0$  – энергия локального электронного уровня на примеси,  $\alpha^{-1} = [2m(U_0 - E_0)/\hbar^2]^{1/2}$  – характерный радиус локализации электронной волновой функции на уровне  $E_0$ ,  $m$  – масса электрона,  $\hbar$  – постоянная Планка. Примеси распределены макроскопически однородно по объему  $V = L_x L_y L_z$   $I$ -слоя с безразмерной концентрацией  $c = n\alpha^{-3} \ll 1$  ( $n = N/V$ ). Уровень Ферми контакта  $\mu < U_0$  находится в ближайшей окрестности уровня  $E_0$  – внутри энергетического спектра туннельных резонансов, ассоциированных с КРПТ – квантовыми резонансно-перколяционными траекториями (квантовыми закоротками) [2, 4], пронизывающими  $I$ -слой и соединяющими противоположные  $S$ -берега контакта. При этом наибольший интерес для рассматриваемых в работе задач представляет область энергий  $|\mu - E_0| \leq \gamma$ ,  $\Delta \leq \gamma \ll \mu$ , где  $\gamma$  – характерная энергетическая ширина существенных туннельных резонансов,  $\Delta$  – энергетическая щель сверхпроводящего конденсата в  $S$ -берегах контакта. Волновая функция сверхпроводящего конденсата в  $S$ -берегах имеет вид:  $\psi_{1,2} = \psi_0 \cdot \exp(i\varphi_{1,2})$ , где  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  – фазы этой волновой функции в каждом из  $S$ -берегов. Модуль этой функции как обычно в таких задачах считается постоянным  $\psi_0 = \text{const}$ , не возмущенным слабой туннельной связью через  $I$ -слой между  $S$ -берегами, а возмущается лишь разность фаз  $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$  между  $S$ -берегами.

Математическая сложность и «многопараметричность» этой модели неупорядоченного джозефсоновского контакта со случайными квантовыми закоротками, большие массивы входных и выходных данных делают весьма затруднительным её достаточно детальное и точное аналитическое исследование в широкой области параметров модели, что приводит к необходимости разработки численных методов и основанных на них компьютерных моделей, предназначенных для анализа электродинамики джозефсоновского вихря в таком контакте.

## 2. Метод стохастического усреднения конечно-разностной схемы

Построим статистически усредненную конечно-разностную схему для стохастически возмущенного квантовыми закоротками стационарного уравнения *sin-Gordon*, которое в рассматриваемом здесь неупорядоченном  $S$ - $I$ - $S$  контакте имеет вид, вытекающий из (1) при  $\partial^2 \dots / \partial t^2 = 0$ ,  $\delta_r = 0$ :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = k(1 + v(x))\sin\varphi, \quad -\infty \leq x \leq \infty, \quad (3)$$

с целью нахождения его численного решения вблизи односолитонного решения невозмущенного уравнения, которое требуется для нахождения параметров джоозефсоновского вихря в неупорядоченном  $S-I-S$  контакте.

Трехточечная конечно-разностная схема для этого уравнения имеет вид:

$$\frac{\Phi_{i+1} - 2\Phi_i + \Phi_{i-1}}{h^2} = k \sin \Phi_i + k v_i \sin \Phi_i. \quad (4)$$

Усредняя это уравнение по стохастическому ансамблю  $\{\Gamma_N\}$ , получаем:

$$\frac{\langle \Phi \rangle_{i+1} - 2\langle \Phi \rangle_i + \langle \Phi \rangle_{i-1}}{h^2} = k \langle \sin \Phi_i \rangle + k \langle v_i \sin \Phi_i \rangle. \quad (5)$$

Основные трудности при реализации этой конечно-разностной схемы состоят в нахождении выражений для средних  $\langle \sin \Phi_i \rangle$  и  $\langle v_i \sin \Phi_i \rangle$  через  $\langle \Phi_i \rangle$  для «замыкания» конечно-разностной схемы (4).

Задача состоит в нахождении численного решения уравнения (3) вблизи односолитонного решения невозмущенного (при  $v(x)=0$ ) уравнения:

$$\frac{d^2 \Phi_0}{dx^2} = k \sin \Phi_0, \quad -\infty \leq x < \infty.$$

Односолитонное решение этого уравнения, соответствующее граничным условиям

$$\Phi(-\infty) = 0, \quad \Phi(\infty) = 2\pi,$$

имеет вид [1]:

$$\Phi_0(x) = 4 \operatorname{arctg}(e^{\sqrt{k}x}). \quad (6)$$

Для вычисления средних  $\langle \sin \Phi(x) \rangle$  и  $\langle v(x) \sin \Phi(x) \rangle$ , входящих в правую часть уравнения (5), представим искомое решение с точностью до членов  $\sim \|v\|^2 \ll 1$  в виде:

$$\Phi(x) = \Phi_0(x) + \Phi_1(x) + \Phi_2(x),$$

где  $\Phi_1(x) \sim \|v\|$ ,  $\Phi_2(x) \sim \|v\|^2$  – члены, обусловленные флуктуациями туннельной проводимости, а  $\Phi_0(x)$  дается (6).

Разложим  $\sin \Phi(x)$  в правой части уравнения (5.1) вблизи односолитонного решения (6) с точностью до членов  $\sim \|v\|^2$ :

$$\begin{aligned} \sin \Phi(x) &= \sin(\Phi_0(x) + \Phi_1(x) + \Phi_2(x)) = \sin \Phi_0(x) + \cos \Phi_0(x) \cdot \Phi_1(x) + \cos \Phi_0(x) \cdot \Phi_2(x) - \\ &\quad - \frac{1}{2} \sin \Phi_0(x) \cdot \Phi_1^2(x). \end{aligned} \quad (7)$$

Подставляя разложение (7) в правую часть (3) и удерживая члены одинакового порядка по  $\|v\|$ , получаем уравнения для функций  $\Phi_0(x)$ ,  $\Phi_1(x)$ ,  $\Phi_2(x)$ :

$$\begin{cases} \frac{d^2\varphi_0}{dx^2} = k \sin \varphi_0, \\ \frac{d^2\varphi_1}{dx^2} = k \cos \varphi_0 \cdot \varphi_1(x) + kv(x)\sin \varphi_0(x), \\ \frac{d^2\varphi_2}{dx^2} = k \cos \varphi_0 \cdot \varphi_2(x) + k \cos \varphi_0 \cdot v(x)\varphi_1(x) - \frac{1}{2}k \sin \varphi_0 \cdot \varphi_1^2(x). \end{cases} \quad (8)$$

Усредняя выражение (7) по  $\{\Gamma_N\}$ , получаем с точностью до членов  $\sim \|v\|^2$ :

$$\langle \sin \varphi(x) \rangle = \sin \langle \varphi(x) \rangle - \frac{1}{2} \sin \varphi_0(x) \langle \varphi_1^2(x) \rangle. \quad (9)$$

Далее найдем среднее  $\langle v(x)\sin \varphi(x) \rangle$ . С точностью до членов  $\sim \|v\|^2$  получим, учитывая (7),

$$\langle v(x)\sin \varphi(x) \rangle = \left\langle v(x) \left[ \sin \varphi_0(x) + \cos \varphi_0(x)\varphi_1(x) + \cos \varphi_0(x)\varphi_2(x) - \frac{1}{2} \sin \varphi_0(x)\varphi_1^2(x) \right] \right\rangle.$$

Учитывая, что  $\sin \varphi_0(x)$  и  $\cos \varphi_0(x)$  – не случайные функции, имеем

$$\langle v(x)\sin \varphi_0(x) \rangle = \langle v(x) \rangle \cdot \sin \varphi_0(x) = 0.$$

Члены, содержащие  $\langle v(x)\varphi_2(x) \rangle$ ,  $\langle v(x)\varphi_1^2(x) \rangle \sim \|v\|^3$ , не учитываются в принятом приближении.

Таким образом, имеем с принятой точностью

$$\langle v(x)\sin \varphi(x) \rangle = \cos \varphi_0 \langle v(x)\varphi_1(x) \rangle. \quad (10)$$

Следовательно, как видно из (9), (10), для нахождения средних  $\langle \sin \varphi(x) \rangle$  и  $\langle v(x)\sin \varphi(x) \rangle$ , входящих в разностную схему (4), необходимо сначала получить интегральное представление для  $\varphi_1(x)$ . Это представление для  $\varphi_1(x)$  ищем из второго уравнения системы (8), которое перепишем в виде:

$$\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} - k \cos \varphi_0 \cdot \varphi_1(x) = kv(x)\sin \varphi_0(x). \quad (11)$$

Учитывая, что

$$\cos \varphi_0(x) = \cos\left(4 \operatorname{arctg}\left(e^{\sqrt{k} \cdot x}\right)\right) = 1 - \frac{2}{\operatorname{ch}^2(\sqrt{k} \cdot x)},$$

уравнение (11) перепишем в виде:

$$\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} - k \left[ 1 - \frac{2}{\operatorname{ch}^2(\sqrt{k}x)} \right] \cdot \varphi_1(x) = kv(x)\sin \varphi_0(x). \quad (12)$$

Уравнение (12) есть неоднородное линейное уравнение с переменным коэффициентом при  $\varphi_1(x)$ , и его решение есть сумма общего решения соответ-

вующего однородного уравнения и частного решения этого неоднородного уравнения.

Решение однородного уравнения

$$\frac{d^2 \varphi_1^{(0)}}{dx^2} - k \left[ 1 - \frac{2}{\operatorname{ch}^2(\sqrt{k}x)} \right] \cdot \varphi_1^{(0)}(x) = 0, \quad (13)$$

конечное при  $x = \pm\infty$ , имеет вид (что несложно проверить непосредственным вычислением):

$$\varphi_1^{(0)}(x) = \frac{C}{\operatorname{ch}(\sqrt{k}x)}, \quad (14)$$

где  $C$  – произвольная константа.

Основываясь на решении (14), введем функцию Грина соотношением:

$$\Gamma(x, x') = \begin{cases} \frac{\operatorname{ch}(\sqrt{k}x')}{2\operatorname{ch}(\sqrt{k}x)}, & x < x', \\ -\frac{\operatorname{ch}(\sqrt{k}x')}{2\operatorname{ch}(\sqrt{k}x)}, & x > x'. \end{cases} \quad (15)$$

или

$$\Gamma(x, x') = -\operatorname{sign}(x - x') \cdot \frac{\operatorname{ch}(\sqrt{k}x')}{\operatorname{ch}(\sqrt{k}x)}, \quad (16)$$

где «знаковая» функция  $\operatorname{sign}(x)$  определяется соотношениями

$$\operatorname{sign}(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ -1, & x < 0. \end{cases}$$

Прямым вычислением нетрудно убедиться, что функция Грина (16) удовлетворяет уравнению:

$$\frac{d^2 \Gamma(x, x')}{dx^2} - k \left[ 1 - \frac{2}{\operatorname{ch}^2(\sqrt{k}x)} \right] \cdot \Gamma(x, x') = -\delta'_x(x - x'), \quad (17)$$

где в правой части этого уравнения стоит производная по переменной  $x$  от дельта-функции  $\delta(x - x')$  [5]:

$$\delta'_x(x - x') = \frac{d}{dx} \delta(x - x').$$

Заметим, что свойства обобщенной функции  $\delta(x - x')$  и её производных хорошо описаны в [5]. Отметим также, что функция Грина  $\Gamma(x, x')$  определена соотношениями (15), (16) с точностью до решения однородного уравнения (14). То есть в качестве функции Грина может быть взята и функция

$$\Gamma(x, x') = \begin{cases} \frac{\operatorname{ch}(\sqrt{k}x') + C_1}{2\operatorname{ch}(\sqrt{k}x)}, & x < x', \\ -\frac{\operatorname{ch}(\sqrt{k}x') - C_1}{2\operatorname{ch}(\sqrt{k}x)}, & x > x', \end{cases} \quad (18)$$

где  $C_1$  – произвольная константа.

С помощью функции Грина (16) решение неоднородного уравнения (12) представим в виде

$$\varphi_1(x) = \varphi_1^{(0)}(x) - \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x') \int_{-\infty}^{x'} kv(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' dx'. \quad (19)$$

Покажем теперь, что (19) действительно есть решение уравнения (12). Для этого подействуем на левую и правую части (19) оператором  $\hat{D}_x \dots$  левой части уравнения (12)

$$\hat{D}_x \dots = \frac{d \dots}{dx^2} - k \left[ 1 - \frac{2}{\operatorname{ch}^2(\sqrt{k}x)} \right] \dots$$

Получаем:

$$\hat{D}_x \varphi_1(x) = \hat{D}_x \varphi_1^{(0)}(x) - \hat{D}_x \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x') \int_{-\infty}^{x'} kv(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' dx'. \quad (20)$$

Первый член в правой части этого уравнения равен нулю, так как  $\varphi_1^{(0)}(x)$  есть решение однородного уравнения (13)

$$\hat{D}_x \varphi_1^{(0)}(x) = 0.$$

Во втором члене в правой части (20) оператор  $\hat{D}_x$  можно «протащить» через первый интеграл (по переменной  $x'$ ), так как этот оператор  $\hat{D}_x$  действует на «свободную» переменную  $x$ :

$$-\hat{D}_x \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x') \int_{-\infty}^{x'} kv(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' dx' = - \int_{-\infty}^{\infty} \hat{D}_x \Gamma(x, x') \int_{-\infty}^{x'} kv(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' dx'. \quad (21)$$

Далее, учитывая (17), получаем, что интеграл (21) принимает вид:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'_x(x - x') \int_{-\infty}^{x'} kv(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' dx'. \quad (22)$$

Затем, учитывая, что [5]

$$\delta'_x(x - x') = -\delta'_{x'}(x - x'),$$

интеграл (22) записываем в виде:

$$- \int_{-\infty}^{\infty} \delta'_{x'}(x-x') \int_{-\infty}^{x'} k v(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' dx' \quad (23)$$

Учитывая теперь, что при действии на некоторую функцию  $F(x')$  [5]

$$\delta'_{x'}(x-x')F(x') = -\delta(x-x')F'_{x'}(x'),$$

преобразуем интеграл (23) к виду:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x') \left[ \int_{-\infty}^{x'} k v(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' \right]'_{x'} dx' \quad (24)$$

Далее, дифференцируя интеграл, стоящий в квадратных скобках в (24), по верхнему пределу, получаем

$$\left[ \int_{-\infty}^{x'} k v(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' \right]'_{x'} = k v(x') \sin \varphi_0(x'). \quad (25)$$

Подставляя теперь (25) в (24), получаем окончательно:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x') k v(x') \sin \varphi_0(x') dx' = k v(x) \sin \varphi_0(x).$$

Возвращаясь теперь к формуле (20), получаем

$$\hat{D}_x \varphi_1(x) = k v(x) \sin \varphi_0(x)$$

и доказываем, таким образом, что (19) действительно есть решение уравнения (12).

Учитывая далее, что  $\varphi_1(x) \sim \|v\|$ , т.е. в отсутствие возмущения ( $v(x)=0$ ) функция  $\varphi_1(x)$  должна обращаться в нуль, получаем, что произвольная константа  $C$  в решении однородного уравнения (14) в рассматриваемых условиях должна равняться нулю ( $C=0$ ), т.е.  $\varphi_1^{(0)}(x)=0$ .

Таким образом, получаем из (19) окончательный вид решения уравнения (12)

$$\varphi_1(x) = - \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x') \int_{-\infty}^{x'} k v(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' dx', \quad (26)$$

где пропагатор  $\Gamma(x, x')$  определен в (16), а  $\varphi_0(x)$  есть односолитонное решение (6).

Отметим, в частности, что

$$\langle \varphi_1(x) \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x') \int_{-\infty}^{x'} k \langle v(x'') \rangle \sin \varphi_0(x'') dx'' dx' = 0$$

в соответствие с тем, что  $\langle v(x) \rangle = 0$  (4.15).

Дальнейшая задача состоит в нахождении средних  $\langle v(x) \varphi_1(x) \rangle$  и  $\langle \varphi_1^2(x) \rangle$  на основании формулы (26).

Вычислим сначала

$$\langle v(x)\varphi_1(x) \rangle = - \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x') \int_{-\infty}^{x'} k \langle v(x)v(x'') \rangle \sin \varphi_0(x'') dx'' dx'.$$

Учитывая, что корреляционная функция

$$\langle v(x)v(x'') \rangle = w\delta(x - x''),$$

получаем

$$\langle v(x)\varphi_1(x) \rangle = -kw \sin \varphi_0(x) \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x') dx'.$$

Вычисляя входящий сюда интеграл от функции Грина, получаем, отбрасывая бесконечную нефизическую константу, которая «зануляется» подходящим выбором константы  $C_1$  в (18)

$$\langle v(x)\varphi_1(x) \rangle = \frac{w\sqrt{k}}{2} \sin \varphi_0(x) \operatorname{th}(\sqrt{k}x). \quad (27)$$

Вычислим теперь

$$\begin{aligned} \langle \varphi_1^2(x) \rangle &= \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x') \int_{-\infty}^{x'} kv(x'') \sin \varphi_0(x'') dx'' dx' \cdot \right. \\ &\quad \left. \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x''') \int_{-\infty}^{x'''} kv(x''''') \sin \varphi_0(x''''') dx'''' dx''' \right\rangle = k^2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(x, x') \Gamma(x, x''') \cdot \\ &\quad \cdot \left[ \int_{-\infty}^{x'} \int_{-\infty}^{x'''} \langle v(x'')v(x''''') \rangle \sin \varphi_0(x'') \sin \varphi_0(x''''') dx'' dx''''' \right] dx' dx'''. \end{aligned} \quad (28)$$

Учитывая, что корреляционная функция

$$\langle v(x'')v(x''''') \rangle = w\delta(x'' - x'''''),$$

а односолитонное решение есть

$$\varphi_0(x) = 4 \operatorname{arctg}(e^{\sqrt{k}x}),$$

после вычисления интегралов, входящих в (28), получаем:

$$\langle \varphi_1^2(x) \rangle = w\sqrt{k} \cdot \operatorname{th}^2(\sqrt{k}x). \quad (29)$$

Учитывая (27) и (29), находим средние (9) и (10), входящие в конечно-разностную схему (4):

$$\begin{aligned} \langle v_i \sin \varphi_i \rangle &= \langle v(x_i)\varphi_1(x_i) \rangle = \frac{\sqrt{k}w}{2} \operatorname{th}(\sqrt{k}x_i) \sin \varphi_0(x_i), \\ \langle \sin \varphi_i \rangle &= \langle \sin \varphi(x_i) \rangle = \sin \langle \varphi(x_i) \rangle - \frac{1}{2} w\sqrt{k} \cdot \operatorname{th}^2(\sqrt{k}x_i) \sin \varphi_0(x_i), \end{aligned}$$

а сама эта явная конечно-разностная схема принимает вид:

$$\frac{\langle \varphi \rangle_{i+1} - 2\langle \varphi \rangle_i + \langle \varphi \rangle_{i-1}}{h^2} = k \sin \langle \varphi \rangle_i - \frac{w k \sqrt{k}}{2} \left[ \operatorname{th}^2(\sqrt{k} x_i) - \operatorname{th}(\sqrt{k} x_i) \cos \varphi_0(x_i) \right] \sin \varphi_0(x_i). \quad (30)$$

Граничные условия, требующиеся для «разгона» этой схемы, имеют вид, вытекающий из (6):

$$\langle \varphi \rangle_0 = \pi, \quad \langle \varphi \rangle_1 = \pi + 2\sqrt{k} h.$$

Таким образом, конечно-разностная схема (30) может быть использована при численном моделировании вихретоковых процессов в джозефсоновских контактах с квантовыми закоротками.

#### Литература

1. Бароне А., Патерно Дж. Эффект Джозефсона. Физика и применение. – М.: 1984. 639 с.
2. Минеев, М.Е. Движение джозефсоновского вихря в поле случайного потенциала / М.Е. Минеев, М.В. Фейгельман, В.В. Шмидт // ЖЭТФ. – 1981. – Т. 81. – С.290-298.
3. Кирпиченков, В.Я. Влияние квантовых резонансно-перколяционных траекторий на параметры джозефсоновского вихря / В.Я. Кирпиченков // ЖЭТФ. – 2007. – Т. 132. – С. 294-296.
4. Лифшиц И.М, Кирпиченков В.Я. О туннельной прозрачности неупорядоченных систем // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. С. 989-1016.
5. Владимиров, В.С. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1971. – 512 с.

### FINITE-DIFFERENCE SCHEME FOR STOCHASTICALLY PERTURBED STATIONARY EQUATION OF SIN-GORDON NEAR RENOVATED BY QUANTUM SHORTCUTS A SINGLE-SOLITON SOLUTION

N. V. Kirpichenkova, V. Ya. Kirpichenkova, K. V. Kryzhanovskiy

Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Novocheerkassk

The statistically averaged finite difference schemes were developed to find the averaged numerical solution of the basic equation of the mathematical model of eddy currents in a disordered S-I-S (S-superconductor, I-insulator) contact-stochastically perturbed (random quantum short-circuits in the disordered I-layer) of the stationary *sin-Gordon* equation near one-soliton solution of the unperturbed equation.

Keywords: math modeling, finite-difference scheme, eddy current processes, stochastically perturbed stationary equation sin-Gordon, disordered contact, quantum shorting, one-soliton solution.

## ИССЛЕДОВАНИЕ УСРЕДНЕННОЙ КОНЕЧНО-РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ ДЛЯ СТОХАСТИЧЕСКИ ВОЗМУЩЕННОГО СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ SIN-GORDON

Н. В. Кирпиченкова, В. Я. Кирпиченкова, К. В. Крыжановский

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)  
им. М.И. Платова, Новочеркасск  
[wkirpich@rambler.ru](mailto:wkirpich@rambler.ru)

Для разработанной статистически усредненной конечно-разностной схемы нахождения численного решения стационарного, стохастически возмущенного квантовыми закоротками уравнения *sin-Gordon* вблизи односолитонного решения теоретически доказано, что разработанная схема устойчива и сходится к «точному» усредненному решению на характерных пространственных и временных масштабах решаемых задач.

Ключевые слова: математическое моделирование, конечно-разностная схема, вихретоковые процессы, стохастически возмущенное стационарное уравнение *sin-Gordon*, неупорядоченный контакт, квантовые закоротки, односолитонное решение.

### 1. Погрешность аппроксимации дифференциального оператора

Найдем погрешность аппроксимации дифференциального оператора для разработанной в [1] статистически усредненной конечно-разностной схемы нахождения численного решения стационарного, стохастически возмущенного квантовыми закоротками уравнения *sin-Gordon*:

$$\frac{\langle \varphi \rangle_{i+1} - 2\langle \varphi \rangle_i + \langle \varphi \rangle_{i-1}}{h^2} = k \sin \langle \varphi \rangle_i - \frac{wk\sqrt{k}}{2} \left[ \operatorname{th}^2(\sqrt{k}x_i) - \operatorname{th}(\sqrt{k}x_i) \cos \varphi_0(x_i) \right] \sin \varphi_0(x_i). \quad (1)$$

Соответствующее дифференциальное уравнение с граничными условиями имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varphi}{dx^2} &= k \sin \varphi + f(x), \quad -\infty \leq x \leq \infty, \\ \varphi(x=0) &= \pi, \\ \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=0} &= 2\sqrt{k}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $f(x) = -\frac{1}{2}wk\sqrt{k} \left[ \operatorname{th}^2(\sqrt{k}x) - \operatorname{th}(\sqrt{k}x) \cos \varphi_0(x) \right] \sin \varphi_0(x)$ .

Пусть  $\tilde{\varphi}_i$  – сеточная функция  $\tilde{\varphi}_i = \tilde{\varphi}(x_i)$ , являющаяся решением конечно-разностной задачи, заданная в узлах равномерной сетки  $x_i = i \cdot h$ ,  $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $h = \text{const}$  – шаг сетки. Конечно-разностная схема, используемая для решения задачи (2) имеет вид:

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{\varphi}_{i+1} - 2\tilde{\varphi}_i + \tilde{\varphi}_{i-1}}{h^2} - k \sin \tilde{\varphi}_i - f(x_i) &= 0, \\ \tilde{\varphi}_0 &= \pi, \\ \tilde{\varphi}_1 &= \pi + 2\sqrt{kh}.\end{aligned}\tag{3}$$

Для нахождения искомой погрешности подставим в (3) вместо сеточной функции  $\tilde{\varphi}_i$  точное решение задачи (2) в узлах сетки:  $\varphi_i = \varphi(x_i)$

$$\frac{\varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1}}{h^2} - k \sin \varphi_i - f(x_i) = \psi_i,\tag{4}$$

где в правой части  $\psi_i = \psi(x_i, h)$  – погрешность (невязка) аппроксимации дифференциального оператора конечно-разностным.

Считая, что функция  $\varphi(x)$  имеет непрерывные производные до четвертого порядка включительно, запишем её разложение в ряд Тейлора в точках  $x_{i+1} = x_i + h$ ,  $x_{i-1} = x_i - h$  по степеням  $h$ :

$$\begin{aligned}\varphi_{i+1} = \varphi(x_i + h) &= \varphi(x_i) + \frac{d\varphi}{dx}\Big|_{x_i} \cdot h + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2\varphi}{dx^2}\Big|_{x_i} \cdot h^2 + \frac{1}{6} \cdot \frac{d^3\varphi}{dx^3}\Big|_{x_i} \cdot h^3 + \\ &+ \frac{1}{24} \cdot \frac{d^4\varphi}{dx^4}\Big|_{x_i} \cdot h^4 + O(h^5),\end{aligned}\tag{5}$$

$$\begin{aligned}\varphi_{i-1} = \varphi(x_i - h) &= \varphi(x_i) - \frac{d\varphi}{dx}\Big|_{x_i} \cdot h + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2\varphi}{dx^2}\Big|_{x_i} \cdot h^2 - \frac{1}{6} \cdot \frac{d^3\varphi}{dx^3}\Big|_{x_i} \cdot h^3 + \\ &+ \frac{1}{24} \cdot \frac{d^4\varphi}{dx^4}\Big|_{x_i} \cdot h^4 + O(h^5).\end{aligned}\tag{6}$$

Подставляя разложения (5), (6) в (4) и учитывая, что точная функция  $\varphi(x)$  в узлах сетки  $x = x_i$  удовлетворяет уравнению (2), а именно

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}\Big|_{x_i} = k \sin \varphi_i + f(x_i),$$

получаем формулу для невязки аппроксимации (4)

$$\psi_i = \frac{1}{12} \cdot \frac{d^4\varphi}{dx^4}\Big|_{x_i} \cdot h^2.$$

Тогда, в локальной – чебышевской норме имеем:

$$\|\psi\|_c = \max_i |\psi_i| = \max_i \left| \frac{1}{12} \cdot \frac{d^4\varphi}{dx^4}\Big|_{x_i} \right| \cdot h^2.\tag{7}$$

Таким образом, погрешность аппроксимации дифференциального оператора для конечно-разностной схемы (3) имеет в чебышевской норме второй порядок

$$\|\psi\| = O(h^2)$$

в классе функций  $\varphi(x)$ , имеющих непрерывные производные до четвертого порядка включительно.

## 2. Погрешность аппроксимации граничных условий

Вычислим погрешность (невязку) граничных условий в (3). Введем в узлах сетки погрешность

$$\delta\varphi_i = \tilde{\varphi}_i - \varphi(x_i) = \tilde{\varphi}_i - \varphi_i.$$

Тогда из (2), (3) следует:

$$\begin{aligned} \delta\varphi_0 &= \tilde{\varphi}_0 - \varphi(x=0) = 0, \\ \frac{\tilde{\varphi}_1 - \tilde{\varphi}_0}{h} &= 2\sqrt{k}. \end{aligned} \quad (8)$$

Подставим в (8) точные значения  $\varphi_1 = \varphi(x_1)$  и  $\varphi_0 = \varphi(x=0)$  вместо  $\tilde{\varphi}_1$  и  $\tilde{\varphi}_0$ , получим уравнение для невязки граничного условия

$$\frac{\varphi_1 - \varphi_0}{h} = 2\sqrt{k} + \psi_1. \quad (9)$$

Подставляя в (9) разложение в ряд Тейлора

$$\varphi_1 = \varphi(h) = \varphi_0 + \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=0} \cdot h + \frac{1}{2} \cdot \left. \frac{d^2\varphi}{dx^2} \right|_{x=0} \cdot h^2 + \frac{1}{6} \cdot \left. \frac{d^3\varphi}{dx^3} \right|_{x=0} \cdot h^3 + O(h^4)$$

и учитывая, что в рассматриваемой нами задаче (2)  $f(x=0) = 0$ , поскольку для односолитонного решения, имеющего вид [2]:

$$\varphi_0(x) = 4 \operatorname{arctg}(e^{\sqrt{k}x}),$$

выполняется:  $\sin \varphi_0(x=0) = 0$ , а, следовательно, в силу (2) и  $\left. \frac{d^2\varphi}{dx^2} \right|_{x=0} = 0$ , получаем:

$$\frac{\varphi_1 - \varphi_0}{h} = 2\sqrt{k} + \left. \frac{1}{6} \frac{d^3\varphi}{dx^3} \right|_{x=0} \cdot h^2. \quad (10)$$

Тогда из (8) и (10) получаем

$$\frac{\delta\varphi_1 - \delta\varphi_0}{h} = - \left. \frac{1}{6} \frac{d^3\varphi}{dx^3} \right|_{x=0} \cdot h^2,$$

а отсюда, учитывая, что  $\delta\varphi_0 = 0$ , находим

$$\delta\varphi_1 = - \left. \frac{1}{6} \frac{d^3\varphi}{dx^3} \right|_{x=0} \cdot h^3. \quad (11)$$

Таким образом, погрешность аппроксимации граничного условия (11), приводит к погрешности в первом узле

$$|\delta\varphi_1| = O(h^3).$$

### 3. Устойчивость конечно-разностной схемы по отношению к возмущению, вызванному погрешностью аппроксимации граничных условий. Метод «замороженных» коэффициентов

Задача для исследования устойчивости возмущений  $\delta\varphi_i = \tilde{\varphi}_i - \varphi_i$  получается путем вычитания из уравнения (3) уравнения (4). При этом, считая  $\delta\varphi_i$  малой величиной, учтём, что

$$\sin \tilde{\varphi}_i = \sin(\varphi_i + \delta\varphi_i) = \sin \varphi_i + \cos \varphi_i \delta\varphi_i.$$

В результате получаем задачу для возмущений

$$\begin{aligned} \delta\varphi_{i+1} - 2\left(1 + \frac{kh^2}{2} \cos \varphi_i\right) \delta\varphi_i + \delta\varphi_{i-1} &= -\psi_i h^2, \\ \delta\varphi_0 &= 0, \\ \delta\varphi_1 &= -\frac{1}{6} \frac{d^3 \varphi}{dx^3} \Big|_{x=0} \cdot h^3. \end{aligned} \tag{12}$$

В связи с уравнением (12) отметим следующее:

- 1) уравнение нелинейное за счет присутствия в коэффициенте перед  $\delta\varphi_i$  члена, содержащего  $\cos \varphi_i$ ;
- 2) специфика решаемой задачи приводит к малому параметру  $kh^2 \ll 1$ , стоящему перед  $\cos \varphi_i$ .

Для исследования устойчивости решений нелинейного уравнения (12) применим способ «замороженных» коэффициентов [3], заменяя  $\cos \varphi_i$  в этом уравнении на некоторый параметр  $\alpha$ , который может изменяться в пределах  $-1 \leq \alpha \leq 1$ . При этом можно надеяться, что поскольку для всех узлов схемы в коэффициенте перед  $\delta\varphi_i$  в (12) для нелинейности будет выполняться условие

$$\frac{kh^2}{2} |\cos \varphi_i| \ll 1,$$

то способ «замороженных» коэффициентов, линеаризующий исходно нелинейное уравнение (12), даст приемлемый результат при исследовании устойчивости.

Таким образом, линеаризованная задача (12) для исследования устойчивости конечно-разностной схемы принимает вид:

$$\begin{aligned} \delta\varphi_{i+1} - 2\left(1 + \frac{kh^2}{2} \alpha\right) \delta\varphi_i + \delta\varphi_{i-1} &= -\psi_i h^2, \\ \delta\varphi_0 &= 0, \\ \delta\varphi_1 &= -\frac{1}{6} \frac{d^3 \varphi}{dx^3} \Big|_{x=0} \cdot h^3. \end{aligned} \tag{13}$$

Как обычно [4], при исследовании устойчивости схемы по отношению к возмущению граничных условий, будем рассматривать однородное уравнение

(13), положив формально невязку аппроксимации дифференциального оператора  $\psi_i = 0$ . Тогда задача (13) принимает вид:

$$\begin{aligned} \delta\varphi_{i+1} - 2\left(1 + \frac{kh^2}{2}\alpha\right)\delta\varphi_i + \delta\varphi_{i-1} &= 0, \quad -1 \leq \alpha \leq 1, \\ \delta\varphi_0 &= 0, \\ \delta\varphi_1 &= -\frac{1}{6} \left. \frac{d^3\varphi}{dx^3} \right|_{x=0} \cdot h^3. \end{aligned} \quad (14)$$

Будем искать решение уравнения (14) в виде

$$\delta\varphi_i = \lambda^{i-1} \delta\varphi_1. \quad (15)$$

Подставляя (15) в уравнение (14), получаем квадратное уравнение для  $\lambda$ :

$$\lambda^2 - 2\left(1 + \frac{kh^2}{2}\alpha\right)\lambda + 1 = 0,$$

корни которого имеют вид

$$\lambda_{1,2} = \left(1 + \frac{kh^2}{2}\alpha\right) \pm \sqrt{\left(1 + \frac{kh^2}{2}\alpha\right)^2 - 1}. \quad (16)$$

Проанализируем теперь корни (16) в зависимости от величины «замороженного» параметра  $-1 \leq \alpha \leq 1$ .

1) Рассмотрим сначала значение «замороженного» параметра  $\alpha = 0$ . В этом случае имеем два одинаковых корня  $\lambda_{1,2} = 1$  и как видно из (15) погрешность (возмущение) граничного условия не возрастает с ростом  $i$ :

$$\|\delta\varphi_i\|_c = \frac{1}{6} \left. \frac{d^3\varphi}{dx^3} \right|_{x=0} \cdot h^3,$$

то есть

$$\|\delta\varphi_i\|_c = O(h^3) \text{ при } \alpha = 0. \quad (17)$$

2) Область отрицательных значений «замороженного» параметра:  $-1 \leq \alpha < 0$ . В этой области имеются два комплексно сопряженных корня (16)

$$\lambda_{1,2} = \left(1 + \frac{kh^2}{2}\alpha\right) \pm i_0 \cdot \sqrt{1 - \left(1 + \frac{kh^2}{2}\alpha\right)^2}, \quad i_0 = \sqrt{-1}$$

при этом

$$|\lambda_{1,2}| = 1.$$

В этой области «замороженного» параметра граничное возмущение также не возрастает по норме:

$$\|\delta\varphi_i\|_c = \frac{1}{6} \left. \frac{d^3\varphi}{dx^3} \right|_{x=0} \cdot h^3,$$

то есть

$$\|\delta\varphi_i\|_c = O(h^3) \text{ при } -1 \leq \alpha < 0. \quad (18)$$

3) Рассмотрим теперь область положительных значений «замороженного» параметра  $0 < \alpha \leq 1$ . В этой области корни имеют вид

$$\lambda_{1,2} = \left(1 + \frac{kh^2}{2}\alpha\right) \pm \sqrt{kh^2\alpha + \frac{k^2h^4}{4}\alpha^2}.$$

Учитывая, что в рассматриваемой задаче  $kh^2\alpha \ll 1$ , получаем для корней

$$\lambda_1 = 1 + \sqrt{k\alpha}h + \frac{k\alpha}{2}h^2 + \frac{(k\alpha)^{3/2}}{8}h^3 + O(h^4),$$

$$\lambda_2 = 1 - \sqrt{k\alpha}h + \frac{k\alpha}{2}h^2 - \frac{(k\alpha)^{3/2}}{8}h^3 + O(h^4).$$

Из этих двух корней наиболее «опасным» для роста возмущений является  $\lambda_1$ , который запишем в виде

$$\lambda_1 = 1 + \sqrt{k\alpha}h + O(h^2).$$

Подставляя этот корень в формулу (15), получаем, учитывая, что  $\sqrt{k\alpha} \cdot h \ll 1$ ,

$$\delta\varphi_{i+1} = \lambda^i \delta\varphi_1 = \left(1 + \sqrt{k\alpha}h\right)^i \delta\varphi_1 = e^{\sqrt{k\alpha} \cdot h \cdot i} \cdot \delta\varphi_1 = e^{\sqrt{k\alpha} \cdot x_i} \cdot \delta\varphi_1.$$

То есть для нормы имеем

$$\|\delta\varphi_i\|_c = e^{\sqrt{k\alpha} \cdot x_i} \cdot \frac{1}{6} \left| \frac{d^3\varphi}{dx^3} \right|_{x=0} h^3. \quad (19)$$

В этой области значений «замороженного» параметра схема слабо устойчива [3], т.е. для любого конечного  $x_i$  необходимо подобрать шаг  $h$  так, чтобы правая часть (19) была малой.

Таким образом, для любых конечных  $x_i$  имеем:

$$\|\delta\varphi_i\|_c = O(h^3) \text{ при } 0 < \alpha < 1.$$

Следовательно, как видно из (17), (18), (19) при любых значения «замороженного» параметра  $-1 \leq \alpha \leq 1$  и для любых конечных  $x_i$  разностная схема устойчива по отношению к возмущению граничных условий (14), вызванному их конечно-разностной аппроксимацией. Эта устойчивость характеризуется нормой

$$\|\delta\varphi_i\|_c = O(h^3) \text{ при } -1 \leq \alpha \leq 1.$$

На этом основании можно предположить, что и исходная – нелинейная конечно-разностная схема будет устойчива для любых конечных  $x_i$  по отношению к этому возмущению граничных условий.

#### 4. Устойчивость конечно-разностной схемы по отношению к возмущению, вызванному погрешностью аппроксимации дифференциального оператора

Для исследования устойчивости конечно-разностной схемы по отношению к возмущениям, вызванным погрешностью (невязкой) аппроксимации дифференциального оператора, рассмотрим, как обычно [4], задачу (14) с однородными (нулевыми) граничными условиями

$$\begin{aligned} \delta\varphi_{i+1} - 2\left(1 + \frac{kh^2}{2}\alpha\right)\delta\varphi_i + \delta\varphi_{i-1} &= -h^2\psi_i, \quad -1 \leq \alpha \leq 1 \\ \delta\varphi_0 &= 0, \\ \delta\varphi_1 &= 0. \end{aligned} \tag{20}$$

Для упрощения и сокращения количества выкладок временно предположим (окончательный результат не зависит от этого предположения), что существует аналитическое продолжение сеточных функций  $\delta\varphi_i$  и  $\psi_i$ , определенных в дискретных узлах сетки  $x_i = i \cdot h$ , ( $i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ), на непрерывную ось  $Ox$ . При этом будем требовать от аналитического продолжения  $\delta\varphi(x)$  непрерывность и дифференцируемость до второй производной включительно, а для аналитического продолжения  $\psi(x)$  лишь непрерывность самой функции. Тогда при  $h \rightarrow 0$  конечно-разностная задача (20) превращается в дифференциальную:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\delta\varphi}{dx^2} - k\alpha \cdot \delta\varphi &= -\psi(x), \quad \delta\varphi = \delta\varphi(x), \\ \delta\varphi(x=0) &= 0, \\ \frac{d\delta\varphi}{dx} \Big|_{x=0} &= 0. \end{aligned} \tag{21}$$

Решение этой задачи может быть представлено в виде (при этом учтено, что решение однородной задачи (21)  $\delta\varphi^0(x) = 0$ ):

$$\delta\varphi(x) = \int_0^{x+0} G(x-x')\psi(x')dx', \tag{22}$$

где  $G(x-x')$  – функция Грина дифференциального оператора в левой части (21), удовлетворяющая уравнению

$$\frac{d^2G(x-x')}{dx^2} - k\alpha G(x-x') = -\delta(x-x').$$

В зависимости от величины замороженного параметра  $\alpha$  функция  $G(x-x')$  имеет вид:

1)  $0 < \alpha \leq 1$

$$G(x-x') = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{k\alpha}} \cdot e^{-\sqrt{k\alpha}(x-x')}, & x' < x, \\ 0, & x' > x. \end{cases}$$

2)  $\alpha = 0$

$$G(x-x') = \begin{cases} -(x-x'), & x' < x, \\ 0, & x' > x. \end{cases}$$

3)  $-1 \leq \alpha < 0$

$$G(x-x') = \begin{cases} \frac{1}{i_0 \cdot \sqrt{k|\alpha|}} \cdot e^{-i_0 \cdot \sqrt{k|\alpha|}(x-x')}, & x' < x, \\ 0, & x' > x, \end{cases}$$

где  $i_0 = \sqrt{-1}$  – мнимая единица.

Записывая теперь формулу (22) в дискретных узлах сетки, получаем следующее представление для погрешности  $\delta\varphi_i$ :

$$\delta\varphi_i = \sum_{j=1}^i G_{ij} \psi_j h,$$

где  $G_{ij} = G(x_i - x_j)$  – матричная функция Грина.

В зависимости от величины «замороженного» параметра  $\alpha$  это представление принимает вид:

1)  $0 < \alpha \leq 1$

$$\delta\varphi_i = \sum_{j=0}^i \frac{1}{\sqrt{k\alpha}} e^{-\sqrt{k\alpha}(x_i - x_j)} \psi_j h; \quad (23)$$

2)  $\alpha = 0$

$$\delta\varphi_i = -\sum_{j=0}^i (x_i - x_j) \psi_j h; \quad (24)$$

3)  $-1 \leq \alpha < 0$

$$\delta\varphi_i = \sum_{j=0}^i \frac{1}{i_0 \cdot \sqrt{k|\alpha|}} e^{-i_0 \cdot \sqrt{k|\alpha|}(x_i - x_j)} \psi_j h. \quad (25)$$

Из равенств (23), (24), (25) после выполнения суммирования следуют оценки по норме:

1)  $0 < \alpha \leq 1$

$$\|\delta\varphi_i\|_c \leq \frac{1}{k\alpha} \|\psi_i\|_c \quad (26)$$

или, учитывая (7), имеем

$$\|\delta\varphi_i\|_c = O(h^2); \quad (27)$$

2)  $\alpha = 0$

$$\|\delta\varphi_i\|_c \leq \frac{x_i^2}{2} \cdot \|\psi_i\|_c \quad (28)$$

или, учитывая (7), при любых конечных значениях  $x_i$  имеем

$$\|\delta\varphi_i\|_c = O(h^2); \quad (29)$$

3)  $-1 \leq \alpha < 0$

$$\|\delta\varphi_i\|_c \leq \frac{2}{k|\alpha|} \|\psi_i\|_c \quad (30)$$

или, учитывая (7), имеем

$$\|\delta\varphi_i\|_c = O(h^2). \quad (31)$$

Таким образом, как видно из (27), (29), (31) следует, что при любых значениях «замороженного» параметра  $-1 \leq \alpha \leq 1$  конечно-разностная схема устойчива (для любых конечных  $x_i$ ) по отношению к возмущению, связанному с невязкой аппроксимации дифференциального оператора. В рассматриваемом здесь методе замороженного параметра эта устойчивость характеризуется нормой:

$$\|\delta\varphi_i\|_c = O(h^2).$$

## 5. Сходимость

Сходимость при  $h \rightarrow 0$  разностного решения к точному (для любых конечных  $x_i$ ) следует из того, что [3, 4]: 1) погрешность аппроксимации дифференциального оператора имеет порядок  $O(h^2)$ , погрешность аппроксимации граничных условий –  $O(h^3)$ ; 2) конечно-разностная схема устойчива для любых конечных  $x_i$  по отношению к невязке аппроксимации дифференциального оператора и к невязке граничных условий. Таким образом, как видно из предыдущего, разностное решение в методе замороженного параметра сходится к точному решению со вторым порядком точности для любых конечных  $x_i$ .

## 6. Оценка погрешности

Априорная мажорантная оценка погрешности (в методе замороженного параметра) следует из формул (26), (28), (30). Она имеет вид при любом конечном  $x_i$ :

$$\|\delta\varphi_i\|_c \leq M \cdot h^2,$$

$$\text{где } M = \max \left( \frac{2}{k|\alpha|} \max_i \left| \frac{1}{12} \frac{d^4\varphi}{dx^4} \right|_{x_i}, L^2 \max_i \left| \frac{1}{12} \frac{d^4\varphi}{dx^4} \right|_{x_i} \right).$$

## 7. Проверка схемы на тесте

Все приведенные выше соображения об устойчивости и сходимости конечно-разностной схемы (1) были основаны на анализе линеаризованной методом замороженного параметра исходной нелинейной задачи (2). Поэтому дополнительно разностная схема была протестирована на нелинейной задаче (2), в которой свободный член  $f(x) = 0$ , и для которой известно точное аналитическое решение:

$$\begin{cases} \frac{d^2\varphi}{dx^2} = k \sin \varphi, & -\infty \leq x \leq \infty, \\ \varphi(x=0) = \pi, \\ \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=0} = 2\sqrt{k}. \end{cases}$$

Точное аналитическое решение этой задачи имеет вид уединенного солитона [2]:

$$\varphi(x) = 4 \operatorname{arctg} \left( e^{\sqrt{k}x} \right).$$

Тесты показали, что схема устойчива и сходится к точному решению при  $\sqrt{k}h \leq 10^{-3}$  вплоть до значений  $x \sim 10^2 / \sqrt{k}$ , что вполне достаточно для целей нашего исследования, поскольку наибольший пространственный масштаб, на котором «локализованы» все вычисления в рассматриваемых здесь задачах – это характерный размер (вдоль оси  $Ox$ ) вихретокового солитона  $\sim 1/\sqrt{k}$ .

Отметим, что метод замороженного параметра приводит к завышенным требованиям по устойчивости конечно-разностной схемы в данной задаче.

## 8. Мажорантная оценка дисперсии решения

Поскольку исходное уравнение математической модели является стохастическим, то помимо вычислительных погрешностей, связанных с численным решением усредненного уравнения, необходимо провести оценку среднеквадратичного отклонения решения стохастического уравнения в каждой из реализаций ансамбля  $\{\Gamma_N\}$  от решения усредненного по этим реализациям уравнения – дисперсию решения.

Ниже приведена оценка дисперсии решения:

$$\varepsilon_\varphi = \left\langle (\varphi - \langle \varphi \rangle)^2 \right\rangle^{1/2}.$$

Учитывая [1], имеем:

$$\varphi = \varphi_0 + \varphi_1 + \varphi_2, \quad \langle \varphi \rangle = \varphi_0 + \langle \varphi_1 \rangle + \langle \varphi_2 \rangle, \quad \langle \varphi_1 \rangle = 0.$$

С точностью до членов второго порядка по  $\|\mathbf{v}\|$ :

$$\langle (\varphi - \langle \varphi \rangle)^2 \rangle = \langle \varphi_1^2 \rangle,$$

$$\varepsilon_\varphi = \langle \varphi_1^2 \rangle^{1/2}.$$

Таким образом, будем иметь [1]:

$$\varepsilon_\varphi = (\sqrt{k}w)^{1/2} |\operatorname{th}(\sqrt{k}x)| \leq (\sqrt{k}w)^{1/2} = \|v\| \leq 10^{-2},$$

при этом  $\langle \varphi \rangle \sim 1$ .

#### Литература

1. Кирпиченкова Н. В., Кирпиченкова В. Я., Крыжановский К. В. Конечно-разностная схема для стохастически возмущенного стационарного уравнения *sin-Gordon* вблизи перенормированного квантовыми закоротками односолитонного решения // Физико-математическое моделирование систем: материалы XX Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», 2019. Ч. 1. С. 50 -58.
2. Бароне А., Патерно Дж. Эффект Джозефсона. Физика и применение. - М.: 1984. 639с.
3. Калиткин, Н. Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
4. Тихонов, А. Н. Уравнения математической физики / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – М.: Наука, 1972. – 735 с.

### INVESTIGATION OF AN AVERAGED FINITE-DIFFERENCE SCHEME FOR STOCHASTICALLY PERTURBED STATIONARY EQUATION OF SIN-GORDON

N. V. Kirpichenkova, V. Ya. Kirpichenkova, K. V. Kryzhanovskiy

Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Novochoerkassk

For the developed statistically averaged finite-difference scheme for finding the numerical solution of the stochastically perturbed *sin-Gordon* equation near the one-soliton solution, it is theoretically proved that the scheme developed is stable and converge to the "exact" averaged solution on the characteristic spatial and temporal scales of the solved problems.

Keywords: math modeling, finite-difference scheme, eddy current processes, stochastically perturbed equation *sin-Gordon*, disordered contact, quantum shorting, single-soliton solution.

ELECTROMAGNETIC FORM FACTOR OF LIGHT MESONS  
WITH NEXT-TO-LEADING ORDER ACCURACY OF RUNNING COUPLING  
CONSTANT METHOD AND THE NEW RENORMALIZATION SCALE

Y. V. Mamedova

Institute of Applied Mathematics, Baku State University, Azerbaijan  
[mamedova\\_yegana@yahoo.com](mailto:mamedova_yegana@yahoo.com)

The power-suppressed corrections to the light pseudoscalar (pion, kaon) and vector ( $\rho_L$ - meson) mesons' electromagnetic form factors  $F_M(Q^2)$  are considered using the running coupling constant method at the next-to-leading order accuracy [1-3]. In calculations the new renormalization scale  $\mu_R^2 = (1-x)Q^2/2$  (or  $xQ^2/2$ ) is used [1-4]. The mesons' distribution amplitudes (DAs) obtained in the framework of the QCD sum rules method are used [5-9].

Keywords: quantum chromodynamics, mesons' electromagnetic form factor, running coupling constant method, distribution amplitude.

The hadrons' electromagnetic (elm) form factors (ff)  $F_M(Q^2)$  is one of the interesting branches of the perturbativ QCD (pQCD) [10]. In [11-13] the pion, kaon and  $\rho_L$ - meson elm ffs using the running coupling constant method and the DA obtained in the context of QCD sum rules are calculated. In these works the dependence of the mesons' DAs on the factorization scale  $Q^2$  is taken into account [15-16]. In [14] we did the same for  $\rho_L$ - meson using the running coupling constant method with next-to-leading order accuracy and Ball-Braun [17] function. In this work we consider the same problems by taking into account the second term in the expansion of the running coupling constant  $\alpha_s(\lambda Q^2)$  in terms of  $\alpha_s(Q^2)$ . It is well known that in the framework of pQCD a meson elm ff can be written as [18-20]

$$F_M(Q^2) = \int_0^1 \int_0^1 dx dy \Phi_M^*(y, Q^2) T_H(x, y, Q^2, \alpha_s(\mu_R^2)) \Phi_M(x, Q^2), \quad (1)$$

where  $\Phi_M(x, \mu_F^2)$  is the meson distribution amplitude (DA),  $T_H(x, y, Q^2, \alpha_s(\mu_R^2))$  is the hard-scattering amplitude of the subprocess  $q\bar{q}' + \gamma^* \rightarrow q\bar{q}'$ , calculable in the framework of pQCD,  $Q^2 = -q^2$  is the momentum transfer in the process. For the factorization scale  $\mu_F^2$ , a natural choice is  $\mu_F^2 = Q^2$  [4]. The renormalization scale  $\mu_R^2$  is chosen equal to the gluon virtuality  $\mu_R^2 = xyQ^2$ ,  $\mu_R^2 = (1-x)(1-y)Q^2$ . We choose it as

$$\mu_R^2 = \frac{1}{2}xQ^2, \mu_R^2 = \frac{1}{2}(1-x)Q^2. \quad (2)$$

At the leading order of pQCD with this renormalization scales for  $T_H$  will be in the following form [18-20]

$$T_H(x, y, Q^2, \alpha_s(\mu_R^2)) = \frac{16\pi C_F}{Q^2} \left[ \frac{2}{3} \frac{\alpha_s[(1-x)Q^2/2]}{(1-x)(1-y)} + \frac{1}{3} \frac{\alpha_s[xQ^2/2]}{xy} \right], \quad (3)$$

where  $C_F = 4/3$  is the color factor [9].  $\alpha_s(\mu_R^2)$  with  $\mu_R^2$  from Eq. (2) suffers because of infrared singularities at the soft regions  $x \rightarrow 0, x \rightarrow 1$ . For regularization of  $\alpha_s(\mu_R^2)$  in these end-point regions, let us express the running coupling constant  $\alpha_s(\lambda Q^2)$  in terms of  $\alpha_s(Q^2)$  using the renormalization group equation [21]. The renormalization group equation for the running coupling  $\alpha_s(\lambda Q^2)$  has the form

$$\frac{\partial \alpha_s(\lambda Q^2)}{\partial \ln \lambda} = -\frac{\beta_0}{4\pi} [\alpha_s(\lambda Q^2)]^2 - \frac{\beta_1}{16\pi^2} [\alpha_s(\lambda Q^2)]^3, \quad (4)$$

where

$$\beta_0 = 11 - \frac{2}{3}n_f, \quad \beta_1 = 102 - \frac{38}{3}n_f \quad (5)$$

are the QCD beta-functions one-loop and two-loop coefficients, respectively [21]. The solution of this equation obtained by keeping the leading  $(\alpha_s \ln \lambda)^k$  and next-to-leading  $\alpha_s^k \ln \lambda^{k-1}$  powers is [21]

$$\alpha_s(\lambda Q^2) = \frac{\alpha_s(Q^2)}{1 + (\alpha_s \beta_0 / 4\pi) \ln \lambda} - \frac{\alpha_s^2(Q^2) \beta_1 \ln[1 + (\alpha_s \beta_0 / 4\pi) \ln \lambda]}{4\pi \beta_0 [1 + (\alpha_s \beta_0 / 4\pi) \ln \lambda]^2}. \quad (6)$$

Now let us take the renormalization scale  $\mu_R^2$  as in Eq.(2) and use the formula (6) for calculation of the pion, kaon and  $\rho_L$ -meson elm ffs. The QCD sum rules DA for the meson M has the form [22, 23]

$$\Phi_M(x, \mu_F^2) = \Phi_M^{asy}(x) \left[ \alpha + \gamma(2x-1) + \beta(2x-1)^2 + \delta(2x-1)^3 \right], \quad (7)$$

where  $\Phi_M^{asy}(x)$  is the meson M asymptotic DA

$$\Phi_{\pi(K)}^{asy}(x, Q^2) = \sqrt{3} f_{\pi(K)} x(1-x), \quad \Phi_{\rho}^{asy}(x, Q^2) = \sqrt{2} \cdot \sqrt{3} f_{\rho}^L x(1-x). \quad (8)$$

In Eq. (7)  $\alpha, \gamma, \beta, \delta$  are function of the factorization scale  $Q^2$  and are given by the formulae [22]

$$\begin{aligned} \alpha(\mu_F^2) &= a + \frac{b}{5} [1 - A_2(Q^2)], & \beta(\mu_F^2) &= b A_2(Q^2), \\ \gamma(\mu_F^2) &= \frac{3c}{7} [A_1(Q^2) - A_3(Q^2)], & \delta(\mu_F^2) &= c A_2(Q^2), \end{aligned} \quad (9)$$

with  $A_n(Q^2)$  defined as

$$A_n(Q^2) = \left[ \alpha_s(Q^2) / \alpha_s(\mu_0^2) \right]^{\frac{\gamma_n}{\beta_0}}. \quad (10)$$

In Eq. (8)  $f_M$  is the meson decay constant:  $f_\pi = 0.093$  GeV,  $f_K = 0.112$  GeV,  $f_\rho^L = 0.141$  GeV. The values of constants  $a, b, c$  have been found in the framework of QCD sum rules method at the normalization points  $\mu_0 = 0.5$  GeV (pion, kaon),  $\mu_0 = 1$  GeV ( $\rho_L$ -meson). We have:

– for the pion

$$a = 0, b = 5, \text{ Chernyak-Zhitnitsky DA [23];} \quad (11)$$

– for the kaon

$$a = 0.4, b = 3, c = 1.25, \text{ Farrar-Huleihel-Zhang DA [24];} \quad (12)$$

– for the  $\rho_L$ -meson

$$a = 0.7, b = 1.5, \text{ Ball-Braun DA [17].} \quad (13)$$

After substitution of (3), (6) and (7) into Eq. (1) the form factor takes the form

$$\begin{aligned} Q^2 F_M(Q^2) = & [Q^2 F_M(Q^2)]_1 - C_1 \left( \frac{16\pi f_M}{\beta_0} \right)^2 \frac{\beta_1}{\beta_0} \times \\ & \times \left\{ \frac{2}{3} \int_0^1 \int_0^1 \frac{y \tilde{\Phi}_M(y, Q^2) x \tilde{\Phi}_M(x, Q^2) \{\ln[t + \ln(1-x)] - \ln t\} dx dy}{[t + \ln(1-x)]^2} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{3} \int_0^1 \int_0^1 \frac{(1-y) \tilde{\Phi}_M(y, Q^2) (1-x) \tilde{\Phi}_M(x, Q^2) \{\ln[t + \ln x] - \ln t\} dx dy}{[t + \ln(x)]^2} \right\}, \quad (14) \end{aligned}$$

here  $\tilde{\Phi}_M(x, Q^2)$  is the meson DA without  $\Phi_M^{asy}(x)$ ;  $C_1 = 1$  for the pion and kaon and  $C_1 = 2$  for the  $\rho_L$ -meson;  $t = 4\pi / \alpha_S(Q^2/2) \beta_0$ .  $[Q^2 F_M(Q^2)]_1$  is the meson's elm ff found in [11-13, 22] using only the first term in (6).

In analytical calculations we apply the inverse Laplas transforms

$$\frac{1}{(t+z)^\nu} = \frac{1}{\Gamma(\nu)} \int_0^\infty \exp[-u(t+z)] u^{\nu-1} du, \quad \text{Re } \nu > 0 \quad (15)$$

and

$$\frac{\ln(t+z)}{(t+z)^2} = \int_0^\infty \exp[-u(t+z)] (1-C-\ln u) u du. \quad (16)$$

In Eq. (16)  $C \approx 0.577216$  is the Euler-Mascheroni constant. After some calculations we get

$$\begin{aligned} Q^2 F_M(Q^2) = & C_1 \frac{(16\pi f_M)^2}{\beta_0} \int_0^\infty \exp(-tu) B[Q^2 F_M](u) du - \\ & - C_1 \frac{(16\pi f_M)^2}{\beta_0} \frac{\beta_1}{\beta_0} \int_0^\infty \exp(-tu) u (1-C-\ln t - \ln u) B[Q^2 F_M](u) du, \quad (17) \end{aligned}$$

where the Borel transform  $B[Q^2 F_M](u)$  is

$$B[Q^2 F_M](u) = \sum_{n=1}^N l_n(Q^2) \frac{1}{n-u}. \quad (18)$$

The functions  $l_n(Q^2)$  are found in [22]. The Borel transform  $B[Q^2 F_M](u)$  has the infrared-renormalon poles at  $n = 1, 2, \dots, N$  [25]. Applying the principal value prescription which removes renormalon divergencies we obtain

$$\begin{aligned} [Q^2 F_M(Q^2)]^{res} &= [Q^2 F_M(Q^2)]^{res} - \\ &- C_1 \frac{(16\pi f_M)^2}{\beta_0} \frac{\beta_1}{\beta_0} \sum_{n=1}^N l_n(Q^2) [(1-C-\ln t)f_n(t) - g_n(t)], \end{aligned} \quad (19)$$

where we introduce the following notations:

$$f_n(t) = P.V. \int_0^\infty \frac{\exp(-tu)u du}{n-u},$$

$$g_n(t) = P.V. \int_0^\infty \frac{\exp(-tu)u \ln u du}{n-u}.$$

In the expressions (18), (19) the sum runs up to  $N = 4$  in the case of the pion,  $\rho_L$ -meson and up to  $N = 5$  for kaon. The results of our numerical calculations are depicted in Figs. 1-3. In figures the results, obtained using the asymptotic and QCD sum rules DA are shown. As is seen, the contribution of the second term in Eq. (19) is very important in the region of small values of  $Q^2$ . Indeed, in the region  $Q_c^2 \leq 5 \text{ GeV}^2$  (asymptotic DAs) or  $Q_c^2 \leq 7 \div 10 \text{ GeV}^2$  (QCD sum rules DAs) this correction is negative and large at its absolute value. It decreases the maximums of the curves and shifts them towards larger values of  $Q^2$ . As a results the curves become smoother than ones obtained using only the first term from (6). In the region  $Q^2 > Q_c^2$  the correction is positive and small for all of particles. The obtained results allow us to conclude that the power-suppressed corrections to  $F_M(Q^2)$  are

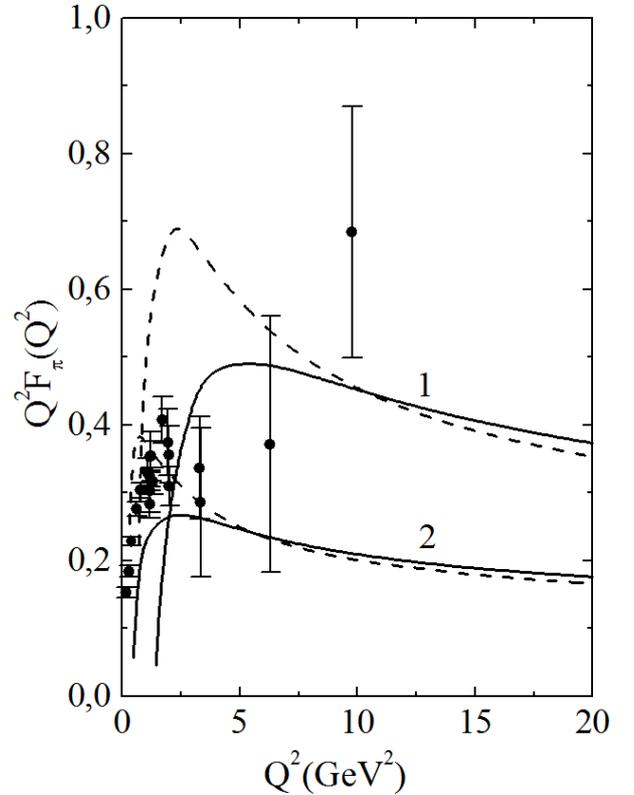


Fig. 1. The pion elm ff. The curves 1 (solid and dashed) are obtained using the Chernyak-Jitnitsky DA, the curves 2 – asymptotic DA. The dashed curves are computed by means of the first term  $[Q^2 F(Q^2)]^{res}$  in Eq. 19, the solid curves correspond to the full expression

large and they change the shape of the ordinary pQCD curves (frozen coupling approximation), these corrections can be properly taken into account using the running coupling constant method.

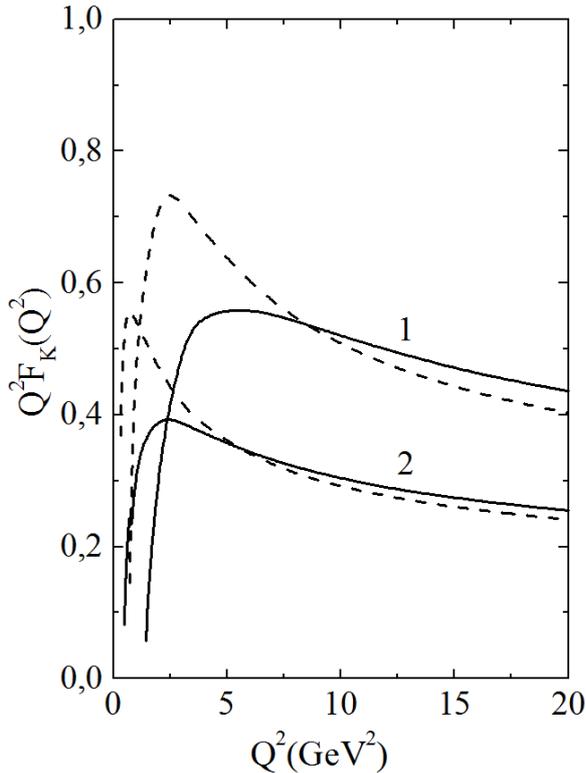


Fig. 2. The same as in Fig. 1, but for the kaon. The curves 1 are obtained using DA from Eq. 12

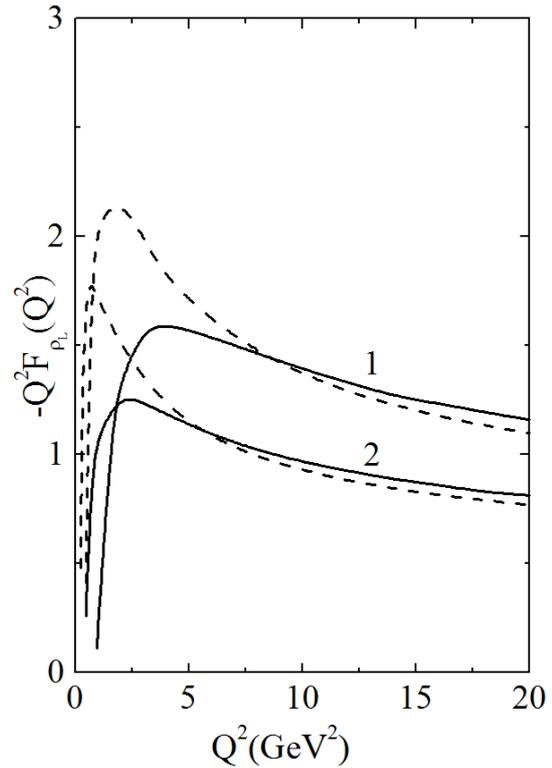


Fig. 3. The same as in Fig. 1, but for the  $\rho_L$ -meson. The curves 1 are found obtained using Ball-Braun DA (Eq. (14))

#### References

1. Agaev S. Mod. Phys. Lett. A, 1996, v. 11, No 12, p. 957-963.
2. Agaev S. Mod. Phys. Lett. A, 1998, v. 13, No 33, p.2637-2643.
3. Agaev S. Proc. Of the Conference on QCD 98, Nucl. Phys. B. 1999, v. 74, p. 155-158.
4. Brodsky S., Ji C.-R., Pang A. and Robertson D. Phys. Rev. D, 1998, v. 57, No 1, p. 245-252.
5. Горский А. С. ЯФ, 1987, т. 46, вып. 3 (9), с. 938-942.
6. Житницкий А.Р., Житницкий И. Р., Черняк В. Л. ЯФ, 1983, т. 38, вып. 4(10), с. 1074-1086.
7. Baier V., Grozin A. Nucl. Phys. B, 1981, v. 192, No 2, p. 476-488.
8. Braun V., Filyanov I. Z. Phys. C, 1989, v. 44, No 1, p. 157-166.
9. Radyushkin A. Jefferson Lab. Preprint, JLAB-THY-97-29, hep-ph/9707335, 1997, No 7, 10.
10. Serman G., Stoler P. Ann. Rev. Nucl. and Part. Sci., 1997, v. 47, p. 193-220.
11. Mamedova Y. V., Mammadova L. N. Extended Abstracts of 4<sup>th</sup> International Conference on Control and Optimization with Industrial Applications COIA2013, 10-12 July, Borovets, Bulgaria, 2013, pp.48-49.
12. Mammadova Y. V. Abstracts of V Congress of the Turkic World Mathematicians TWMS, 5-7 June, Bulan-Sogottu, Kyrgyzstan, 2014, p. 249.

13. Mamedova Y. V. Materials of the 5<sup>th</sup> International Conference on Control and Optimization with Industrial Applications COIA2015, 2015, 27-29 August, Baku, Azerbaijan.
14. Mamedova Y. V. Abstracts of VI Congress of the Turkic World Mathematicians TWMS, 2-5 October, Astana, Kazakhstan, 2017, p. 328.
15. Lepage G., Brodsky S. Phys Lett. B, 1979, v. 87, No 4, p. 359- 365.
16. Muller D. Phys. Rev. D, 1995, v. 51, No 7, p. 3855-3864.
17. Ball P., Braun V. M. Phys. Rev. D54, 1996, 2182.
18. Lepage G. P., Brodsky S. J. Phys. Rev. D22, 1980, 2157.
19. Efremov A. V., Radyushkin A. V., Phys. Lett. B 94, 1980, 245-250.
20. Dunkan A., Mueller A. H. Phys. Rev. D21, 1980, 1636.
21. Contopanagos H., Sterman G. Nucl. Phys. B419, 1994, 77.
22. Agaev S. S., Mukhtarov A. I., Mamedova Y. V. Fizika, V. 5, No 3, 1999, p. 3.
23. Chernyak V. L., Zhitnitsky A. R. Phys. Rep. 112, 1984, p. 173.
24. Farrar G., Huleihel K., Zhang H. Nucl. Phys. B, 1991, v. 349, No 3, p. 655-674.
25. Beneke M. Phys. Rep., 1999, v. 317, No 1, p. 1-168, CERN-TH/98-233, hep-ph/9807443.

## ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ ФОРМ ФАКТОР ЛЕГКИХ МЕЗОНОВ В СЛЕДУЮЩЕМ ПОРЯДКЕ МЕТОДА БЕГУЩЕЙ КОНСТАНТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И С НОВЫМ РЕНОРМАЛИЗАЦИОННЫМ МАСШТАБОМ

Е. В. Мамедова

Институт Прикладной математики, Бакинский Государственный Университет, Азербайджан

Вычислены степенно-подавленные поправки к электромагнитным форм факторам  $F_M(Q^2)$  легких псевдоскалярных (пион, каон) и векторного ( $\rho_L$ ) мезонов в следующем порядке метода бегущей константы взаимодействия и новым ренормализационным масштабом  $\mu_R^2 = (1-x)Q^2/2$  (или  $xQ^2/2$ ). Используются функции распределения мезонов, полученные в рамках правил сумм квантовой хромодинамики.

Ключевые слова: квантовая хромодинамика, электромагнитный формфактор мезонов, метод бегущей константы взаимодействия, функция распределения.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ИОННОГО ПУЧКА В ЛАЗЕРНОМ МАСС-СПЕКТРОМЕТРЕ ЭМАЛ-2

П. О. Медакин<sup>1</sup>, А. Г. Шеин<sup>1</sup>, А. М. Потапов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Волгоградский государственный технический университет

<sup>2</sup>Институт химии высокочистых веществ РАН

[pawel.med@yandex.ru](mailto:pawel.med@yandex.ru)

Рассмотрена динамика ионного пучка в лазерном масс-спектрометре ЭМАЛ-2. Реализована численная модель, построенная на методе «крупных частиц», учитывающая влияние полей пространственного заряда и взаимодействие заряженных частиц с полем электродинамической системы. Проведена серия численных экспериментов и их сравнение с данными полученными экспериментально.

Ключевые слова: метод «крупных частиц», лазерный масс-спектрометр, метод «частица – частица».

Несмотря на широкие возможности современных масс - спектрометров, проблема повышения разрешающей способности и уменьшения габаритов приборов остается актуальной. Одним из направлений решения данной проблемы является разработка и модернизация статических масс спектрометров [1-2].

В настоящей работе рассматривается движение ионного пучка в статическом лазерном масс-спектрометре с двойной фокусировкой ЭМАЛ-2, который работает по схеме Маттауха – Герцога (рис. 1).

Принцип его работы состоит в следующем: луч YAG-лазера (1) фокусируется на объект с помощью оптической системы (2). Образующаяся лазерная плазма разлетается в объеме эквипотенциального экспандера и попадает на

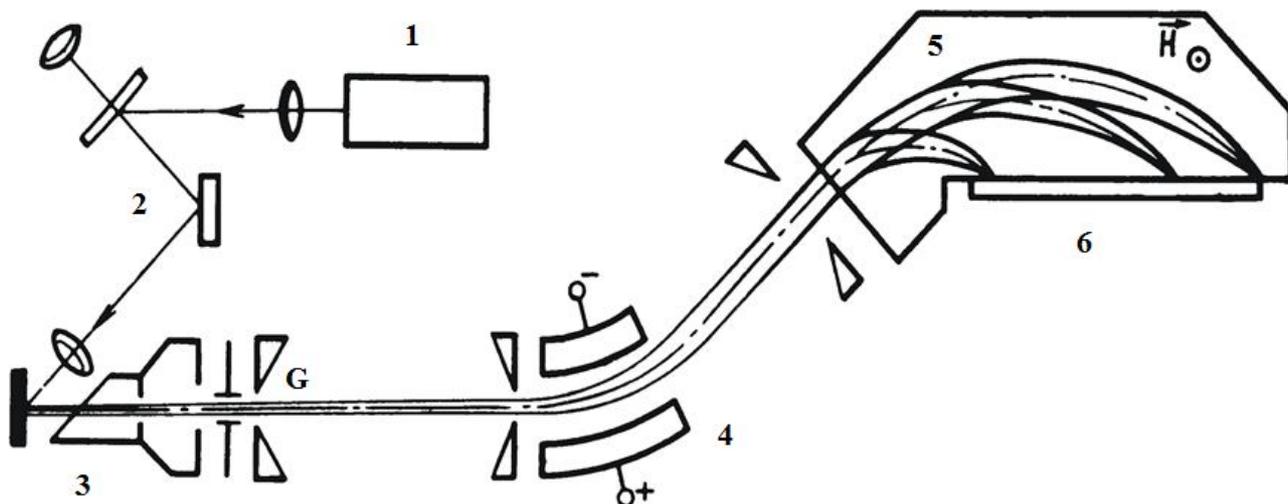


Рис. 1. Схема лазерного масс-спектрометра с двойной фокусировкой ЭМАЛ-2: 1 – лазер, 2 – оптическая система, 3 – источник ионов с фокусирующей системой, 4 – электростатический анализатор, 5 – магнитный анализатор, 6 – фотопластинка

формирующую систему (3). Ионы фокусируются на объектную щель (G) и ускоряются электрическим полем до энергии 18500 эВ. Далее ионный пучок попадает в электростатический анализатор (4) состоящий из двух пластин с разностью потенциалов 1250 В. Ионы отклоняются в нем на угол  $\varphi = 31^\circ 50'$  при среднем радиусе траектории 200 мм. Для уменьшения краевых эффектов на торцах электростатического анализатора находятся заземленные экраны. Далее пучок ионов попадает в магнитный анализатор (5) с величиной магнитного поля 0.9 Тл и фокусируется на фотопластинке (6), которая располагается в фокальной плоскости анализатора под углом  $45^\circ$  к направлению ввода ионного пучка в магнитный анализатор [3].

Будем считать, что в образованной лазерной плазме отсутствуют электроны, заряд ионного пучка, образованного одним лазерным импульсом, составляет 1 пКл, а угол разлета ионов, ограниченный эквипотенциальным экспандером составляет  $1^\circ$ .

Математическая модель построена на методе крупных частиц. Уравнение движения имеет следующий вид:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}_1 + \vec{F}_2, \quad (1)$$

где  $\vec{F}_1$  – силы кулоновского взаимодействия между частицами,  $\vec{F}_2$  – силы взаимодействия ионного пучка с статическими электрическим и магнитным полем масс анализаторов и фокусирующей системы.

Поскольку расчет движения огромного количества ионов, образованных лазерным излучением, является очень сложной задачей, необходимо уменьшить количество взаимодействующих между собой частиц, без потери точности. Для этого используется метод крупных частиц.

$$k = \frac{Q_{\text{общ}}}{N_1 + N_2 + N_3}, \quad M = k \cdot m, \quad Q = k \cdot q \cdot n,$$

где  $k$  – коэффициент укрупнения,  $Q_{\text{общ}}$  – общий заряд ионов,  $N_1$  – количество однозарядных ионов,  $N_2$  – количество двухзарядных ионов,  $N_3$  – количество трехзарядных ионов,  $Q$  – заряд крупной частицы,  $n$  – кратность ионизации крупной частицы,  $q$  – заряд электрона,  $M$  – масса крупной частицы,  $m$  – масса иона.

Также для частиц в плазме справедливо распределение Максвелла (за некоторыми частными исключениями).

$$f(v) = 4\pi v^2 \left( \frac{M}{2\pi T} \right)^{3/2} e^{\left[ \frac{-mv^2}{T} \right]}.$$

Для нахождения распределения потенциала в фокусирующей системе и электростатическом анализаторе используем уравнения Лапласа:

$$\Delta\varphi = 0.$$

Для численного решения дифференциального уравнения (1) используется метод Рунге-Кутты четвертого порядка, так как данный метод обладает хорошей сходимостью, приемлемой точностью и невысокой вычислительной сложностью.

Для численного решения уравнения Лапласа используется метод конечных элементов, реализованный в пакете FreeFem ++ (рис. 2-5).

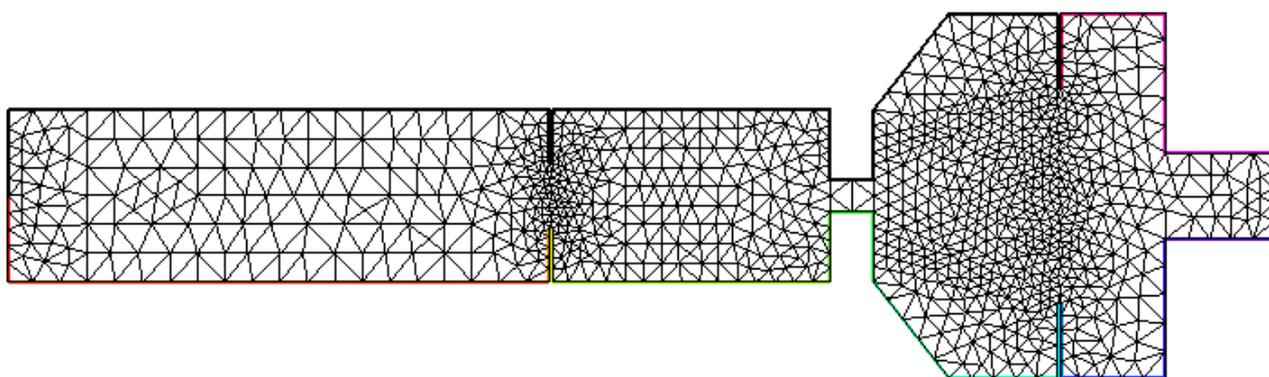


Рис. 2. Пример триангуляции фокусирующей системы

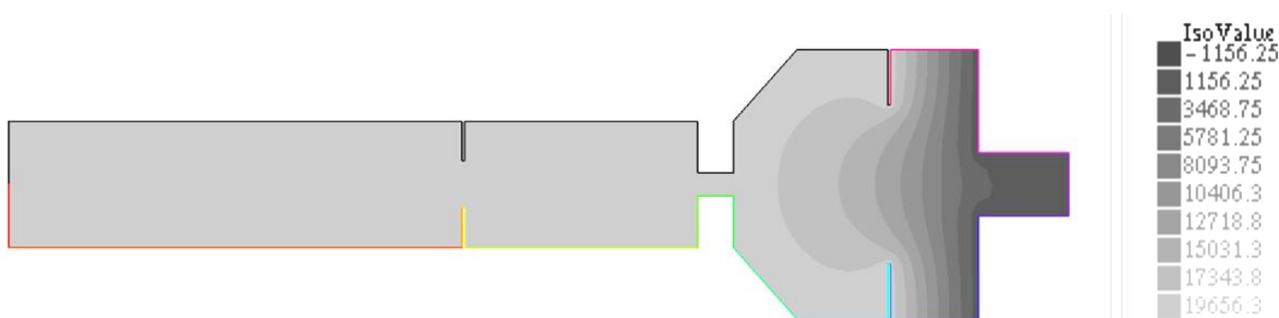


Рис. 3. Распределение потенциала в фокусирующей системе



Рис. 4. Распределение потенциала в электростатическом анализаторе

Для реализации данной численной модели написана программа. Траектории движения ионов цинка и меди, рассчитанные с ее помощью, представлены на рис. 5 и 6. Из рис. 5 видна фокусировка ионного потока и возникающие aberrации.

Сравнение распределения ионов цинка и меди на фотопластине, полученные численно и экспериментально, представлено на рис. 7. Видно, что расстояния между однозарядными и двухзарядными ионными пакетами совпадает.

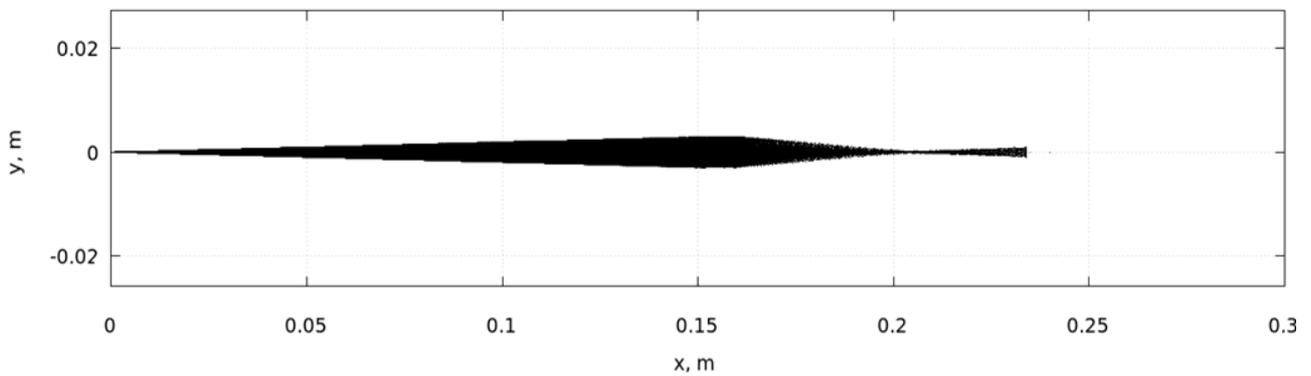


Рис. 5. Траектории движения ионов  $^{63}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{63}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{1+}$  в фокусирующей системе

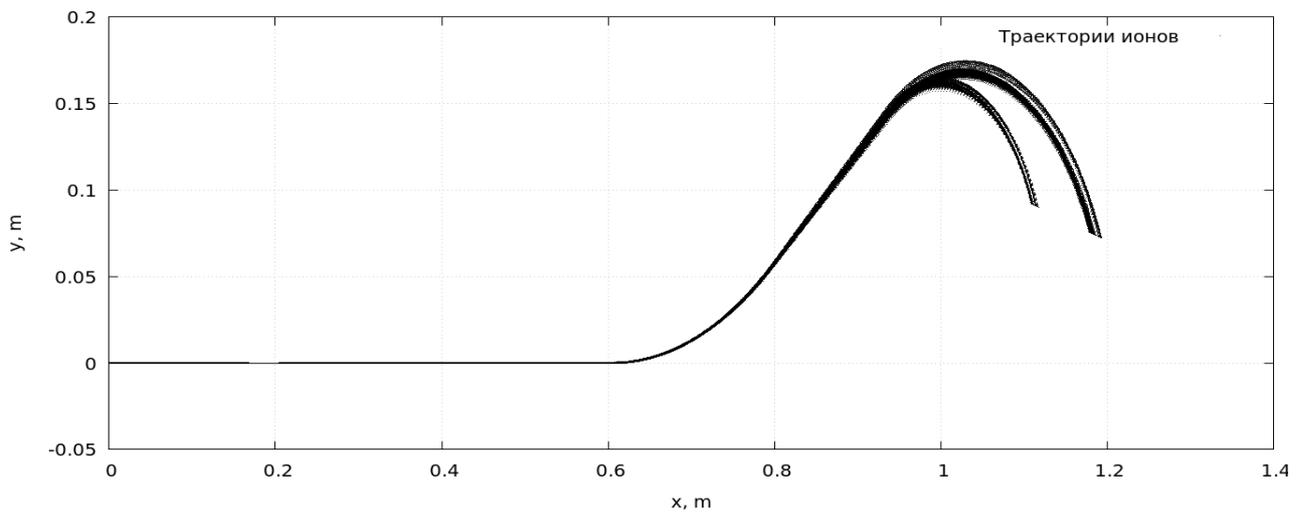


Рис. 6. Траектории движения ионов  $^{63}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{63}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{1+}$  от источника ионов до фотопластины

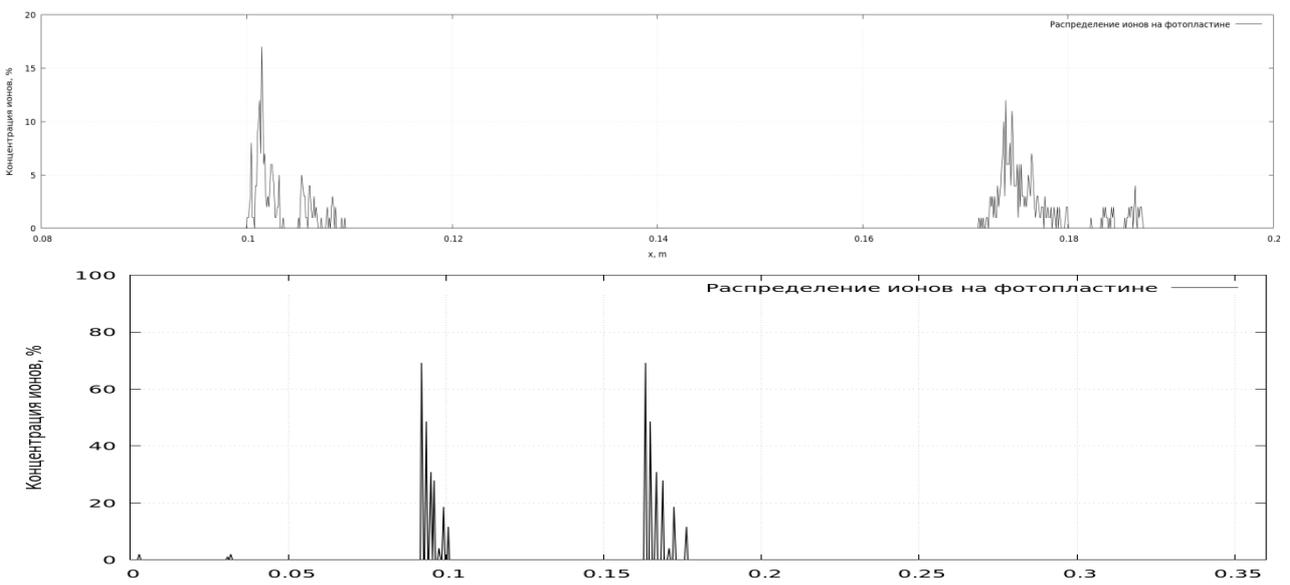


Рис. 7. Распределение ионов  $^{63}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{2+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{2+}$ ,  $^{63}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{64}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{65}\text{Cu}^{1+}$ ,  $^{66}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{67}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{68}\text{Zn}^{1+}$ ,  $^{70}\text{Zn}^{1+}$  на фотопластине: верхнее – численное, нижнее – экспериментальное

## Литература

1. Ионно-оптическая схема для высокочувствительного, портативного масс-спектрографа / В. Т. Коган [и др.] // Журнал технической физики. – 2005. – Т. 75, вып. 6. – С. 121-125.
2. Исследование лазерно-плазменного источника ионов с системой постоянных кольцевых магнитов / С. Н. Мордик [и др.] // Журнал технической физики. – 2017. – Т. 87, вып. 5. – С. 788-790.
3. Быковский, Ю. А. Лазерная масс – спектрометрия / Ю. А. Быковский, В. Н. Неволин. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 128 с.

## NUMERICAL MODELLING OF THE MOVEMENT OF THE ION BEAM IN LASER MASS-SPECTROMETER EMAL-2

P. O. Medakin<sup>1</sup>, A. G. Shein<sup>1</sup>, A. M. Potapov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Volgograd State Technical University

<sup>2</sup>Institute of Chemistry of High-Purity Substances of the RAS

The movement of the ion flow in laser mass-spectrometer EMAL-2 is considered. The numerical model constructed by a method of "large particles", considering influence of fields of a space charge and interaction of the charged particles with the field of electrodynamic system is realized. A series of numerical experiments and their comparison with the data obtained experimentally is conducted.

Keywords: method of "large particles", laser mass spectrometer, the method of "particle – particle".

## МЕТОДИКА РАСЧЁТА ТЕПЛОВЫХ ПОЛЕЙ ТЕРМОБЛОКА В ПРОИЗВОДСТВЕ ПРОМЫШЛЕННЫХ СМАЗОК

О. Г. Новикова

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)  
[novikova\\_o\\_g@mail.ru](mailto:novikova_o_g@mail.ru)

Предложена методика расчёта тепловых полей термоблока в производстве промышленных смазок. Рассчитанное тепловое поле термоблока в общей структуре системы автоматизированного управления позволит в режиме реального времени повысить качество выпускаемых смазок за счет оптимально подобранной длины змеевика. А также даст возможность отслеживать температуру протекания процесса по всей длине трубы, что будет способствовать предотвращению нештатных ситуаций.

Ключевые слова: промышленные смазки, термоблок, тепловое поле.

Смазки – это совокупность органических соединений, способных образовывать структурные конфигурации с малой энергией связи и создавать комплексные соединения с поверхностями трущихся деталей. В классификации смазочных веществ пластичные смазки располагаются между жидкими и твердыми смазками. Пластичные смазки применяются в тех узлах трения, в которых невозможно создать принудительную циркуляцию масла или это затруднительно. При помощи загустителей они надежно удерживаются на поверхности пар трения, а также, в некоторых случаях, обеспечивают дополнительную герметизацию.

Производство масел и смазок – это сложный наукоемкий процесс, для которого характерно изменчивость рецептуры исходного сырья и показателей технических характеристик ведения процесса ( $\tau$ ,  $T$ ,  $P$  и др.), при неизменных технических показателей готового продукта. При разработке системы управления требуется глубокое изучение не только технологического процесса производства, но и решение смежных задач из области теплофизики и кристаллографии, т.к. эти продукты нельзя отнести к простым смесям или химическим соединениям, для которых характерна ярко выраженная энергия связи. Аттестация готовой продукции по физико-химическим показателям не гарантирует ее качества. Дополнительно включают трибологические испытания, результаты которых требуют внесения изменений в регламент. Поэтому разрабатываемая система включает в себя подсистему поддержки принятия решений в виде комплекса средств автоматизации, математического, программного и информационного обеспечений.

Процесс производства масел и смазок многостадийен, поэтому для каждой стадии решается задача локального управления:

- Локальное управление стадией выбора рецептуры;
- Локальное управление стадией обезвоживания мыльной основы;
- Локальное управление стадией термообработки расплава смазки;
- Локальное управление стадией гомогенизации готовой продукции.

Объектом исследования в данной работе является локальное управление стадией термообработки расплава непрерывного процесса получения промышленных смазок. Задача разрабатываемого математического обеспечения – построение математической модели с распределенными параметрами теплового поля. Эта модель позволит рассчитать температуру смеси компонентов в любой точке змеевика в любой момент времени. Анализ теплового поля позволит рассчитать скорость диффузии, при которой обеспечивается равномерная концентрация компонентов, входящих в рецептуру смазки.

Создание математической модели необходимо для решения нескольких задач. При интеграции данной модели в общую структуру системы автоматизированного управления технологическим процессом будет осуществляться мониторинг и процедура поддержки принятия решений для технолога, отвечающего за качество смазки. Использование математической модели данной стадии (стадии термодиффузии) или совокупности математических моделей, эмулирующих весь технологический процесс для исследовательских целей, позволит проводить проектирование комплекса оборудования при строительстве новых цехов и создании новых производств смазочных материалов. Возможно использование системы автоматизированного управления для ретроспективы событий – при возникновении на производстве нештатных ситуаций системой моделируется эта ситуация и проводится всесторонний анализ, позволяющий понять, при каких условиях могла возникнуть такая ситуация [2].

Постановка задачи: используя разработанную математическую модель при заданном наборе входных параметров  $X = \{C_p, d_{зм}, d_{ср}, K, T_2, T_1^{(0)}, L, C^{(0)}, D_R, D_L\}$ , требуется рассчитать такое значение длины змеевика  $L$ , которая обеспечивает на выходе из теплообменника однородную смесь компонентов, которая достигается равенством концентрации по объему теплообменника.

На первом этапе необходимо сформировать формализованное описание процесса термообработки, как объекта управления (рис. 1).

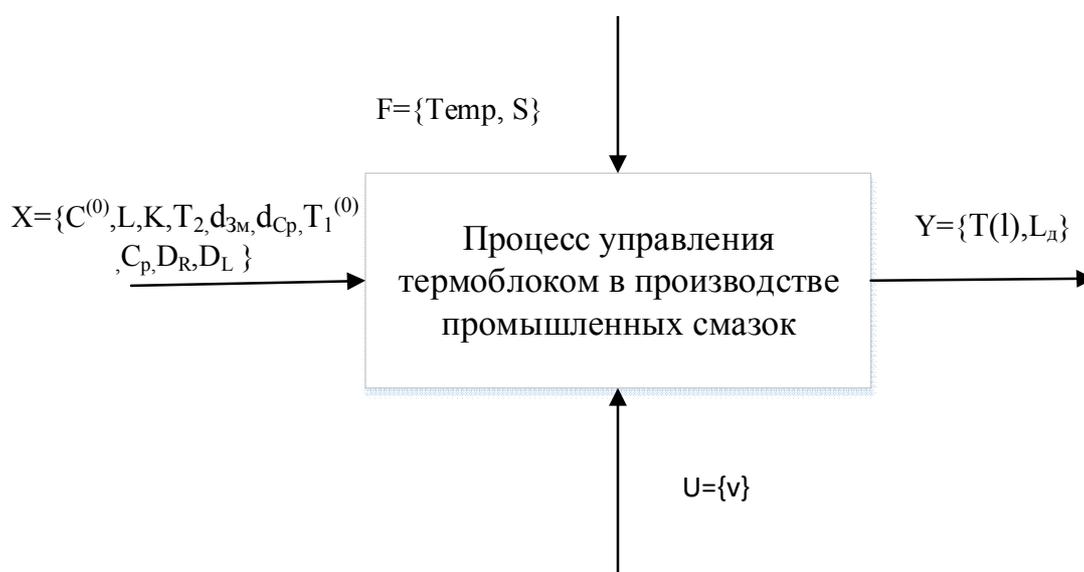


Рис. 1. Формализованное описание процесса термообработки как объекта управления

В таблице представлен перечень параметров и показателей процесса.

Перечень параметров и показателей процесса

Вектор	Параметры и показатели
Вектор входных параметров $X$	$C_p$ – удельная теплоемкость смазки, (Дж/кг·К); $d_{зм}$ – диаметр витка змеевика, (м); $d_{ср}$ – диаметр трубы змеевика, (м); $K$ – коэффициент теплопередачи, (Вт/м <sup>2</sup> ·К); $T_2$ – температура теплоносителя, (К); $T_1^{(0)}$ – температура потока на входе в аппарат, (К); $L$ – длина трубы, (м); $C^{(0)}$ – концентрации компонентов в смеси, (моль/м <sup>3</sup> ); $D_R, D_L$ – коэффициенты диффузии, (м <sup>2</sup> /с).
Вектор возмущающих воздействий $F$	$Temp$ – колебания температуры в помещении, где расположен термоблок, которые нельзя учесть; $S$ – состав примесей в исходных компонентах для варки смазки.
Вектор управляющих воздействий $U$	$v$ – расход потока компонентов смазки, (кг/с).
Вектор выходных параметров $Y$	$T(l)$ – температура потока по длине трубы, (К); $L_d$ – необходимая длина трубы (м).

Представленная на рис. 2 схема змеевикового теплообменника включает в себя два потока теплоносителей – поток в резервуаре с начальной температурой (на входе в аппарат)  $T_1^{(0)}$ , конечной температурой (на выходе)  $T_1$ , расходом  $v_1$ , теплоёмкостью  $C_{p1}$  и поток в змеевике с начальной температурой (на входе в аппарат)  $T_2^{(0)}$ , конечной температурой (на выходе)  $T_2(L)$ , расходом  $v_2$ , теплоёмкостью  $C_{p2}$ . Длина змеевика обозначена  $L$ .

Для построения математического модели приняты следующие допущения:

- поток в змеевике описывается гидродинамической моделью идеального вытеснения, то есть температура изменяется по длине змеевика;
- рассматривается стационарный режим работы теплообменника;
- коэффициент теплопередачи, теплоёмкости считается постоянным;
- кроме теплопередачи никаких процессов не происходит.

Уравнение теплового баланса для потока в змеевике (гидродинамический режим идеального вытеснения) записывается следующим образом:

$$v_2 C_{p_2} \frac{dT_2}{d\ell} = \frac{F^T}{L} (-\Delta q^T).$$

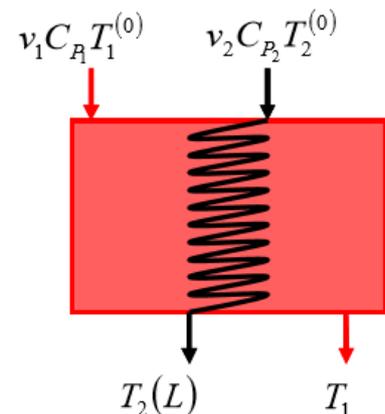


Рис. 2. Змеевиковый теплообменник

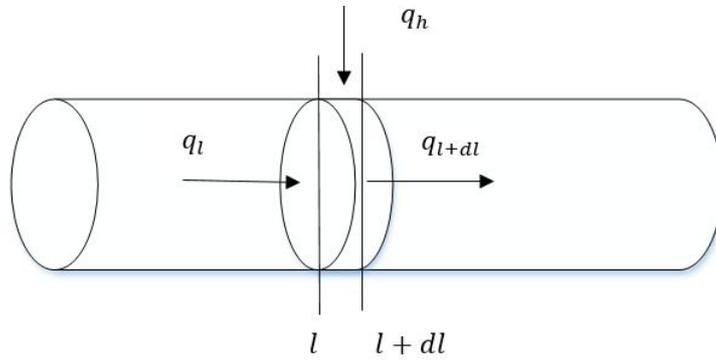


Рис. 3. Змеевик теплообменника.

Если в потоке одновременно происходит продольное и радиальное перемешивание веществ, то математическое описание гидродинамики потока можно представить двухпараметрической диффузионной моделью:

$$0 = -U \frac{\partial C(r, l)}{\partial l} + D_L \frac{\partial^2 C(r, l)}{\partial l^2} + D_R \left( \frac{\partial^2 C(r, l)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C(r, l)}{\partial r} \right),$$

где  $D_R$  – коэффициент диффузии в радиальном направлении,  $\text{м}^2/\text{с}$ ;  $r$  – текущий радиус,  $\text{м}$ ;  $R$  – радиус аппарата,  $\text{м}$ ;  $D_L$  – коэффициент диффузии в продольном направлении,  $\text{м}^2/\text{с}$ .

Для решения уравнения применяется метод сеток.

$$C_{i,j} = \frac{-U \cdot r \cdot b^2 \cdot a + 2r \cdot Dr \cdot a^2 + Dr \cdot a^2 \cdot b}{2r(2 \cdot Dr \cdot a^2 + 2Dl \cdot b^2)} C_{i+1,j} +$$

$$+ \frac{U \cdot r \cdot b^2 \cdot a + 2r \cdot Dr \cdot a^2 + Dr \cdot a^2 \cdot b}{2r(2 \cdot Dr \cdot a^2 + 2Dl \cdot b^2)} C_{i-1,j} +$$

$$+ \frac{Dl \cdot b^2}{2 \cdot Dr \cdot a^2 + 2Dl \cdot b^2} C_{i,j+1} + \frac{Dl \cdot b^2}{2 \cdot Dr \cdot a^2 + 2Dl \cdot b^2} C_{i,j-1}.$$

Условие окончания расчетов  $\varepsilon = 0.0001$  – разность значений между двумя соседними шаблонами. В результате решения уравнения формируется поверхность теплового поля в термоблоке, пример которого представлен на рис. 4. Блок-схема алгоритма расчета представлена на рис. 5.

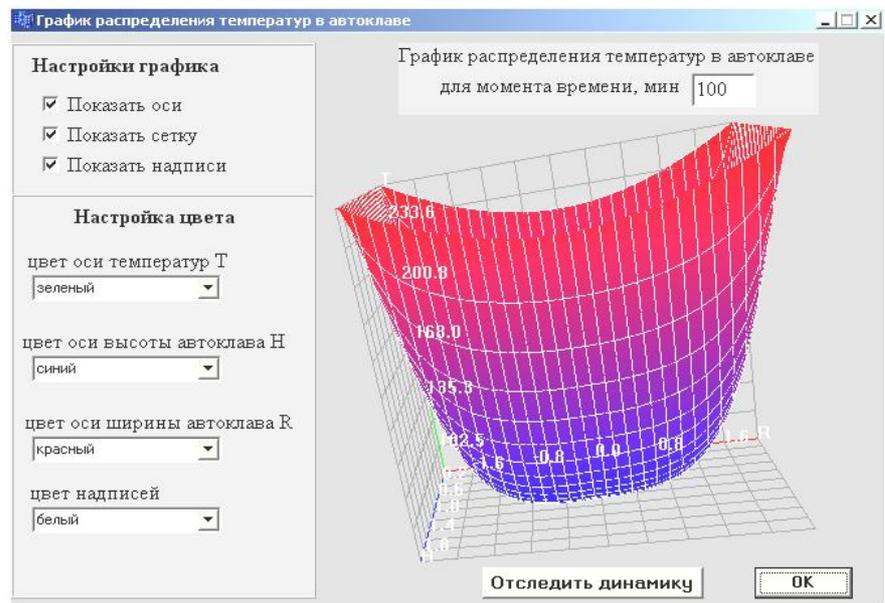


Рис. 4. Графическое представление распределения температур в автоклаве (термоблоке)

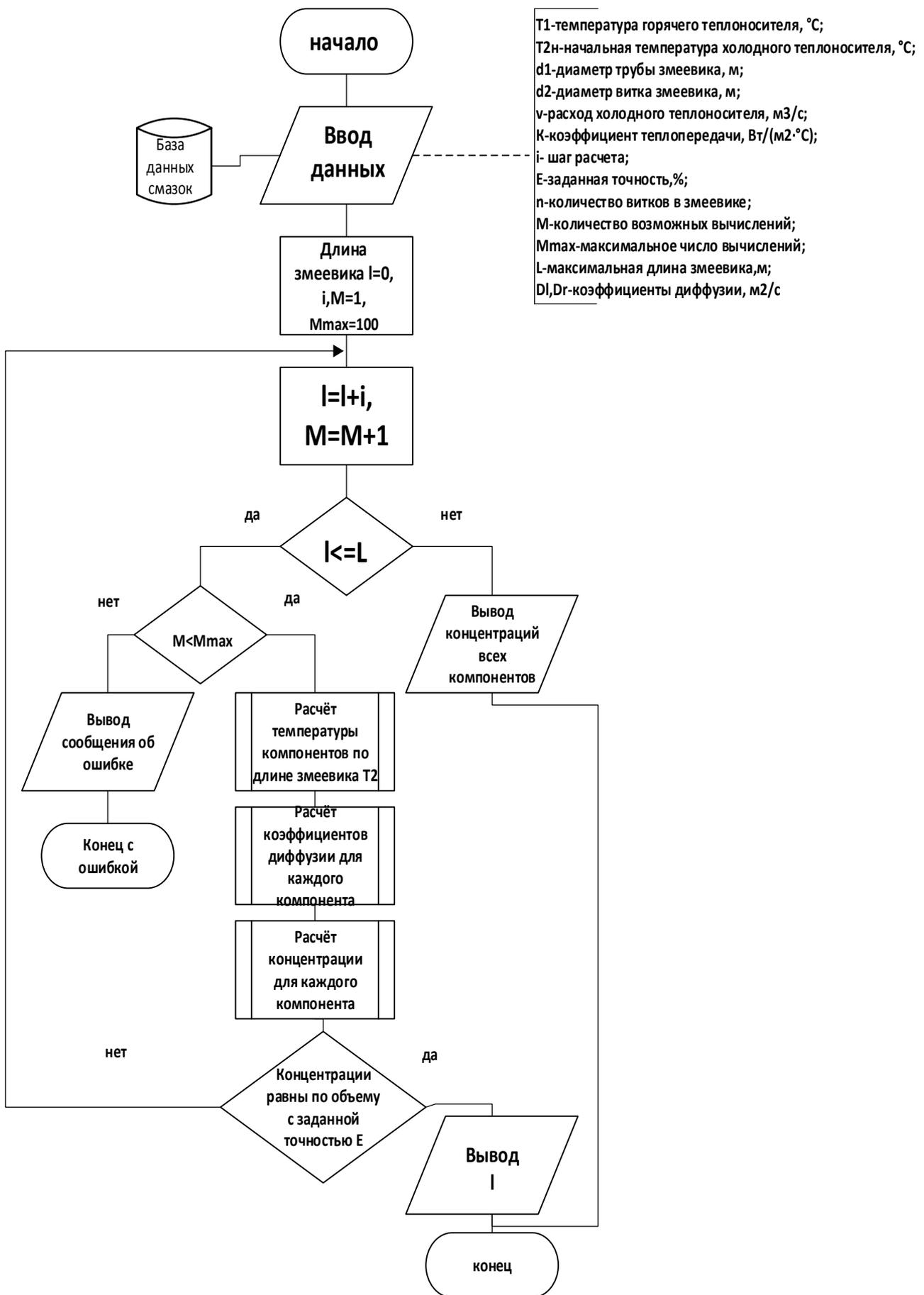


Рис. 5. Блок – схема расчета

Математическое описание тепловых функций в термоблоке позволит оценить влияние температуры на скорость процесса, выход целевых и побочных продуктов; выбрать конструктивные и режимные характеристики процесса, обеспечивающие наилучшие значения оценок эффективности.

#### Литература

1. Касаткин, А. Г. Основные процессы и аппараты химической технологии / А. Г. Касаткин. – 12-е изд., стереотип. – М.: Альянс, 2006. – 750 с.
2. Новиков, Г. А. Постановка задачи расчета тепловых полей термоблока для непрерывного процесса получения промышленных смазок / Г. А. Новиков, О. Г. Новикова, А. А. Кривобокова // Сборник статей научно-информационного центра «Знание» по материалам XXVII международной научно-практической конференции: «Развитие науки в XXI веке». – Харьков, 2017. – Ч. 1. – С. 52-57.

## THE METHOD OF CALCULATION OF THERMAL FIELDS OF THE FUSER IN THE PRODUCTION OF INDUSTRIAL LUBRICANTS

O. G. Novikova

St. Petersburg State Technological Institute (Technical University)

A technique for calculating the thermal fields of the fuser in the production of industrial lubricants is proposed. The calculated thermal field of the fuser in the general structure of the automated control system will allow real-time improvement of the quality of lubricants produced due to the optimally selected length of the coil. And also it will enable to monitor the temperature of the process through the entire length of the pipe, which will help prevent abnormal situations.

Keywords: industrial lubrication, the fuser, thermal field.

## АКУСТИЧЕСКАЯ ЭМИССИЯ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ И СРЫВЕ ДИСЛОКАЦИОННОГО СКОПЛЕНИЯ

В. В. Благовещенский, И. Г. Панин

Костромской государственный университет  
[vvblagov@list.ru](mailto:vvblagov@list.ru), [igpanin@list.ru](mailto:igpanin@list.ru)

В работе представлены результаты математического моделирования образования и срыва скопления прямолинейных дислокаций перед искусственным препятствием, а также проведена оценка уровня звуковых импульсов, возникающих при откреплении дислокаций.

Ключевые слова: дислокация, математическая модель, акустическая эмиссия, скопление, напряжение.

### Введение

В работе рассматривается образование скопления прямолинейных краевых дислокаций, его срыв при освобождении начальной дислокации и акустическая эмиссия, сопровождающая разбегание дислокаций после устранения препятствия (рис. 1). Дислокации 1-5, двигаясь последовательно, друг за другом, под действием внешнего напряжения  $\sigma$ , наталкиваются на непреодолимое в данный момент препятствие  $X$  и останавливаются. Для каждой дислокации вводятся координаты  $X_i$ .

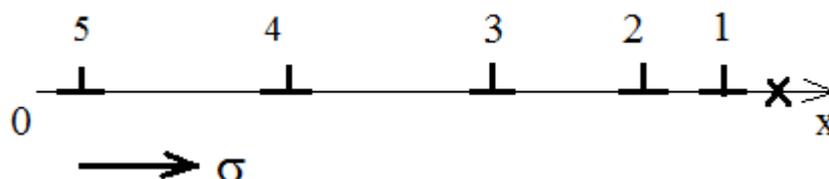


Рис. 1. Скопление прямолинейных краевых дислокаций,  $X$  – препятствие

### Модель

Движение прямолинейных краевых дислокаций, образованных дислокационным источником (например, источником Франка-Рида) задается уравнением

$$v = \frac{b}{B} \sigma,$$

где  $v$  – скорость дислокации,  $b$  – модуль вектора Бюргерса,  $B$  – коэффициент динамической вязкости,  $\sigma$  – величина действующего на дислокацию напряжения.

Головная дислокация 1, испущенная источником, останавливается и закрепляется на некотором расстоянии от него, как бы встретив на своем пути непреодолимое препятствие (рис. 1). Каждая следующая дислокация, испускае-

мая источником, приближаясь к первой, испытывает на себе воздействие, возрастающее по мере приближения к ней и препятствующее ее дальнейшему продвижению, вплоть до полной остановки. Все ранее испущенные дислокации воздействуют как друг на друга, так и на дислокационный источник, который может быть «заперт» при большом количестве уже испущенных дислокаций.

Сила взаимодействия между дислокациями определялась выражением [3]:

$$f_{i,j} = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\mu)} \frac{1}{(x_i - x_j)}.$$

Здесь  $x_i$  – координата  $i$ -ой дислокации,  $G$  – модуль сдвига,  $\mu$  – коэффициент Пуассона. Тогда уравнение движения  $i$ -й дислокации в скоплении будет иметь вид

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{b}{B} \left( \sigma + \sum_{j \neq i} f_{i,j} \right), \quad (1)$$

где  $\sigma$  – внешнее напряжение, под воздействием которого образуется скопление дислокаций. В дальнейших расчетах использовались следующие значения материальных констант:  $G = 1.8 \times 10^{10}$  Па,  $b = 4 \times 10^{-10}$  м,  $\rho = 5 \times 10^2$  кг/м<sup>3</sup>,  $r = 10^{-2}$  м,  $B = 2.9 \times 10^{-4}$  Па·с,  $c = 5 \times 10^3$  м/с,  $\mu = 2,6 \times 10^{-2}$ .

## Результаты

Предложенная выше модель применялась для использования в двух опытах. В первом формировалось дислокационное скопление, для чего головная дислокация помещалась в место ее закрепления (имитация остановки перед препятствием), а другие дислокации «набрасывались» в довольно произвольные точки плоскости легкого скольжения перед головной дислокацией. Движение дислокаций (кроме головной) определялось уравнением (1) до тех пор, пока они не попадали в положение равновесия, когда сумма внешних воздействий и междислокационного взаимодействия становилась равной нулю. Таким образом, образовывалось дислокационное скопление. На рис. 2 отображен процесс движения дислокаций из их начального положения в положение равновесия и последующий срыв образовавшегося скопления в момент времени  $t = 4 \times 10^{-6}$ , когда головная дислокация открепляется. Каждая кривая показывает изменение координаты  $X_i$  соответствующей дислокации.

Так как дислокации движутся с ускорением (как при торможении, так и при срыве), то при этом происходит излучение звука. Акустическое излучение, сопровождающее процесс образования скопления и его срыв, можно оценить формулой [2, 4]:

$$\sigma \approx G \frac{b}{r} \left( \frac{\rho b^2 c}{l_0 B} \right)^2 \frac{d^2 S}{d\tau^2},$$

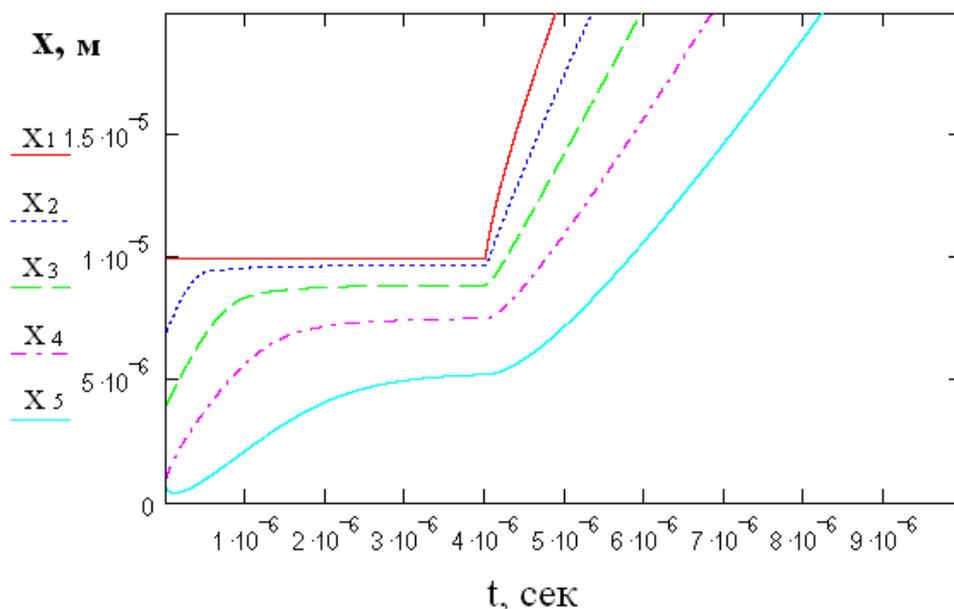


Рис. 2. Движение дислокаций из начального положения в положение равновесия и последующий срыв образовавшегося скопления

где  $c$  – скорость звука,  $\rho$  – плотность кристалла,  $r$  – расстояние от источника до приемника сигнала,  $l_0$  – длина основания дислокационного источника Франка-Рида,  $\tau = tC/(Bl_0^2)$  – безразмерное время,  $C = (Gb^2/(4\pi))\ln(l_0/b)$ . Таким образом,  $\sigma$  – величина упругих напряжений излучения, пропорциональная второй производной от заметаемой дислокацией площади. Исходя из этого, вторая производная движения первой дислокации вычисляется с помощью конечных разностей из таблицы результатов (по ней построены графики рис. 2), в которой содержатся координаты движения точек этой дислокаций, по следующей формуле:

$$v_i = \frac{x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i}{(t_{i+1} - t_i)^2},$$

где  $x_i$  – координата дислокации (зависит от  $t$ ),  $t_i$  – время. Аналогично вычисляются вторые производные движения остальных дислокаций ( $w, q, p, h$  соответственно для 2, 3, 4, 5) Результаты расчета процесса торможения дислокаций представлены на рис. 3, из которых видно, что, во-первых, все импульсы отрицательные, во-вторых, длительность импульсов от дислокаций имеет порядок  $10^{-6}$  сек, и она увеличивается с увеличением номера дислокации, в-третьих, амплитуда импульсов с ростом номера уменьшается. Необходимо также заметить, что длительность импульсов зависит и от динамической вязкости  $B$ .

Во втором опыте, результаты которого представлены на рис. 4, головная дислокация откреплялась (как бы устранялось препятствие), и происходил срыв скопления (рис. 2 после  $t = 4 \cdot 10^{-6}$ ). Дислокации начинают разбегаться под действием сил взаимного отталкивания, излучая при этом звуковые импульсы, которые можно отобразить на графике аналогично импульсам при торможении с той разницей, что в данном случае все импульсы имеют положительное значение,

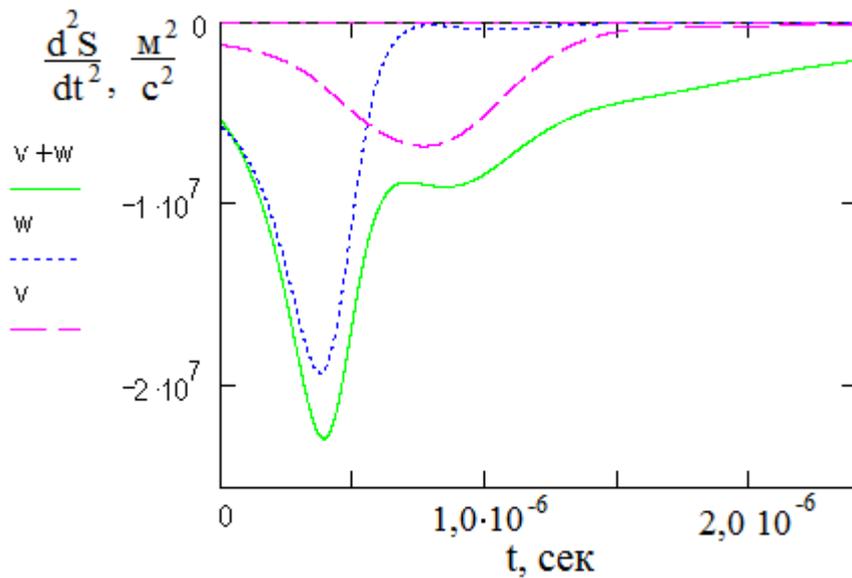


Рис. 3. Звуковые импульсы, излучаемые первой и второй дислокациями при торможении перед головной дислокацией

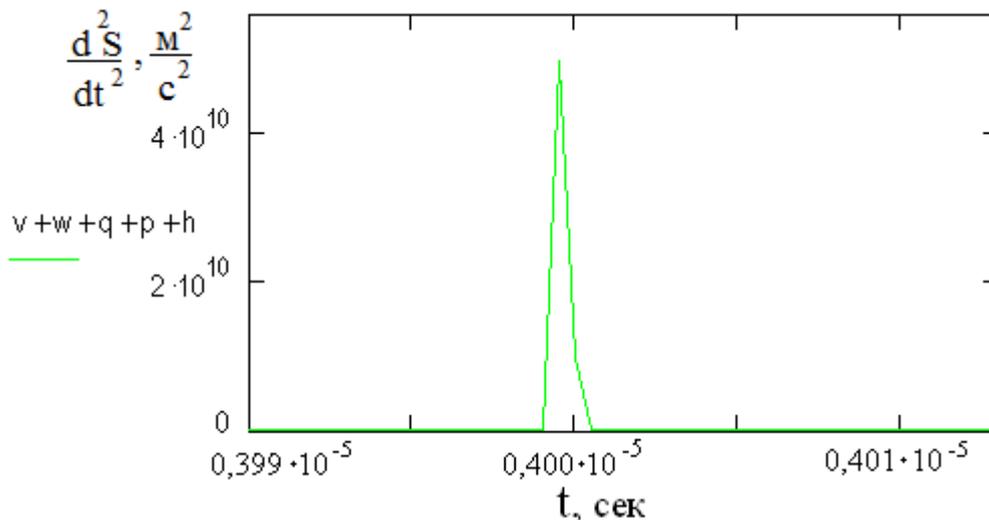


Рис. 4. Звуковой импульс, излучаемый всеми дислокациями скопления после срыва

тем самым обеспечивают значительную выпуклость кривой. На рисунке отображается только суммарный импульс, в который каждая дислокация скопления вносит свой вклад. Наибольший вклад в величину импульса дает головная дислокация, а вклад каждой последующей дислокации (с большим номером) на порядок меньше вклада предыдущей. На рис. 4 изображена суммарная вторая производная от заматаемой всеми дислокациями площади, которая определяет величину импульса.

### Заключение

В работе представлены результаты математического моделирования образования скопления прямолинейных дислокаций. Расчитаны и изображены на графиках кривые акустических импульсов при торможении и срыве

дислокаций. Полученный результат аналогичен результатам, полученным на другой модели для криволинейных дислокаций [5].

#### Литература

1. Нацик В. Д. Динамика и звуковое излучение источника Франка-Рида / В. Д. Нацик, К. А. Чишко // ФТТ. – 1975. – Т. 17. – № 1. – С. 342-345.
2. Нацик В. Д. Акустическая эмиссия при образовании дислокационного скопления источником Франка-Рида / В. Д. Нацик, К. А. Чишко // ФТТ. – 1978. – Т. 20. – № 7. – С. 1933-1936.
3. Хирт Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
4. Косевич А. М. Динамическая теория дислокаций // Успехи физических наук. – 1964. – Т. 84. – Вып. 4. – С. 579-609.
5. Благовещенский В. В. Акустическая эмиссия при образовании и срыве дислокационного скопления / Д. С. Андрианов, В. В. Благовещенский, И. Г. Панин // ЖТФ. – 2016. – Т. 86. – Вып. 5. – С. 124-127.

## ACOUSTIC EMISSION UNDER EDUCATION AND THE BREAKDOWN OF DISLOCATION AGGREGATION

V. V. Blagoveshchenskii, I. G. Panin

Kostroma State University

The paper presents the results of mathematical modeling of the formation and collapse of a cluster of rectilinear dislocations in front of an artificial obstacle, as well as an assessment of the level of sound impulses that occur when dislocations are detached.

Keywords: dislocation, mathematical model, acoustic emission, accumulation, stress.

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ НА ОСНОВЕ СТАТИСТИКИ ГЛОБАЛЬНОГО ИНДЕКСА МОРАНА

Г. Г. Рапаков, В. А. Горбунов, К. А. Абдалов

Вологодский государственный университет

[grapakov@yandex.ru](mailto:grapakov@yandex.ru)

Выполнено исследование территориального распределения онкологических заболеваний на основе глобальной статистики Морана в ходе поддержки управленческих решений для муниципального проекта активного долголетия.

Ключевые слова: глобальная статистика Морана I, пространственная кластеризация, поддержка принятия решений.

### Введение

Использование математико-картографического моделирования на основе современных геоинформационных систем и технологий (ГИС) в качестве методической основы обработки данных медико-социологического мониторинга позволяет оценивать значимость медико-социальных проблем, проводить ситуационный анализ и повышает качество принятия управленческих решений. Практическая значимость работы определяется использованием результатов оценки глобального индекса Морана при исследовании пространственной автокорреляции входного набора данных в ходе исполнения муниципальной концепции активного долголетия в части онкопатологии. Актуальной является задача моделирования территориального распределения онкологических заболеваний на основе методов пространственной статистики при информационно-аналитической поддержке проекта активного долголетия для предотвращения преждевременной смертности населения [1, 2].

### Цель исследования

Исследование алгоритмов идентификации статистически значимых пространственных кластеров позволит повысить эффективность формирования управленческих стратегий медицинской профилактики и выполнить компьютерное моделирование территориальных закономерностей распространения онкопатологий, что обуславливает новизну работы.

### Материалы и методы

Межведомственную работу по формированию здоровьесберегающего пространства активного долголетия регулируют ряд нормативно-правовых актов [2]. Информационной базой стали данные медико-социологического мониторинга с ошибкой выборки не более 5% и доверительной вероятностью  $\alpha = 0,95$ , что отвечает требованиям пилотного проекта. Пространственное моделирование случаев заболевания для когорты онкобольных по г. Вологде за период наблюдения с 2007 по 2016 гг. представлено на рисунке. Для геообработки использовались инструменты ГИС ArcGIS (Spatial Statistics Analysis Tools) [3].



### Результаты исследования и обсуждение

В ходе кластерного анализа на основе глобальной статистики Морана (Global Moran's I) выполняется сканирование входного набора данных и исследуется его пространственная автокорреляция. Одновременно учитываются как расположение объектов, так и их значения. Нулевая гипотеза утверждает, что анализируемые атрибуты набора объектов распределены хаотично между объектами в исследуемой области (пространственные процессы носят случайный характер). Для оценки значимости индекса Морана применяются  $z$ -оценка и  $p$ -значение.

Индекс Морана  $I$ :

$$I = \frac{n}{S_0} \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{i,j} z_i z_j}{\sum_{i=1}^n z_i^2}$$

где  $n$  – число объектов в наборе данных;  $S_0 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{i,j}$  – совокупность всех пространственных весов;  $w_{i,j}$  – пространственный вес для объектов  $i$  и  $j$ ;  $z_i$  – отклонение атрибута  $i$ -го объекта от его среднего значения  $x_i - \bar{X}$ .

Если величины  $p$  и  $z$  указывают на статистическую значимость, появляется возможность отклонить нулевую гипотезу для наблюдаемой структуры значений. Положительный индекс Морана указывает, что модель сгруппирована и имеет тенденцию к кластеризации. Пространственная кластеризация значений набора данных характеризуется таким их размещением, при котором объекты с высокими значениями изучаемых свойств размещаются рядом с другими высокими значениями, а объекты с низкими значениями – рядом с иными низкими. Отрицательный индекс Морана свидетельствует, что набор объектов рассредо-

точен и существует склонность к дисперсному распределению. В этом случае объекты с высокими значениями изучаемых свойств располагаются поблизости от объектов с низкими значениями.

При вычислении индекса Морана используется нормализация по вариации, поэтому  $I$  принимает значения в диапазоне от  $-1$  до  $+1$ . Статистика общего индекса Морана является асимптотически нормальной. В том случае, если гистограмма распределения входного класса указывает на значительное искажение данных, то рассчитанное по умолчанию пороговое значение гарантирует минимум 8 соседей. Автоматически вычисленный диапазон расстояний может оказаться не вполне отвечающим требованиям проводимого анализа кластеров. Применение пространственной автокорреляции наиболее эффективно, когда оценивается общая структура и тренд данных, а исследуемые пространственные процессы последовательны в границах области изучения [4, 5]. Определение пространственных взаимоотношений отражает внутренние связи между объектами набора данных. Особенностью пространственной концептуализации распространения злокачественных новообразований (ЗНО) является точечный характер размещения объектов. Исходя из свойства непрерывности и интерференции, удачным является выбор значения параметра вычисления INVERSE\_DISTANCE (обратное расстояние).

В качестве метода определения расстояния используется метрика Евклида, при этом каждому объекту гарантируется наличие, по крайней мере, одного соседнего элемента. Пороговое значение для поиска соседства составляет 1842,876 метра. В связи с использованием географических координат пространственный расчет выполняется с помощью хордовых измерений, которые быстро вычисляются и дают хорошие оценки геодезических расстояний для точек, разделенных интервалом не более 30 градусов. Количество объектов во входном классе определяется объемом выборки и значительно превышает минимально необходимое для использования пространственной автокорреляции 30 значений.

Получена сводка глобального индекса Морана для типа распределения — кластеризован и следующих входных классов пространственных объектов: возраст, пол, год проведения мониторинга (см. таблицу).

Классов объектов	Индекс Морана	$z$ -оценка	$p$ -значение
Возраст	0,054	5,376	0,000
Пол	0,019	1,901	0,057
Год мониторинга	0,024	2,391	0,017

Интерпретация результатов позволяет заключить, что в случае положительной  $z$ -оценки и статистически значимого  $p$ -значения нулевая гипотеза может быть отклонена. С вероятностью меньше  $p$  полученный тип распределения может быть результатом случайного выбора. Пространственное распределение значений в каждом наборе данных кластеризовано.

Вычисление диапазона расстояний до числа соседних объектов позволяет определить расстояние, на котором пространственная кластеризация наиболее

очевидна. По умолчанию каждому объекту обеспечивается не менее одного соседа. В качестве метода определения расстояния используется метрика Евклида [6, 7]. По данным медико-социологического мониторинга для входного класса пространственных объектов рассчитаны среднее и максимальное расстояния до ближайшего соседа: 15,816 и 1842,692 метров.

Сведения по территориальной контрастности могут найти применение в адресных мероприятиях для коррекции работы онкологической службы и направленного анализа факторов, вызывающих увеличение риска развития ЗНО.

### Заключение

При помощи глобальной статистики Морана (Global Moran's I) исследована пространственная автокорреляция входного набора геоданных медико-социологического мониторинга случаев заболевания ЗНО за 2007 – 2016 гг. по г. Вологде. Выполнена проверка нулевой гипотезы, утверждающей, что пространственные процессы носят случайный характер. Для оценки значимости индекса Морана применены  $z$ -оценка и  $p$ -значение. Получена сводка глобального индекса Морана для типа распределения – кластеризован и следующих входных классов пространственных объектов: возраст, пол, год проведения мониторинга. Нулевая гипотеза для них отклонена. Пространственное распределение значений в каждом наборе данных кластеризовано.

### Литература

1. Рапаков, Г. Г. Методы анализа выживаемости в задачах активного долголетия (опыт г. Вологды): монография / Г. Г. Рапаков; М-во образ. и науки РФ, Вологод. гос. ун-т, Международ. акад. наук эколог. и безопасн. жизнедеятельности. – Вологда: ВоГУ, 2015. – 119 с.
2. Вологда — город долгожителей [Электронный ресурс]: концепция активного долголетия на территории муниципального образования «Город Вологда» на период до 2035 года: решение Вологодской городской Думы от 29 декабря 2014 г. № 129 // КонсультантПлюс: справ. – правовая система / Компания «КонсультантПлюс».
3. Mitchell, A. The ESRI Guide to GIS Analysis, Volume 1: Geographic Patterns and Relationships / A. Mitchell. – ESRI Press, 2001. – 190 p.
4. Mitchell, A. The ESRI Guide to GIS Analysis, Volume 2: Spatial Measurements and Statistics / A. Mitchell. – ESRI Press, 2005. – 252 p.
5. Getis, A. The Analysis of Spatial Association by Use of Distance Statistics / A. Getis, K. Ord // Geographical Analysis. – 1992. – Vol. 24, Issue 3. – pp. 189–206.
6. Fischer, M. M. Handbook of Applied Spatial Analysis: Software Tools, Methods and Applications / M. M. Fischer, A. Getis. – Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010. – 811 p.
7. Bivand, R. S. Applied Spatial Data Analysis with R / R. S. Bivand, E. Pebesma, V. Gomez-Rubio. – Springer Science+Business Media New York, 2013. – 413 p.

## COMPUTER SIMULATION OF SPATIAL PATTERN WITH GLOBAL MORAN'S I

G. G. Rapakov, V. A. Gorbunov, K. A. Abdalov

Vologda State University

Spatial clustering target patterns in data based on Global Moran's I technique for cancer patients during active longevity project.

Keywords: Global Moran's I, spatial clustering, decision support.

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК «ЯДРО/ОБОЛОЧКА»

К. А. Романова, Ю. Г. Галяметдинов

Казанский национальный исследовательский технологический университет  
[ksenuya@mail.ru](mailto:ksenuya@mail.ru)

Методы теории функционала плотности были применены для изучения строения и электронных свойств квантовых точек вида «ядро/оболочка», состоящих из полупроводниковых селенида и сульфида кадмия, покрытых оболочкой из сульфида кадмия и цинка. Осуществлен расчет положения валентной зоны и зоны проводимости, ширины запрещенной зоны при варьировании толщины и природы оболочки.

Ключевые слова: численное моделирование, теория функционала плотности, квантовые точки, ширина запрещенной зоны.

Функциональные оптические материалы на основе полупроводниковых квантовых точек (КТ) являются в настоящее время объектами многочисленных исследований вследствие высокой эффективности их люминесценции, регулируемого размером и формой частиц излучения в широком диапазоне видимого спектра, отличной фотостабильности и достаточно продолжительного времени жизни фотовозбуждения. В последние годы были значительно расширены области их практического применения в качестве компонентов лазеров, солнечных элементов, устройств отображения информации, квантовой вычислительной техники, светодиодов, транзисторов и различных оптоэлектронных устройств. Основным затруднением в практическом применении данных объектов является сложность контроля динамики фотоиндуцированных носителей заряда и эмиссионных свойств, которые в основном зависят от размера, формы и природы полупроводниковых наночастиц. С целью улучшения свойств полупроводниковых материалов получают многослойные полупроводниковые КТ со строением «ядро/оболочка», покрывая КТ оболочкой из полупроводникового материала с большей шириной запрещенной зоны. Получаемые при этом наночастицы отличаются лучшей эффективностью излучения по сравнению с отдельными частицами. Применение оболочки позволяет уменьшить деформацию КТ, сохранить первоначальные размер и форму ядра, изменить реактивность и термическую стабильность, модифицировать поверхность, улучшить функциональность, эффективность излучения, диспергируемость и т.д. В итоге частицы по своим свойствам отличаются от свойств материалов, из которых состоят.

Применение теоретических методов химии позволяет подобрать оптимальные компоненты для функциональных материалов и заранее оценить их преимущества и недостатки, прогнозировать соединения с улучшенными свойствами до проведения их синтеза. Несмотря на большое разнообразие квантово-

химических методов моделирования, в литературе не представлен единый подход к изучению материалов с полупроводниковыми КТ.

В данной работе представлены результаты по моделированию строения и физико-химических свойств КТ «ядро/оболочка» с ядром из полупроводникового CdSe, покрытого оболочкой из CdS, и КТ CdS с оболочкой из ZnS, имеющих гексагональную структуру вюрцита. В качестве объектов моделирования были выбраны системы, имеющие следующие соотношения числа монослоев в ядре и оболочке КТ CdSe/CdS и CdS/ZnS: 3:7, 5:5, 7:3. Моделирование было проведено с помощью метода теории функционала плотности с функционалом PBE приближения обобщенных градиентов (GGA) с базисным набором плоских волн в рамках метода проекционных присоединений волн (PAW). Кинетическая энергия обрезания была выбрана равной 400 эВ. Для поверхности Ферми использовали приближение Methfessel-Paxton с шириной 0,1 эВ.

На первом этапе было проведено моделирование CdSe и CdS, в качестве критерия оценки точности проведенных расчетов было использовано значение ширины запрещенной зоны, экспериментальное значение которой составляет 1.75 эВ для CdSe и 2.50 эВ для CdS. Рассчитанное значение составило 1.673 эВ при параметрах ячейки  $a = b = 4.125 \text{ \AA}$  и  $c = 6.865 \text{ \AA}$  для CdSe. В случае CdS в ходе моделирования было получено значение ширины запрещенной зоны 2.478 эВ при параметрах ячейки  $a = b = 4.015 \text{ \AA}$  и  $c = 6.531 \text{ \AA}$ . Далее были составлены и изучены квантовые точки CdSe/CdS и CdS/ZnS с разным числом монослоев в ядре и оболочке (3:7, 5:5, 7:3). Проведена оптимизация их геометрии, осуществлено моделирование диаграмм распределения электронной плотности и рассчитаны значения ширины запрещенной зоны.

Оптимизированные геометрии поверхностей CdSe/CdS и CdS/ZnS незначительно отличаются от изначальной геометрии элементарных ячеек CdSe и CdS, из которых были построены, и сохраняют исходную гексагональную структуру. Это объясняется тем, что материалы ядра и оболочки КТ имеют одинаковое строение кристаллической решетки, что предотвращает образование дефектов на границе раздела, способствует росту и повышает стабильность КТ. К примеру, в поверхностном слое длина связи Cd-S ( $2.74 \text{ \AA}$ ) на  $0.08 \text{ \AA}$  меньше средней длины связи Cd-Se ( $2.66 \text{ \AA}$ ) в объеме КТ и на еще меньшую величину ( $0.06 \text{ \AA}$ ) отличается от длины связи Cd-Se ( $2.68 \text{ \AA}$ ) в элементарной ячейке CdSe. Таким образом, оптимизация геометрии поверхности показала незначительное уменьшение длин связей между поверхностными атомами по сравнению с атомами в объеме КТ (не более 3%), что, однако, указывает на отклонение морфологии поверхности от внутренней структуры CdSe.

Рассчитанная ширина запрещенной зоны рассмотренной КТ CdSe/CdS составляет порядка 2.44 эВ, что соответствует экспериментальной величине 2.42 эВ. Ширина запрещенной зоны для гексагональной кристаллической решетки CdSe составляет 1.75 эВ, для CdS - 2.50 эВ. Применение оболочки из CdS и ZnS позволяет пассивировать поверхностные состояния, сохранить форму и размер

КТ, предотвратить допуск к поверхности окислителя и варьировать оптические свойства КТ.

Оболочка из CdS оказывает значительно большее влияние на положение зоны проводимости по сравнению с ZnS. В случае КТ CdSe/CdS локализация электронов может происходить как в ядре КТ, так и в оболочке, что приводит к их безызлучательному гашению при миграции электронов на поверхность КТ посредством дефектов поверхности. Применение оболочки из широкозонного полупроводникового материала ZnS (ширина запрещенной зоны 3.91 эВ) позволяет повысить эффективности люминесценции за счет пассивации поверхностных состояний, что приводит к локализации внутри ядра электрон-дырочной пары.

Таким образом, на основе данных квантово-химических расчетов выявлено влияние природы и толщины оболочки на свойства квантовых точек, эффективность их излучения и перспективность использования в оптоэлектронике. Полученные по результатам моделирования данные близки к экспериментальным. Квантово-химические расчеты были проведены с использованием суперкомпьютеров МВС-10П и МВС-100К «Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН» и вычислительных ресурсов системы «Ломоносов» суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М. В. Ломоносова [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-33-00062 мол\_а.

#### Литература

1. Voevodin, Vl. V. Practice of «Lomonosov» Supercomputer / Vl. V. Voevodin, S. A. Zhumatiy, S. I. Sobolev, A. S. Antonov, P. A. Bryzgalov, D. A. Nikitenko, K. S. Stefanov, Vad. V. Voevodin // Open Systems J. – 2012. – № 7. – P. 36-39.

## THEORETICAL SIMULATION OF THE STRUCTURE AND ELECTRONIC PROPERTIES OF «CORE/SHELL» QUANTUM DOTS

K. A. Romanova, Yu. G. Galyametdinov

Kazan National Research Technological University

The methods of density functional theory were applied to the study of the structure and electronic properties of «core/shell» quantum dots with semiconductor core of cadmium selenide and cadmium sulfide with cadmium sulfide and zinc sulfide shell. The positions of valence and conduction bands, band gap energies were calculated for the quantum dots with different shells and various thicknesses.

Keywords: computational simulation, density functional theory, quantum dots, band gap.

## РАСЧЕТ ТОКА, НАПРЯЖЕНИЯ, МОЩНОСТИ И ЧАСТОТЫ СЕТЕВОГО НАСОСА WIL0 BL 80/170-30/2 С ЧАСТОТНЫМ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕМ EMOTRON С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА MACHINE EDITION

И. А. Семина, И. С. Кожмендина

Омский государственный технический университет  
[semina\\_ia@mail.ru](mailto:semina_ia@mail.ru)

Программный комплекс для вычисления тока, напряжения, мощности, частоты сетевого насоса Wilo BL 80/170-30/2 с использованием частотного преобразователя Emotron» позволяет повысить эффективность процесса исследования и расчета параметров регулируемых электроприводов: сократить средства и время для снятия опытных характеристик, вести наблюдения в широком диапазоне параметров двигателя при различных видах настройки системы управления.

Ключевые слова: частотный преобразователь, электрические машины, системы автоматического управления, энергоэффективность, энергосбережение.

В настоящее время для моделирования и расчета параметров частотно управляемого электропривода широко применяется программный комплекс Machine Edition 7.0. Данная программа позволяет разрабатывать приложения автоматизации в единой среде. Инструментальные средства Machine Edition 7.0 полностью интегрированы со средой и взаимодействуют друг с другом [1].

В котельной «Импульс» (рис. 1) предусмотрены три мощных по 30 кВт сетевых насоса Wilo BL 80/170-30/2, работающие на один общий коллектор. Два

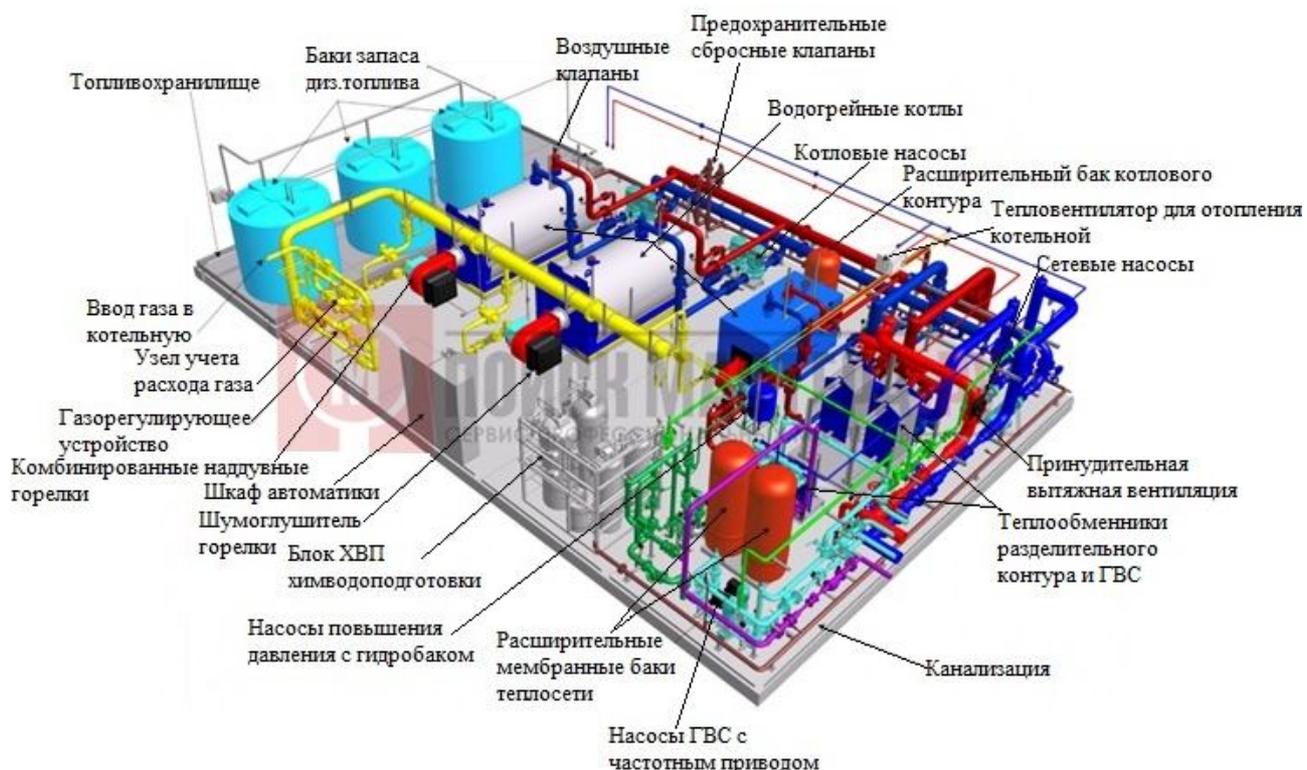


Рис. 1. Структурная схема котельной

насоса являются рабочими, третий – резервным. Насосы необходимы для равномерной подачи теплоносителя и его отпуска, транспортировки теплоносителя по трубам к тепловому источнику и циркуляции теплоносителя.

Частотно управляемый сетевой насос Wilo BL 80/170-30/2 (рис. 2) с преобразователем Emotron в качестве регулируемого электропривода позволяет точно поддерживать давление воды в тепловой системе, уменьшить количество прямых пусков мощных насосных агрегатов, сократить затраты на текущий ремонт и техническое обслуживание электромеханического и гидравлического оборудования, автоматизировать технологический процесс и сокращают его трудоемкость.



Рис. 2. Внешний вид насоса Wilo BL 80/170-30/2 [2]

Рассмотрим более подробно установленные сетевые насосы Wilo BL 80/170-30/2:

- одноступенчатый центробежный насос с сухим ротором блочного типа для установки на фундаменте;
- номинальный ток равен 55,1 А;
- блочное исполнение с низким уровнем шума и вибрации;
- с промежуточным корпусом и неподвижно присоединенным унифицированным (стандартным) мотором;
- с не зависящим от направления вращения скользящим торцевым уплотнением в кожухе с принудительным охлаждением и снижающим кавитацию рабочим колесом;
- фланцы с соединениями для измерения давления R 1/8;
- на корпус насоса и соединительную скобу нанесено катафорезное покрытие [3].

Применяемые насосные установки позволят реализовать поставленные задачи по внедрению частного регулирования на насосном оборудовании котельной «Импульс».

В представленной статье для моделирования и снятия характеристик (рис. 3) с сетевого насоса Wilo BL 80/170-30/2 с частотным преобразователем Emotron используется программа Machine Edition 7.0 микроконтроллера GE Fanuc Series 90-30, который обеспечивает автоматизацию процесса на котельной «Импульс». Программируемый логический контроллер Series 90-30 компании

GE Fanuc – это целое семейство контроллеров, систем ввода-вывода и специализированных модулей, разработанных с учетом всех требований, необходимых для всестороннего управления промышленным оборудованием, а также позволяют обеспечить ускоренный процесс интеграции в области автоматизации производства. Возможности программирования для серии 90-30 реализуются с помощью языков программирования Ladder Logic, Instruction List, SFC, “С”, или State Logic. Программирование на языке “С” позволяет пользователям выполнять сложные вычисления, которые раньше были доступны только большим ПЛК.

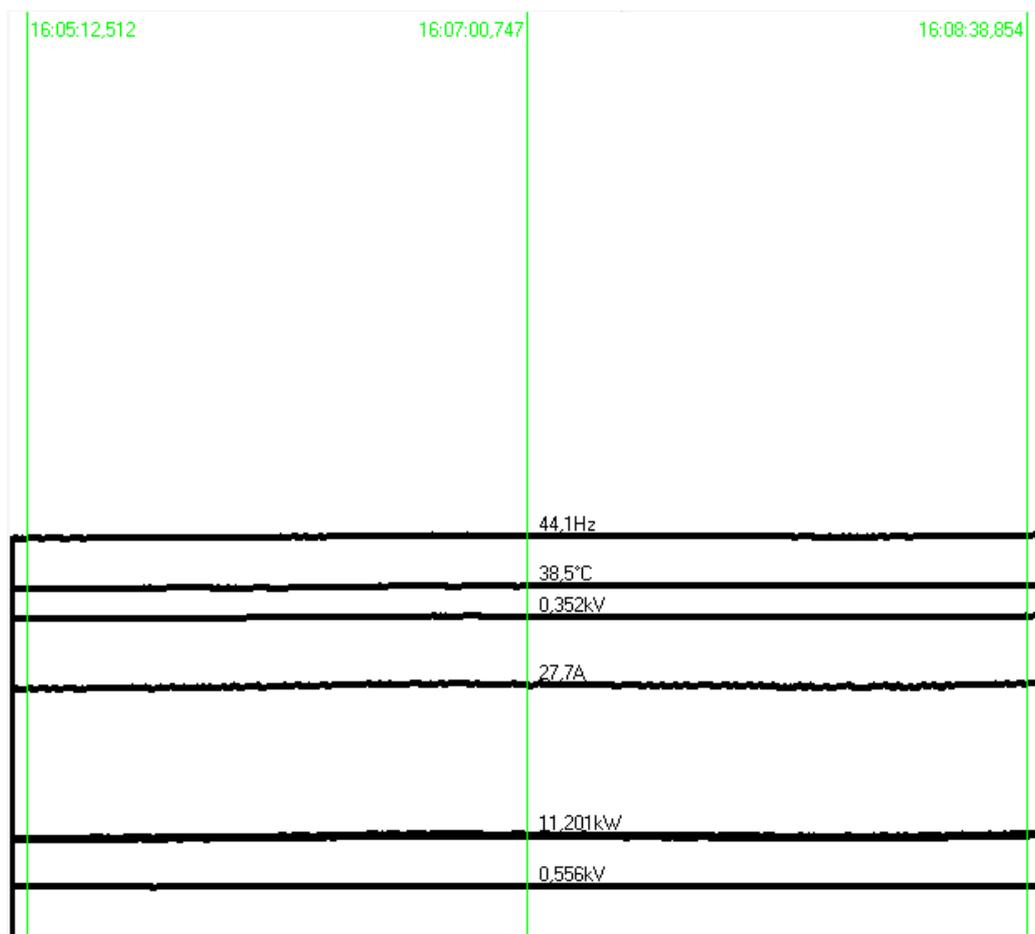


Рис. 3. Характеристики работы сетевого насоса при управлении частотным преобразователем в виде трендов EmoSoftCom

Применение регулируемого электропривода для насосных агрегатов котельных позволяет исключить ускоренный износ электротехнического и гидравлического оборудования и возникновению гидравлических ударов в трубопроводных сетях.

Алгоритм преобразования входного сигнала по RS-485 от частотного преобразователя в программном комплексе Machine Edition 7.0 (рис. 4) состоит из следующих блоков: блока преобразования математического кода в инженерные единицы по параметру частоты работы двигателя, блока преобразования математического кода в инженерные единицы по параметру тока работы двигателя, блока преобразования математического кода в инженерные единицы по параметру напряжения работы двигателя.

При использовании программного комплекса реализуются заданную в мнемосхеме (рис. 5) логику контроля и управления сетевых насосов, а также режиме исполнения будет получать по различным каналам связи текущие значения параметров работы частотного преобразователя, без участия других программных средств. Можно создавать свои окна с мнемосхемами, в которых будет отображаться нужная информация.

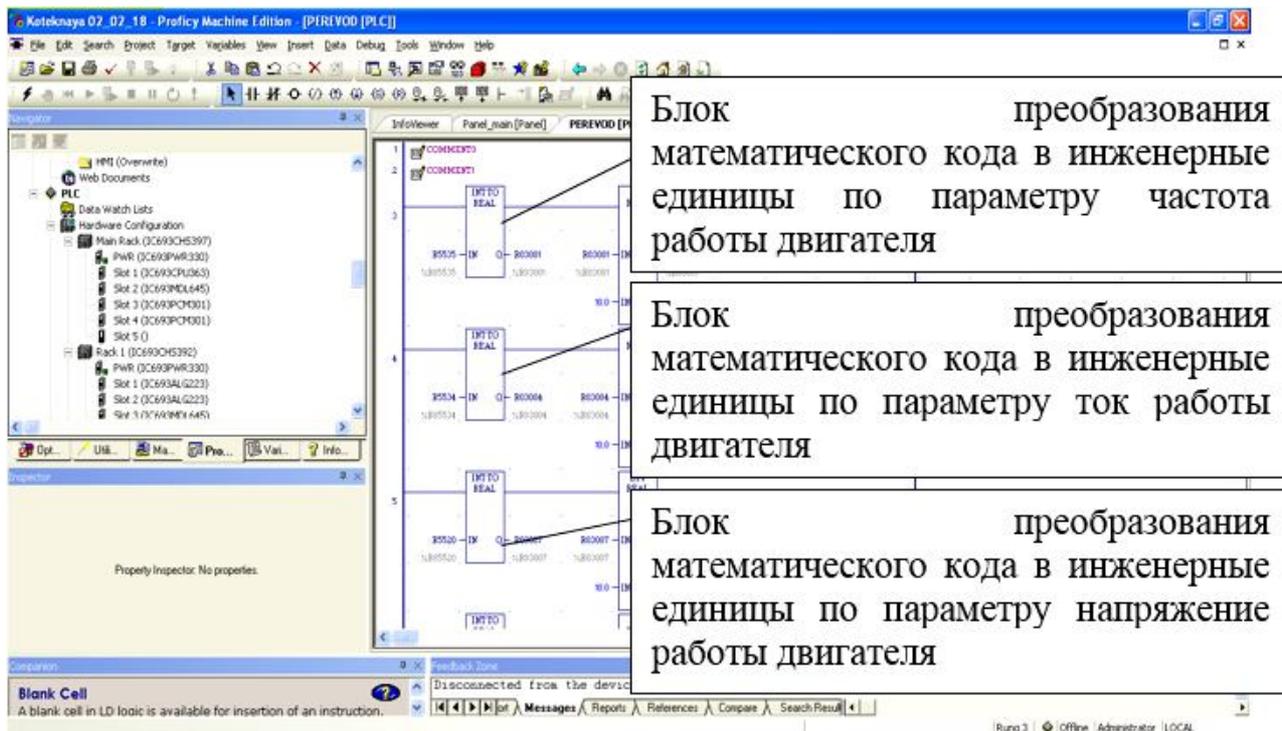


Рис. 4. Алгоритм преобразования входного сигнала по RS-485 от частотного преобразователя в программном комплексе Machine Edition 7.0

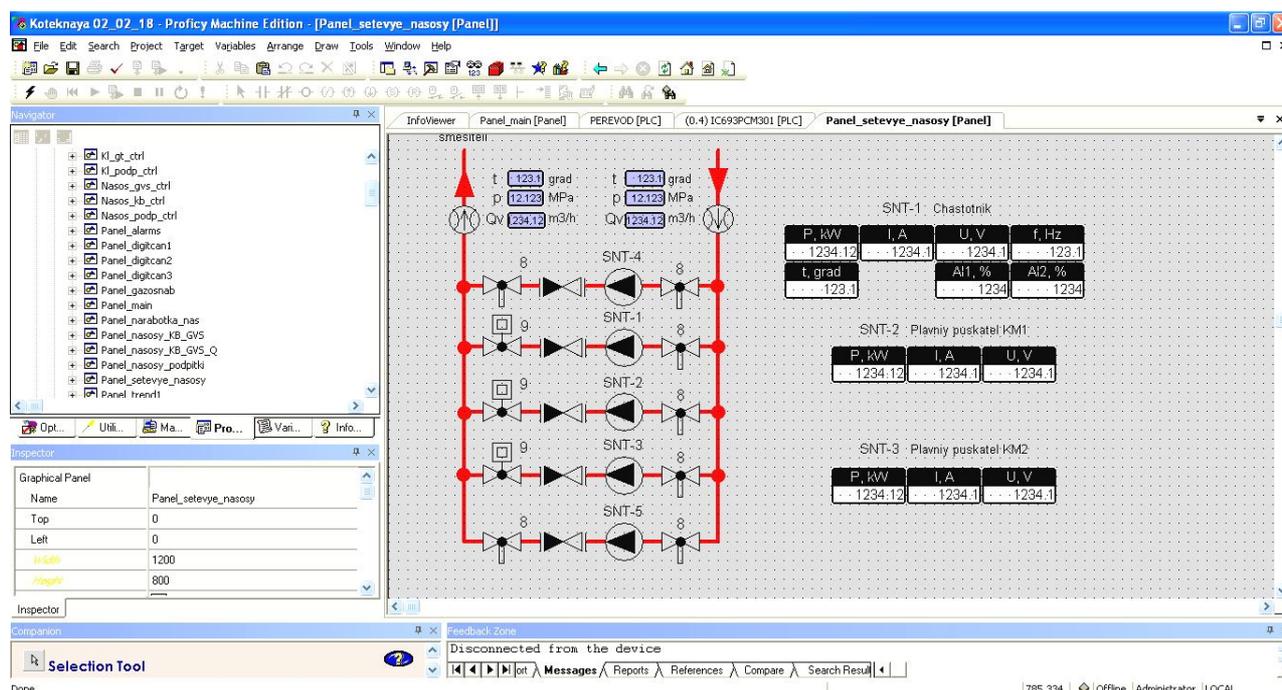


Рис. 5. Мнемосхема в программном комплексе с отображением параметров работы частотного преобразователя

### Расшифровка обозначений на мнемосхеме

Обозначение на мнемосхеме	Наименование объекта
№8	Механическая задвижка
№9	Электрическая задвижка
SNT 1-5	Сетевой насос № 1-5
P, kW	Мощность сетевого насоса
I, A	Ток сетевого насоса
U, V	Напряжение сетевого насоса
F, Hz	Частота сетевого насоса

Для функционирования программного комплекса необходимы следующие аппаратные и программные средства компьютера диспетчерского пункта:

1. ОС: Microsoft Windows XP и выше.
2. Тип ЭВМ: ПК на базе процессора Intel.
3. Частота процессора не ниже 1 ГГц.
4. Оперативная память от 512 Мб.
5. Наличие не менее 100 Мб свободного места на диске.

Интерфейс RS-485, который должен обеспечивать автоматическое включение и выключение передатчика без управления со стороны порта компьютера. При этом есть возможность демонстрационного режима работы электронной модели, когда нет необходимости в подключении приборов учета [4].

#### Литература

1. Инструментальное программное обеспечение ПЛК // Промышленная автоматизация "Индасофт" URL: [https://indusoft.com.ua/files/products/Machine\\_Edition\\_manual.pdf](https://indusoft.com.ua/files/products/Machine_Edition_manual.pdf) (дата обращения: 11.10.18).
2. WILO Насос BL 80/170-30/2 // Насосы URL: <http://nasos.group/kupit/nasosy-wilo-bl/blochnyi-nasos-wilo-bl80-170-30-2-r-2786227-2025823r> (дата обращения: 11.10.18).
3. Насосы с сухим ротором в блочном исполнении // Римос URL: <http://www.rimos.ru/catalog/pump/33099> (дата обращения: 11.10.18).
4. Интерфейс RS 485, принцип действия, организация работы // ПУЭ8 URL: <http://pue8.ru/silovaya-elektronika/451-interfejs-rs-485.html> (дата обращения: 11.10.18).

### CALCULATION OF CURRENT, VOLTAGE, POWER AND FREQUENCY OF NETWORK WILO BL 80/170-30/2 WITH FREQUENCY CONVERTER EMOTRON WITH THE HELP OF SOFTWARE COMPLEX OF MACHINE EDITION

I. A. Semina, I. S. Kozhmendina

Omsk State Technical University

The software package for calculating the current, voltage, power, frequency of the Wilo BL 80/170-30/2 network pump using the Emotron frequency converter" allows to increase the efficiency of the research and calculation of the parameters of the regulated electric drives: to reduce the means and time for removing the experimental characteristics, to observe a wide range of engine parameters for various types of control system settings.

Keywords: frequency converter, electric machines, automatic control systems, energy efficiency, energy saving.

## МНОГОСЛОЙНАЯ ГЕОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ – АДАПТИВНАЯ КОНЦЕПЦИЯ

В. И. Серкова

Ухтинский государственный технический университет  
[viserkova@mail.ru](mailto:viserkova@mail.ru)

Рассматривается многослойная геологическая модель – ее адаптивная концепция. Адаптивный метод геологического и гидродинамического моделирования является альтернативой традиционному детерминированному. Адаптивные модели учитывают, что геологические данные не идеальны и допускают отклонение.

Ключевые слова: геологическая модель, запасы нефти, выборка, дебит нефти, адаптивный метод, функция.

Построение реалистичных геологических моделей систем нефтяных пластов является необходимым условием для проектирования и реализации сценариев их разработки. В отличие от большинства традиционных подходов геологического моделирования, адаптивная концепция учитывает неопределенность и неполноту исходных данных.

Адаптивный метод геологического и гидродинамического моделирования является альтернативой традиционному детерминированному и используется в большинстве современных программ моделирования коллекторов.

Основное различие между детерминированными и адаптивными моделями таково, что первые никогда не меняют свой математический аппарат, а меняют входные данные так, что они будут соответствовать требованиям моделей.

Адаптивная геологическая модель содержит столько слоев, сколько можно выделить по результатам детальной корреляции, т.е. никакого ремасштабирования этой модели для ее превращения в гидродинамическую не требуется.

Обычно адаптивные модели состоят из 8-16 слоев со средней толщиной слоя от 5 до 10 м. «Механическая резка» толщины слоя вплоть до традиционных 0,4 м ничего не добавляет к информационному наполнению модели.

Адаптивные модели учитывают, что геологические данные не идеальны и допускают отклонение требований модели от этих данных, воспроизведение основных тенденций. В адаптивной геологической модели фактические и модельные разрезы скважин могут не совпадать друг с другом, потому что такая модель представляет собой своего рода усредненную «поверхность», проведенную таким образом, чтобы минимизировать ошибки до точек скважин.

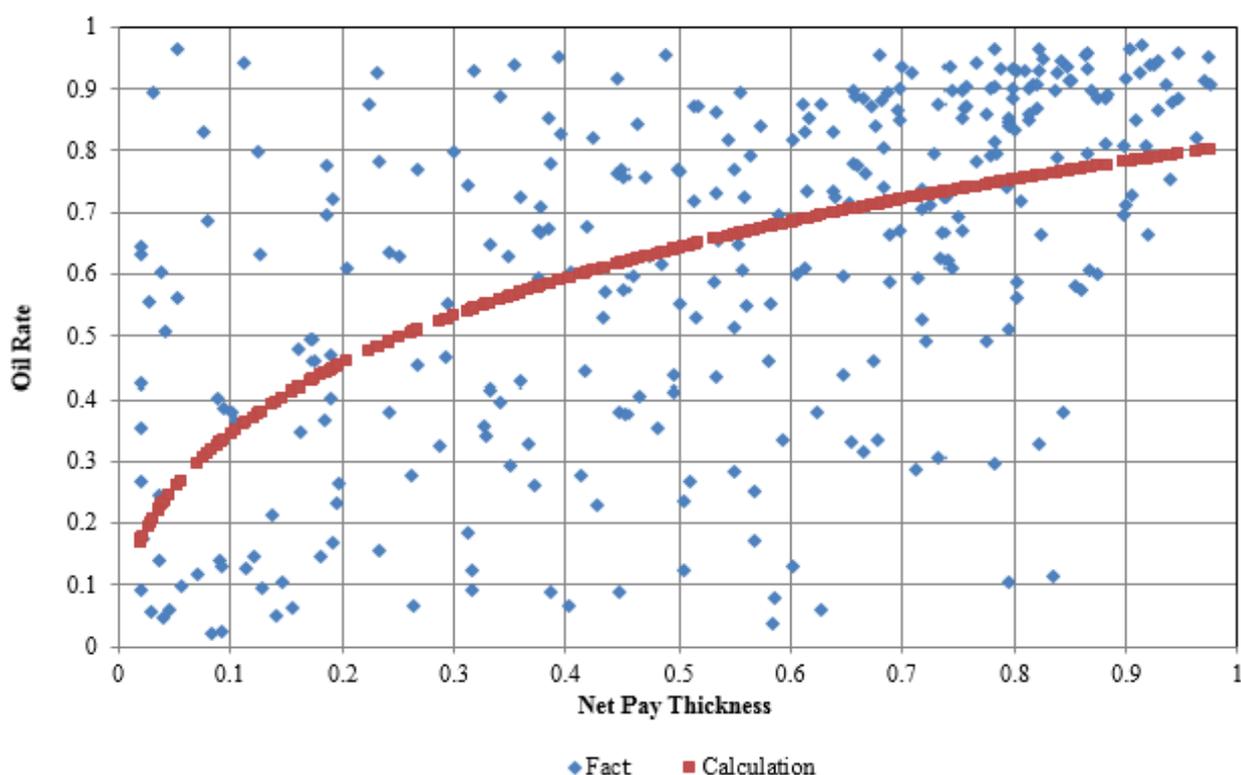
Адаптивный подход, не требуя минимальных невязок между фактическими параметрами и результатами моделирования, позволяет создать адекватные имеющемуся уровню достоверности входной информации, достаточно точные и приемлемые по трудозатратам цифровые геологические модели нефтегазовых объектов, которые учитывают наиболее значимые особенности их геологического строения.

## Математический аппарат адаптивной концепции

Для указания функции можно просто использовать два ряда чисел, в одной строке должен быть аргумент, а в другом – сама функция. Эти пары чисел могут быть получены из экспериментов или из наблюдения за процессом разработки нефтяных пластов.

Предположим, в качестве аргумента, толщину пласта в конкретной скважине и, как функция, ее средний уровень добычи нефти. Кроме того, таких пар чисел тысяча. После сортировки этого образца по значениям аргумента, один получает функцию, по которой можно рассчитать среднюю скорость добычи нефти в простейшем случае интерполяцией между двумя фактическими значениями этой функции.

Имея выборку из тысячи пар значений аргументов и функций, можно, конечно, рассчитать коэффициенты регрессии, например, кубический многочлен с четырьмя коэффициентами. Таким образом, получается только четыре числа из двух тысяч чисел, характеризующие очень сложную взаимосвязь толщины пласта и среднего уровня добычи нефти. Сократив две тысячи чисел до четырех, человек существенно теряет информацию и значительно упрощает суть явления.



Корреляция между усредненным уровнем по добычи нефти и нефтенасыщенной толщиной

Это представление функции и реализовано в предложенной адаптивной концепции, численная реализация которой не хранит коэффициентов регрессии, но исходные выборки пар чисел упорядочены по значению аргумента. Это, действительно, требует значительно больше памяти и замедляет процесс вычисления результатов. Можно предположить, что человеческий мозг вряд ли

будет хранить такие формулы, как синус или косинус, но скорее просто наборы связанных пар чисел, которые представляют собой представление реальности.

Если отсортировать выборку по аргументу (входному параметру), то можно быстро найти точку входа и каким-то образом вычислить значение функции (целевой параметр). Если речь идет о многопараметрической задаче, то необходимо хранить столько пар чисел, сколько входных параметров.

Когда выбран определенный слой, подразумевается, что он точно коррелирует по всей области модели, но это совершенно неправильно. Если он не может быть соотнесен с использованием логов, то такой слой не имеет оправдания. От правильности детальной корреляции зависит 95% качества любой геологической модели.

Согласно теореме Шеннона, ни одно математическое преобразование не может увеличить объем информации. Только затраты времени и энергии могут увеличить его. Это время и усилия специалиста, который делает детальную корреляцию и создает новую информацию, которой изначально не было в логах.

Эта информация является входными данными модели и тем самым повышает ее качество. Если в детальной корреляции нет затрат времени и энергии, то модель сводится к чистой формальности. Слой, выделенный по детальной корреляции, является отдельной геологической подсистемой с собственной исторической эволюцией, что отражается в распределении валовой и чистой заработной платы по толщинам и другим петрофизическим параметрам.

Поэтому в адаптивной концепции многослойная геологическая модель строится по принципу суперпозиции. Сначала геологические модели отдельных слоев строятся полностью независимо, а затем они суммируются в многослойную модель.

Исторически осадочное покрытие формируется последовательно слой за слоем в своей палеогеографической среде. Из-за этого принципиально неправильно применять любую 3D интерполяцию.

Когда многослойная модель строится в режиме слой за слоем, уникальность каждого слоя можно различить, избегая их усреднения. В адаптивной концепции не используются традиционные методы интерполяции.

Основой построения модели являются сейсмические данные – структурные поверхности отражающих горизонтов. Таких поверхностей должно быть не менее трех. У них есть все, что нужно.

Расстояния между ними показывают скорости осаднения, абсолютные отметки – структуру сечения, а степень кривизны – тектонические напряжения, влияющие на свойства проницаемых образований. Суть в том, что существует вектор сейсмических данных как на скважинах, так и в межскважинном пространстве, поэтому можно создать многопараметрическую нечеткую логическую функцию, с помощью которой из вектора можно получить любой геологический параметр.

В то же время такая функция не может быть единой для всей области модели, поэтому построена так называемая нечеткая сетка – сетка с шагом 200 - 300 м, узлы которой содержат локальные функции, связывающие геологический параметр с сейсмическими данными.

## Результаты адаптивного геологического моделирования

Построение геологической модели является наименее формализованным этапом в процессе геологического моделирования нефтяных месторождений. Здесь нельзя просто ввести исходные данные и запустить программное обеспечение. Процесс должен быть итеративным, в котором расчет модели показывает противоречия в исходных данных, они корректируются, и модель снова пересчитывается. Дело в том, что нет другого способа проверить исходные геологические данные, только когда будет построена геологическая модель.

Для создания адаптивной геологической модели каждого слоя используются нечетко-логические функции, описывающие зависимости между параметрами скважин и сейсмическими данными. Из-за невозможности подобрать одну функцию для всего объекта формируется поле нечетко-логических функций (fuzzy-грид), которое позволяет более гибко моделировать геологическое строение объекта и его свойства. Адаптивная геологическая модель является многослойной, но имеет значительно меньше слоев, чем в детерминированных геологических моделях, где принято «разрезать» слои при толщине порядка 0,4 м. Из-за этого детерминированная геологическая модель может содержать сотни, а иногда и более тысячи слоев. Предложенная концепция адаптивного геологического моделирования не упрощена, она сложна. Самое главное, что концепция адаптивного геологического моделирования дает более значимые результаты.

Она подходит для любого типа резервуаров, включая нетрадиционные, такие как естественно трещиноватые карбонаты, тяжелая нефть, сланцевая нефть и сланцевый газ.

Благодаря математическому аппарату, основанному на нечетко-логических функциях, способных самонастраиваться с учетом конкретных исходных данных, адаптивный подход является эффективным инструментом оперативного прогнозирования геологических параметров для решения различных задач подсчета запасов и сопровождения разработки нефтегазовых объектов.

### Литература

1. Тараскин Е. Н., Захарян А. З., С. Урсегов С. О. и др. Новый адаптивный подход к геолого-гидродинамическому моделированию нефтяных пластов с длительной историей добычи // Нефтяное хозяйство. – 2017. – № 6. – С. 78-83.
2. Урсегов С. О., Тараскин Е. Н. SPE 190428. Проблемы теплотехнических характеристик и перспективы крупнейшее в России карбонатное месторождение с тяжелой нефтью // Материалы конференции SPE EOR на нефть и газ Западная Азия 2018, Маскат, Оман, 25 – 28 марта 2018.

## A LAYERED GEOLOGICAL MODEL – ADAPTIVE CONCEPT

V. I. Serkova

Ukhta State Technical University

The adaptive concept of multilayer geological model is considered. The adaptive method of geological and hydrodynamic modeling is an alternative to the traditional deterministic one. Adaptive models take into account that geological data are not ideal and allow for deviation.

Keywords: neural networks, intelligent systems, model, oil, training sample, oil production rate, reservoir model, well.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОМАГНИЧИВАНИЯ НЕФТИ НА ЕЕ РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Ю. Г. Смирнов<sup>1</sup>, И. С. Баткин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ухтинский государственный технический университет  
[ysmirnov@ugtu.net](mailto:ysmirnov@ugtu.net)

<sup>2</sup>University of Ottawa, Ontario, Canada  
[ybatkin@rogers.com](mailto:ybatkin@rogers.com)

Выполнен теоретический анализ и численное моделирование процесса омагничивания и вытеснения капель водонефтяной эмульсии, содержащей примесь наночастиц сульфида железа, к стенке трубы под влиянием градиента магнитного поля. Показано, что данный процесс может способствовать некоторому повышению скорости течения нефти.

Ключевые слова: водонефтяная эмульсия, наночастицы сульфида железа, омагничивание, повышение текучести нефти.

### Введение

Количество воды в добываемой нефти изменяется в широких пределах. Содержание воды в нефтях, добываемых на старых месторождениях, может достигать до 90 – 98 %. Вода вместе с нефтью образует высоковязкие эмульсии. Пластовая вода, содержащаяся в нефти, представляет собой растворы солей, в частности сульфида железа FeS. Количество сульфида железа, который образуется при смешивании обводненных сероводородсодержащих и железосодержащих потоков, определяется концентрацией сероводорода и ионов железа, процентом обводненности эмульсий, а также величиной рН смеси вод. Заметный вклад в образование сульфида железа вносят также коррозионные процессы, протекающие в нефтепромысловом оборудовании при участии высокосернистой нефти [1].

Конкретные данные по содержанию FeS в нефтях одного из месторождений, в которых значения концентраций сульфида железа варьировались от средних: 100-150 мг/дм<sup>3</sup> до экстремально высоких: 7169 мг/дм<sup>3</sup> приведены в работе [1]. Исследование состава нефтей Усинского и Возейского месторождений республики Коми в резервуарах-отстойниках [2] также свидетельствует о наличии заметных концентраций сульфида железа FeS. Отмечено, что сульфид железа закономерно концентрируется в промежуточном слое, содержащем водонефтяные эмульсии.

Экспериментально установлено, что магнитная обработка нефти способствует снижению ее вязкости [3-4], что может быть обусловлено наличием железосодержащих примесей солей, на которые действует магнитное поле.

Целью настоящей работы является математическое и компьютерное моделирование процесса влияния омагничивания водонефтяной эмульсии на реологические свойства нефти.

## Математическая модель

Для перекачки по магистральным нефтепроводам принимают нефть, содержащую не более 0,5–1,0 % воды. Минерализованная вода содержится внутри глобул водонефтяной эмульсии. Будем считать, что в составе солей имеется примесь сульфида железа FeS, которая способна намагничиваться во внешнем магнитном поле. Наночастицы FeS практически нерастворимы в воде. Положим, что они равномерно распределены в объеме эмульсионных глобул.

Будем также считать, что эмульсия нефти в воде заключена в некотором резервуаре, к которому приложено внешнее магнитное поле  $\vec{H}(\vec{r})$ . Из-за имеющейся концентрации магнитных частиц в этом объеме возникнет магнитная индукция

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H},$$

где  $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$  Гн/м – проницаемость вакуума. Индуцированный магнитный момент  $\vec{m}_d$  эмульсионной капли определяется соотношением

$$\vec{m}_d = V_d M_d L(z) \frac{\vec{B}}{B}, \quad (1)$$

где  $V_d$  – ее магнитный объем,  $M_d$  – намагниченность насыщения,  $B$  – величина модуля вектора индукции,  $L(z)$  – функция Ланжевена

$$L(z) = \text{cth}(z) - 1/z$$

и

$$z = \frac{V_d M_d B}{kT}.$$

Здесь  $k$  – постоянная Больцмана, а  $T$  – абсолютная температура.

С другой стороны, очевидно, что магнитный момент капли эмульсии складывается из суммы магнитных моментов магнитных наночастиц, содержащихся внутри эмульсионной капли.

Под воздействием градиента магнитного поля эмульсионные капли будут двигаться в направлении возрастания поля к границе раздела двух фаз, где будут скапливаться и коалесцировать. Через некоторое время на поверхности нефти образуется водяная пленка. Именно она, на наш взгляд, и способствует повышению текучести нефти.

Намагниченность  $\vec{M}$  эмульсионной капли, объема  $V_d$ , содержащей наночастицы FeS, обусловленная внешним магнитным полем  $\vec{H}$ , пропорциональна магнитной восприимчивости  $\chi$ :

$$\vec{M} = \chi \vec{H}.$$

Сила, действующая на намагниченную каплю эмульсии, равна

$$\vec{F}_d = \phi \mu_0 V_d (\vec{M}_d \nabla) \vec{H}. \quad (2)$$

Приравнивая указанную силу силе Стокса

$$\vec{F}_a = 6\pi \eta_d R_d \vec{v}_d,$$

можем вычислить скорость движения капелек эмульсии, обусловленную магнитными силами

$$\vec{v}_d = \frac{2\varphi\mu_0 R_d^2 (\vec{M}_d \vec{\nabla}) \vec{H}}{9\eta_d}, \quad (3)$$

где  $\eta_d$  – коэффициент вязкости эмульсии.

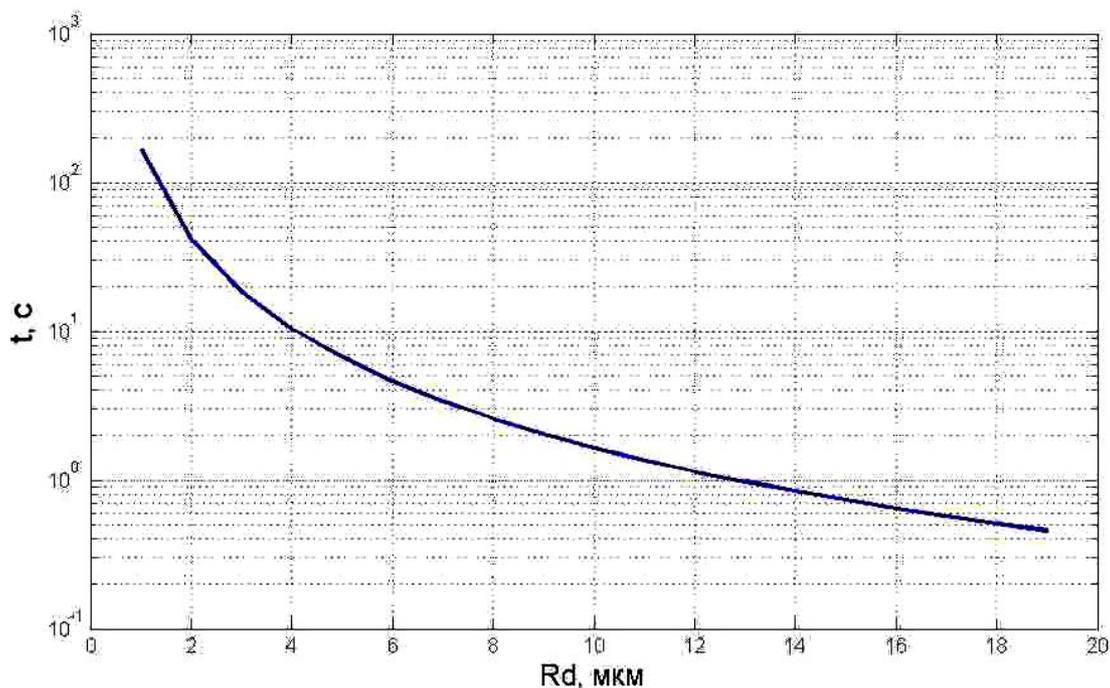
Будем считать, что для омагничивания нефть пропускается через трубу диаметром  $D = 2,2$  см, продетую через кольцевой неодимовый магнит с внутренним диаметром 2,5 см, внутри которого создается поле 0,7 Тл [5], направленное вертикально вниз поперек трубы.

В таком сильном поле наночастицы FeS являются намагниченными до насыщения. Таким образом, в данной геометрии максимальное расстояние, которое должны преодолеть эмульсионные капли под влиянием градиента магнитного поля, практически равно диаметру трубы. При этом градиент магнитного поля составляет примерно 30 Тл/м. Оценим время, необходимое для смещения капель водонефтяной эмульсии к стенке трубы:

$$t_d = \int_0^D \frac{dz}{2v_d(z)} \quad (4)$$

Для численной оценки времени смещения по вышеприведенным формулам примем  $\eta_d \sim 10^{-3}$  Па·с,  $R_d = 1-20$  мк,  $M_d = 2 \cdot 10^4$  А/м. Для расчетов примем значение магнитной восприимчивости  $\chi = 1074 \cdot 10^{-6}$  см<sup>3</sup>/моль, а содержание FeS будем считать равным 500 мг/дм<sup>3</sup>, что, очевидно, соответствует относительной весовой концентрации  $\varphi = 5 \cdot 10^{-4}$ .

Численное моделирование выполнялось в рамках пакета MatLab. Результаты моделирования приведены на рисунке.



Результаты моделирования времени смещения эмульсионных капель к стенке трубы в зависимости от размеров капли

## Заключение

Подводя итоги, можно сделать следующее заключение. Результаты численного моделирования показывают, что в выбранной модели уже через 20 секунд водонефтяные эмульсионные капли с размерами более 6 мкм достигнут стенки трубы. Что касается более мелких эмульсионных капель, то, как показано в наших предыдущих работах [6, 7], в магнитном поле крупные намагниченные капли в процессе движения будут активно захватывать более мелкие намагниченные капли и укрупняться, что будет способствовать интенсивному смещению водонефтяных эмульсионных капель к стенке трубы, где они могут образовать тонкую водяную пленку. Эта пленка выступает в качестве своеобразной «смазки», способствующей улучшению реологических свойств омагниченной нефти, что, в свою очередь, приведет к повышению скорости движения нефтяного потока.

Следует отметить, что необходимым условием реализации описанного механизма является обязательное наличие способных намагничиваться примесей, в частности, наночастиц FeS, и достаточного градиента магнитного поля.

## Литература

1. Абдрахманова Л.М. Причины и способы снижения высокой концентрации сульфида железа в продукции скважин. Url: [http://www.tatnipi.ru/upload/sms/2014/tnp\\_eng/001r.pdf](http://www.tatnipi.ru/upload/sms/2014/tnp_eng/001r.pdf)
2. Ланина, Т. Д. Процессы переработки пластовых вод месторождений углеводородов: монография / Т. Д. Ланина, В. И. Литвиненко, Б. Г. Варфоломеев. Ухта: УГТУ, 2006. – 172 с.
3. Лесин В. И. Особенности релаксации вязкости неньютоновской нефти после воздействия градиентами скорости и магнитными полями // Нефтепромысловое дело, №1, 2008. – С.43-46.
4. Лоскутова Ю. В., Юдина Н. В. Влияние постоянного магнитного поля на реологические свойства высокопарафинистых нефтей // Коллоидный журнал, Т.65, №4, 2003. – С.510-515.
5. Лютоев А. А., Смирнов Ю. Г. Проект системы магнитной очистки пластовых вод от нефтяных загрязнений // Проблемы геологии, разработки и эксплуатации месторождений высоковязких нефтей и битумов: матер. межрегиональн. научно-техн. конф. Ухта, УГТУ, 2016. – С. 138-141.
6. Баткин И. С., Смирнов Ю. Г. Моделирование процесса управления очисткой промышленных вод от нефти с использованием гетерогенной системы магнитных частиц // Системы управления и информационные технологии, №4.1(50), 2012. – С. 179-182.
7. Смирнов Ю. Г., Баткин И. С. Теоретический анализ процесса воздействия суперпарамагнитных частиц на промысловые эмульсии // Системы управления и информационные технологии, №2.2(48), 2012. – С. 233-236.

## MODELING OF THE INFLUENCE OF OIL MAGNETIZATION ON ITS RHEOLOGICAL PROPERTIES

Yu. G. Smirnov<sup>1</sup>, I. S. Batkin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ukhta State Technical University

<sup>2</sup>University of Ottawa, Ontario, Canada

A theoretical analysis and numerical simulation of the process of magnetization and displacement of droplets of water-oil emulsion containing an admixture of iron sulphide nanoparticles to the pipe wall under the influence of a magnetic field gradient was performed. It is shown that this process can contribute to a certain increase in the speed of the flow of oil.

Keywords: water-oil emulsion, iron sulphide nanoparticles, magnetization, increase of oil flow.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЖИМА РАБОТЫ КАССЕТЫ МАГНИТНОГО СЕПАРАТОРА

А. А. Лютоев, Ю. Г. Смирнов

Ухтинский государственный технический университет  
[allutoev@yandex.ru](mailto:allutoev@yandex.ru), [ysmirnov@ugtu.net](mailto:ysmirnov@ugtu.net)

Рассмотрены конструктивные особенности магнитного сепаратора, предназначенного для извлечения из пластовой воды капель водонефтяной эмульсии. Выполнено численное моделирование режима работы кассеты магнитного сепаратора, позволившие оптимизировать его конструкцию. Рассмотрена модель извлечения капель водонефтяной эмульсии из воды и на ее основе выполнен расчет производительности магнитного сепаратора.

Ключевые слова: моделирование, кассета, магнитный сепаратор, наночастицы магнетита, разрушение водонефтяной эмульсии.

### **Введение**

В работах [1, 2] рассматривается возможность доочистки пластовой воды от эмульгированных нефтепродуктов с применением высокодисперсных магнитных частиц магнетита и неоднородного магнитного поля. Известен зарубежный опыт [3, 4] по разрушению водонефтяной эмульсии с помощью высокодисперсных ферромагнитных частиц.

В работе [3] было установлено, что среди параметров, влияющим на сорбционную способность, значимым является размер частиц сорбтива. В этой же работе также было показано, что твердые частицы размерами меньше микрона способны стабилизировать эмульсии различного типа (вода в нефти или нефть в воде).

В работе [4] магнитные частицы использовались для обезвоживания нефти. Идея заключается в том, что наночастицы магнетита «стараются» занять место в пограничном слое нефти и воды. Путем агрегации на поверхности эмульсионной капли, частицы придают ей магнитный момент в магнитном поле.

Целью настоящей работы является выполнение численного моделирования для оптимизации конструктивных особенностей разрабатываемого магнитного сепаратора, предназначенного для извлечения из пластовой воды капель водонефтяной эмульсии, обладающих слабым магнитным моментом.

### **Конструкция магнитного сепаратора**

Предлагается конструкция магнитного сепаратора с продольным расположением стержней относительно потока жидкости (рис. 1). Такая конструкция существенно упрощает обслуживание сепаратора.

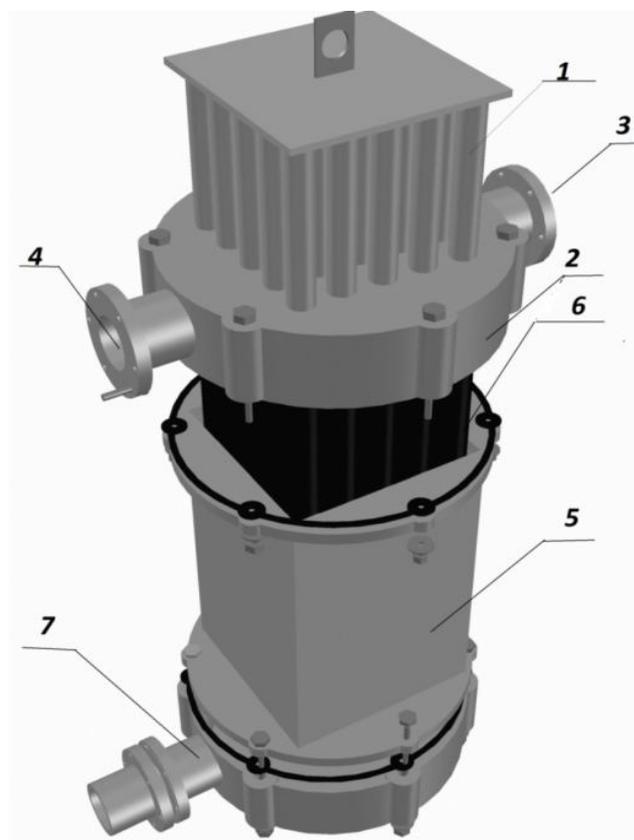


Рис. 1. Магнитный сепаратор НМС-2

Магнитный сепаратор состоит из единой подвижной кассеты *1* из магнитов NdFeB, располагающейся в верхней части немагнитного корпуса *2*, выполненного из прочного пластика. Внутри корпуса *2* находится два выходных отверстия: *3* в режиме очистки, *4* в режиме промывки.

Основная часть корпуса *5* изготовлена из прочного пластика, внутри нее происходит коалесценция эмульсионных капель. Вместе с верхним корпусом единую конструкцию составляют чехлы *6* для стержней, внутри которых находятся магниты NdFeB.

На поверхности цилиндрического чехла собираются капли нефти. Нижняя часть корпуса *7* изготовлена из прочного пластика с одним входным отверстием. Внутри него поток жидкости равномерно направляется в область магнитов.

### **Моделирование конструктивных особенностей устройства**

Необходимо определить оптимальное расположение стержней в картридже, кроме того рассчитать производительность самого устройства. Рассмотрим несколько наиболее удачных вариантов расположения стержней в кассете (рис. 2). В рассматриваемых моделях толщина стержней составляла 10 мм. Расстояние между поверхностями стержней, стоящих в одном ряду, 10 мм. Изменялись лишь полюса магнитов.

Средний линейный градиент для каждого случая составил около 75 Тл/м. Среди четырех рассматриваемых вариантов, расположение полюсов магнитов,

представленных на рис. 2б, имеет преимущество перед остальными из-за того, что в рабочей области наблюдается индукция магнитного поля больше 0,12 Тл. У остальных наблюдаются значительные провалы индукции меньше 0,12 Тл.

Таким образом, численное моделирование позволило выбрать оптимальное расположение полюсов магнитов в картридже магнитного сепаратора (рис. 2б).

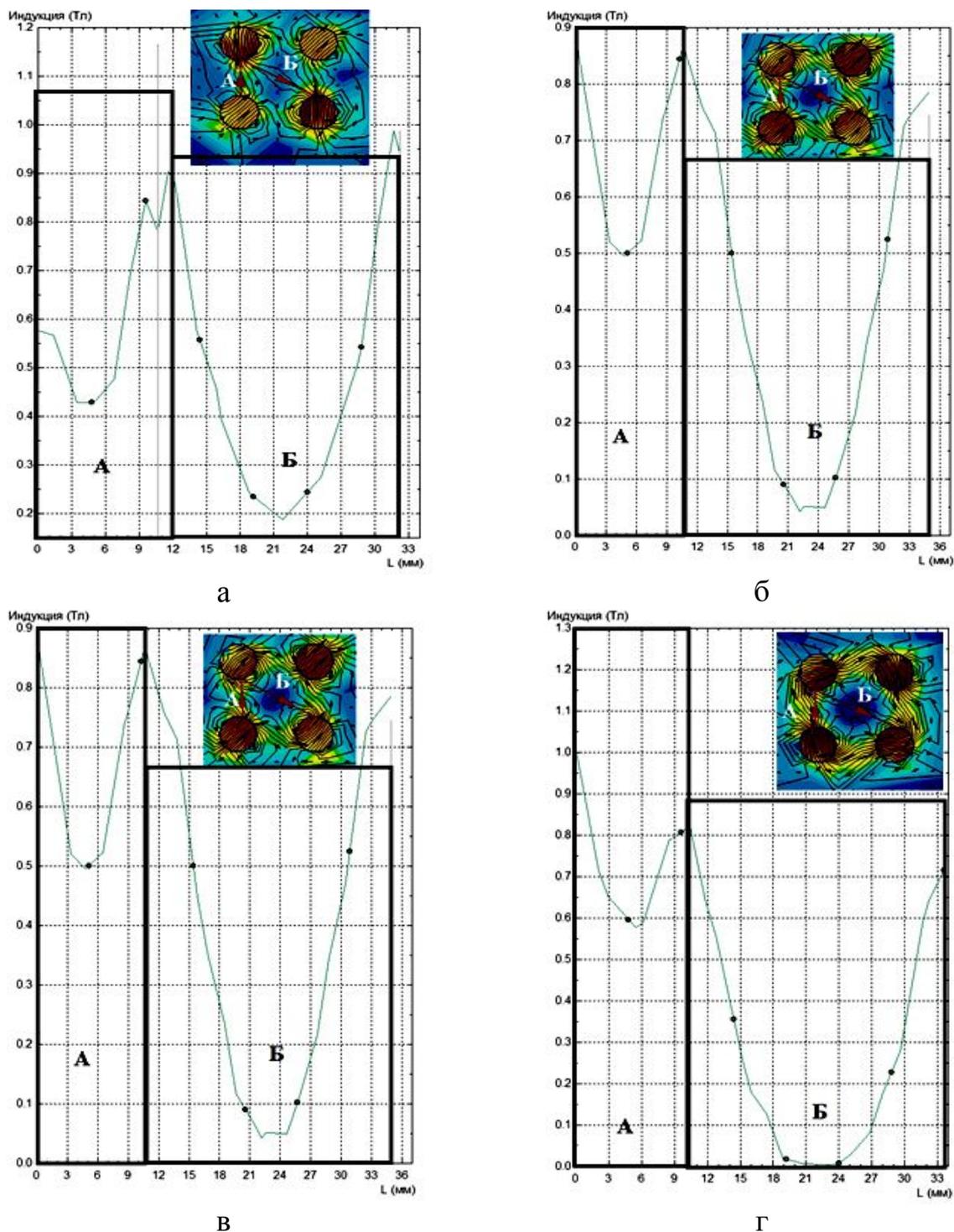


Рис. 2. Результаты расчета магнитного поля для стержней толщиной 10 мм: а – направление вектора индукции магнитного поля  $\vec{B}$   $90^0 - 90^0$ ; б – направление  $\vec{B}$   $90^0 - 45^0$ ; в – направление  $\vec{B}$   $45^0 - 45^0$ ; г – направление  $\vec{B}$  круговое

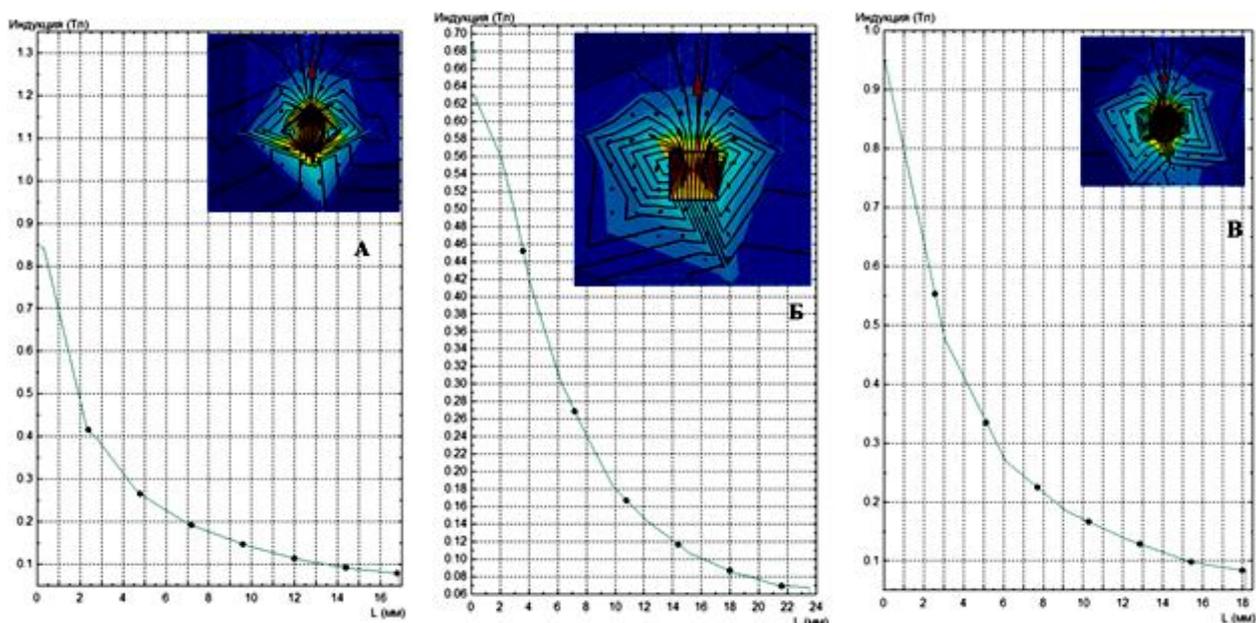


Рис. 3. Индукция магнитов NdFeB: А) вектор индукции направлен вдоль диагонали квадрата (сторона  $a=10$  мм), Б) вектор индукции направлен вдоль стороны квадрата (сторона  $a=10$  мм), В) для круглого стержня диаметром 11.2 мм

Далее проводилось моделирование индукции магнитного поля стержней магнитного картриджа квадратной и круглой формы сечения. Результаты приведены на рис. 3. Оказалось, что наибольший градиент наблюдается у круглого стержня.

### Расчет производительности магнитного сепаратора

Рассмотрим модель извлечения омагниченной эмульсионной капли между стержнями в ферромагнитном картридже, которая изображена на рис. 4а. Эмульсионная капля нефти движется в потоке между ферромагнитными стержнями толщиной  $t$  и длиной  $L$ . Расстояние между стержнями равно  $d$ .

Скорость потока жидкости в магнитном сепараторе устанавливается из расчета скорости движения омагниченной нефтяной капли в магнитном поле  $v_{em}$ . На рис. 4б изображено расположение стержней картриджа в поперечном сечении.

Скорость движения намагниченной капли нефти в неоднородном магнитном поле может быть оценена по следующей формуле [5]:

$$v_{em}(x) = \frac{2kd_{em}d_p M_{sat} L(z_c)}{9\eta} \left| \frac{dB}{dx} \right|, \text{ (м/с)} \quad (1)$$

где  $\eta = 0,89 \cdot 10^{-3}$  Па·с – динамическая вязкость воды, намагниченность магнетита при насыщении  $M_{sat} = 4,78 \cdot 10^5$  А/м,  $dB/dx$  – градиент магнитного поля (Тл/м),  $L(z)$  – функция Ланжевена (намагничивание суперпарамагнетиков),  $k$  – коэффициент упаковки наночастиц магнетита на поверхности капли нефти.

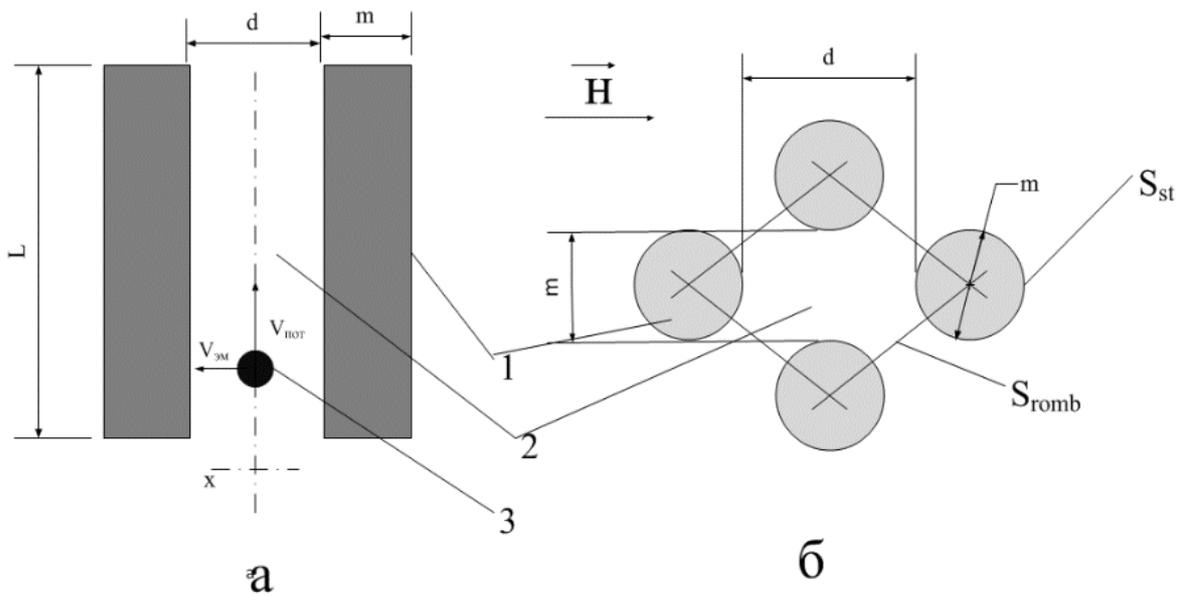


Рис. 4. Модель извлечения омагниченной нефтяной капли в НМС-2: а) модель движения капли в магнитном поле, б) поперечное сечение рабочей зоны магнитного сепаратора. 1 – ферромагнитные стержни, 2 – рабочая зона между стержнями, 3 – омагниченная эмульсия нефти

По формуле (1) контролируемые параметрами для магнитного сепаратора являются градиент и напряженность магнитного поля. Магнитное насыщение для нанодисперсного магнетита происходит при напряженности магнитного поля 100 кА/м, поэтому большее значение напряженности магнитного поля не влияет на скорость движения частиц. В то же время градиент магнитного поля является управляемым параметром, с помощью которого можно изменять скорость, а, соответственно, и производительность магнитного сепаратора.

Время осаждения намагниченных эмульсионных капель на поверхности стальных стержней может быть оценено по следующей формуле:

$$T = \int_0^d \frac{dX}{2v(x)} \quad (2)$$

Зная время  $T$  и длину магнитного стержня  $L$ , можно определить оптимальную скорость потока очищаемой жидкости в зависимости от размеров эмульсионных капель:

$$v_{opt} \leq \frac{L}{T} \quad (\text{м/с}). \quad (3)$$

Производительность магнитного сепаратора определяется с учетом его рабочей площади  $S_r$  в поперечном сечений кассеты. Объем очищаемой воды:

$$Q = v_{opt} S_r \quad (\text{м}^3/\text{с}). \quad (4)$$

Рабочая площадь в квадратном сечении магнитного сепаратора со стороной  $a$ :

$$S_r = \varphi \cdot a^2, \text{ (м}^2\text{)}, \quad (5)$$

где  $\varphi$  – коэффициент рабочей зоны магнитной кассеты в ромбовидной области между стержнями толщиной  $m$  и длиной  $L$ , находящимися на расстоянии  $d$  друг от друга.

Коэффициент рабочей зоны определяется соотношением:

$$\varphi = \frac{S_{romb} - S_{st}}{S_{romb}} = \frac{(m + d) - \pi m / 4}{(m + d)}, \quad (6)$$

Здесь  $S_{romb}$  – площадь выделенной области,  $S_{st}$  – площадь сечения стержня.

С учетом вышеприведенных формул, производительность магнитного сепаратора будет определяться следующей формулой,

$$Q = \frac{4S_r L k d_{em} d_p M_{sat} L(z_p)}{9\eta d} \left| \frac{dB}{dx} \right| \text{ (м}^3\text{/с)}, \quad (7)$$

где  $\eta = 0,89 \cdot 10^{-3}$  Па·с – динамическая вязкость воды,  $M_{sat} = 4,78 \cdot 10^5$  А/м – намагниченность магнетита при насыщении,  $dB/dx$  – градиент магнитного поля, (Тл/м),  $L(z)$  – функция Ланжевена (намагничивание суперпарамагнетиков),  $k$  – коэффициент упаковки наночастиц магнетита на поверхности капли нефти.

Результаты расчета производительности магнитного сепаратора по формуле (7) при условии  $a = 0,5$ , м;  $L = 0,5$  м;  $d_p = 10^{-8}$  нм,  $d_{em} = 10^{-6}$  м представлены в нижеприведенной таблице.

#### Расчет производительности магнитного сепаратора НМС-2

( $L = 0,5$  м;  $d_p = 10^{-8}$  нм;  $d_{em} = 10^{-6}$  м)

Толщина стержня NdFeB, $m \cdot 10^{-3}$ , м	Расстояние между стержнями, $d \cdot 10^{-3}$ , м	Усредненный градиент магнитного поля, Тл/м	Скорость потока в магнитном сепараторе, $v$ , м/с	Производительность сепаратора, $Q$ , м <sup>3</sup> /ч
5	5	560	0,062	9,59
10	10	240	0,014	2,21
	20	80	0,002	0,45
20	10	264	0,015	1,91
	20	130	0,004	0,59
	40	50	0,001	0,14

#### Заключение

Таким образом, выполнено численное моделирование, позволившее выбрать оптимальные конструктивные особенности кассеты магнитного сепара-

тора, предназначенного для извлечения из пластовой воды капель водонефтяной эмульсии.

Кроме того, рассмотрена модель извлечения омагниченных нефтяных капель из пластовой воды в процессе ее очистки и на ее основе выполнен расчет производительности предлагаемого магнитного сепаратора.

#### Литература

1. Цхадая Н. Д., Быков И. Ю., Чупров И. Ф., Ланина Т. Д., Смирнов Ю. Г., Лютоев А. А. Обоснование параметров конструкции неодимового магнитного сепаратора для очистки пластовых вод // Нефтяное хозяйство. – 2017. – № 8. – С. 112-115.

2. Лютоев А. А., Смирнов Ю. Г., Ивенина И. В. Извлечение эмульгированных примесей нефти из воды при помощи высокодисперсных частиц магнетита // Защита окружающей среды в нефтегазовом комплексе. – 2014. - № 4. – С. 40-45.

3. Sullivan Andrew P. and Kilpatrick Peter K. The Effect of Inorganic Solid Particles on Water and Crude Oil Emulsion Stability // Ind. Eng. Chem. Res. 2002. V. 41. P. 3389-3404.

4. Oder R. R. Emulsions breaking with magnetic fields // American Filtration Society, 18th Annual Conference. – Atlanta, 2005, April 10-13. – 25 p. URL: [http://www.magneticseparation.com/UserFiles/File/AFS\\_2005.pdf](http://www.magneticseparation.com/UserFiles/File/AFS_2005.pdf).

5. Лютоев А. А., Смирнов Ю. Г. Моделирование работы ферромагнитного разделителя для очистки пластовых вод от нефтяных загрязнений // Физико-математическое моделирование систем: материалы XI Междунар. семинара. Воронеж: ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный технический университет», 2014. Ч. 2. – С. 77-84.

## MODELING OF THE OPERATION MODE OF A MAGNETIC SEPARATOR CASSETTE

A. A. Lyutoev, Yu. G. Smirnov

Ukhta State Technical University

The design features of a magnetic separator designed to extract oil-water emulsions from formation water are considered. A numerical simulation of the operating mode of the magnetic separator cassette was performed, which allowed optimizing its design. A model for extracting droplets of a water-oil emulsion from water is considered and the performance of a magnetic separator is calculated on its basis.

Keywords: modeling, magnetic separator, cassette, magnetite nanoparticles, destruction of oil-water emulsion.

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕРАБОТКИ ПРОДУКТОВ АЛКИЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОДОЛЖИТЕЛЬНОСТИ МЕЖПРОМЫВОЧНЫХ ЦИКЛОВ

А. А. Солопова, М. А. Пасюкова, И. О. Долганова, И. М. Долганов, А. А. Бунаев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
[anastasiasolopova@ro.ru](mailto:anastasiasolopova@ro.ru), [maria.pasyukova11@gmail.com](mailto:maria.pasyukova11@gmail.com)

Цель работы – создание компьютерной моделирующей системы процесса переработки линейных алкилбензолов (ЛАБ) для прогнозирования длительности межпромывочного цикла по динамике накопления высоковязкого компонента. Из результатов работы следует, что разработанная модель адекватна, и может использоваться для прогнозного расчета длительности межпромывочного цикла в реакторе сульфирования по накопленному высоковязкому компоненту. При расчетах использовались данные с действующей установки сульфирования.

Ключевые слова: алкилбензолсульфоуксусная кислота, высоковязкий компонент, сульфирование, математическое моделирование.

Синтетические моющие средства (СМС) производятся из линейных алкилбензолсульфонатов (ЛАБС) – алкилароматических химических соединений с предельной линейной углеводородной цепью, состоящей из 10-13 атомов углерода с одной или несколькими сульфогруппами, получаемых путем сульфирования АБСК.

Получение ЛАБС, которые являются основными компонентами производства СМС проходит в несколько этапов:

1. Дегидрирование предельных углеводородов на платиновом катализаторе с получением олефинов.
2. Алкилирование бензола олефиновыми углеводородами с получением линейных алкилбензолов (ЛАБ). Процесс проходит на HF-катализаторе.
3. Сульфирование ЛАБ с получением целевого продукта – АБСК [1].

Так как потребление СМС, производимых на основе ПАВ ежегодно возрастает, усиливаются требования к технологии производства компонентов с точки зрения качества и экономической выгоды [2].

Во избежание снижения качества продукта и повышения экономической эффективности процесса, необходимо отслеживать образование вязкого компонента. При его накоплении нарушается равномерность течения пленки ЛАБ и замедляется диффузия молекул  $SO_3$ , как следствие, процесс протекает недостаточно полно, показатели качества продукта ухудшаются [3, 4].

Целью данной работы является создание компьютерной моделирующей системы процесса сульфирования ЛАБ для прогнозирования длительности межпромывочного цикла по динамике накопления высоковязкого компонента. Процесс протекает в многотрубном пленочном реакторе. При создании модели принято допущение о режиме идеального вытеснения.

Эффективные константы скоростей химических реакций были определены при решении обратной кинетической задачи (см. таблицу).

#### Эффективные константы скоростей ключевых химических реакций

№	Реакция	$k_{эфф}$
1	ЛАБ + SO <sub>3</sub> → АБСК	2,26
2	ЛАБ + АБСК → сульфон + H <sub>2</sub> O	0,09
3	АБСК + SO <sub>3</sub> → АнгАБСК + H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	$3,87 \cdot 10^{-4}$
4	сульфон → вязкий компонент	$8,34 \cdot 10^{-5}$

Расчеты производились на разработанной компьютерной модели по данным с действующей установки сульфирования ЛАБ, результаты которых представлены на рис. 1-3. В результате получена динамика изменения массовой доли ключевых компонентов процесса, таких как АБСК, несulfурированный остаток и серная кислота.

Расчетные зависимости коррелируют с экспериментальными данными, из чего следует, что модель адекватна и может применяться для исследования основных параметров процесса.

В настоящее время необходимость промывки реактора определяется величиной давления в нем, которое зависит от количества высоковязкого компонента [5]. На практике данный способ не позволяет достичь максимальной эффективности процесса и связан с риском образования некондиционного продукта.

Использование компьютерной моделирующей системы позволяет делать прогнозы о длительности межпромывочного цикла по концентрации высоковязкого компонента.

Результаты расчета накопления высоковязкого компонента в течение одного межпромывочного цикла представлены на рис. 4.

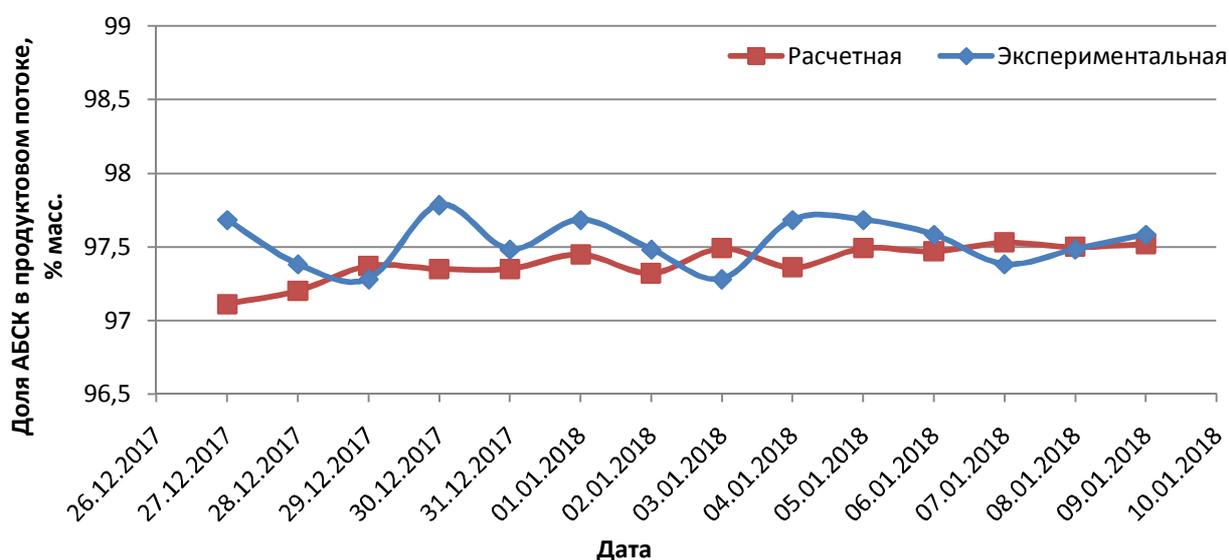


Рис. 1. Динамика изменения экспериментальных и расчётных долей АБСК

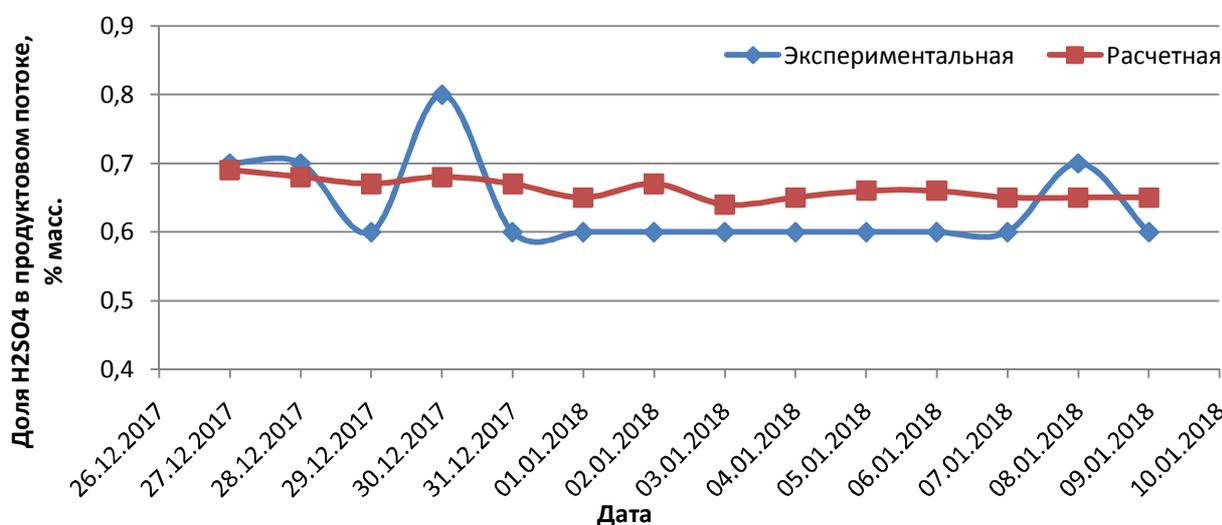


Рис. 2. Динамика изменения экспериментальных и расчётных долей серной кислоты

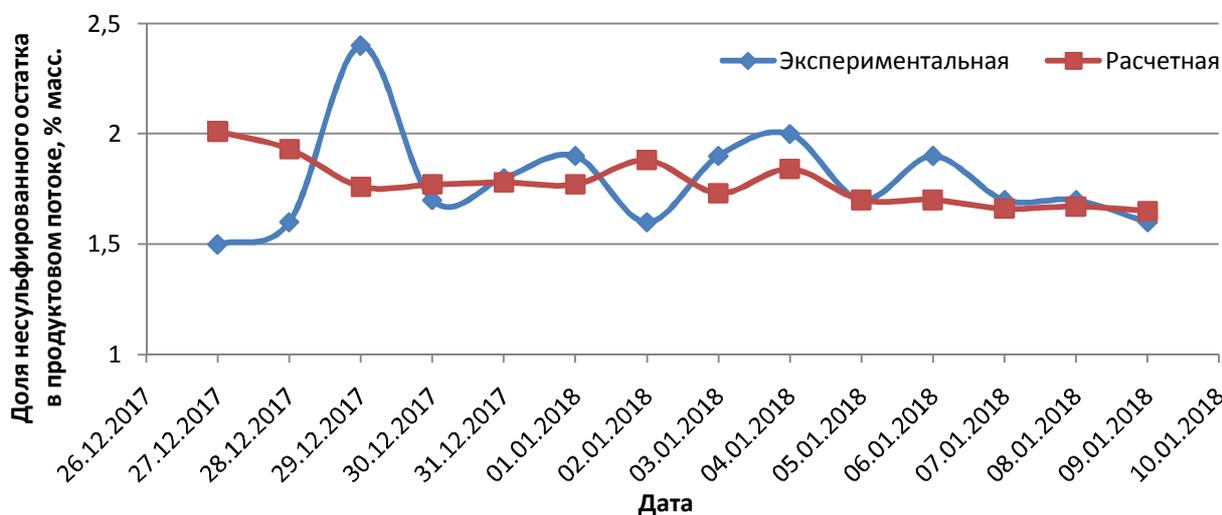


Рис. 3. Динамика изменения экспериментальных и расчётных долей несulfурированного остатка

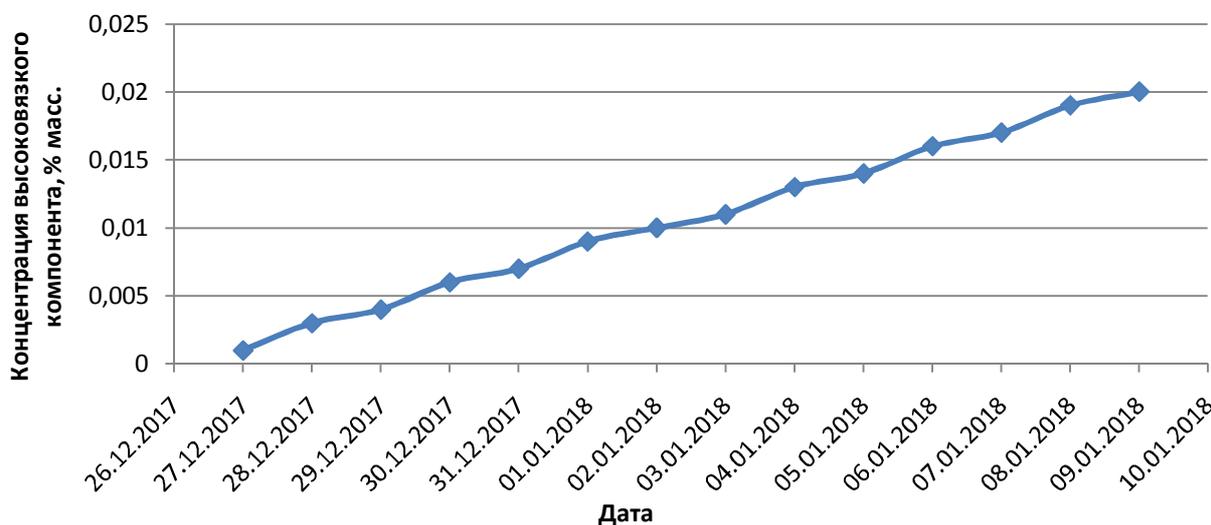


Рис. 4. Динамика накопления высоковязкого компонента в течение одного межпромывочного цикла

Сделаны выводы об адекватности модели на основании корреляции экспериментальных и расчетных зависимостей изменения концентраций ключевых компонентов и возможности ее использования для прогнозирования длительности межпромывочного цикла реактора.

Работа выполнена в рамках государственного задания №10.13268.2018/8.9.

#### Литература

1. Баннов, П. Г. Процессы переработки нефти. / П. Г. Баннов. – М.: ЦНИИТЭнефтехим. - 2001. – 625 с.
2. Dolganova I. O., Dolganov I. M., Ivanchina E. D., Ivashkina E. N. Alkylaromatics in Detergents Manufacture: Modeling and Optimizing Linear Alkylbenzene Sulfonation / Journal of Surfactants and Detergents. - 2018 - Vol. 21 - №. 1. - P. 175-184.
3. Ивашкина Е. Н., Иванчина Э. Д., Францина Е. В., Долганова (Шнидорова) И. О., Платонов В. В. Повышение ресурсоэффективности многостадийных процессов углублённой переработки углеводородов с использованием метода математического моделирования // Нефтепереработка и нефтехимия. - 2013 - №. 10. - С. 10-14.
4. Dolganova I. O., Dolganov I. M., Vasyuchka K. A. Formation of highly viscous component in linear alkylbenzenes sulphonation reactor and its effect on product quality [Electronic resources] // Petroleum and Coal. - 2016 - Vol. 58 - №. 2. - P. 247-252.
5. Dolganova I. O. , Ivashkina E. N. , Ivanchina E. D., Vasyuchka K. A. Stability of alkylation and sulphonation units joint work in alkylbenzene sulphuric acid manufacturing [Electronic resources] // Petroleum and Coal. - 2016 - Vol. 58 - №. 2. - P. 135-142.

## SIMULATION OF ALKYLATION PRODUCTS PROCESSING TO STUDY THE DURATION OF PERIOD BETWEEN REACTOR WASHINGS

A. A. Solopova, M. A. Pasyukova, I. O. Dolganova, I. M. Dolganov, A. A. Bunaev

National Research Tomsk Polytechnic University

The purpose of this work is to simulate the processing of linear alkylbenzenes in a multi-tubular film reactor and use the computer simulation system to predict the duration of period between reactor washings based on the accumulation of a high-viscosity component. The developed model is adequate and able to calculate of the duration of period between reactor washings in the sulfonation reactor based on the accumulation of a high-viscosity component. The calculations were performed using a computer simulation system based on data from real sulfonation process.

Keywords: alkylbenzene sulfonic acid, sulfonation, highly viscous component, mathematical modeling.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ТОКА ПО СЕЧЕНИЮ ПРОВОДНИКОВ ПРИ ПРОПУСКЕНИИ ИМПУЛЬСОВ

Е. А. Правоторова<sup>1</sup>, О. Б. Скворцов<sup>1,2</sup>, О. А. Троицкий<sup>1</sup><sup>1</sup>Институт машиноведения им. А.А. Благонравова Российской академии наук<sup>2</sup>Научно-технический центр «Завод балансировочных машин»[ootroitsky@mail.ru](mailto:ootroitsky@mail.ru)

Процессы упругого и пластического деформирования проводников под воздействием проходящего через них тока зависят от распределения этого тока в проводнике. Такое распределение тока по сечению проводника даже в условиях однородности материала существенно отличается от равномерного. На такое распределение оказывают влияние пинч-эффект, эффект близости, поверхностный эффект, выделение тепла. Для понимания особенностей протекания процессов в проводниках при пропускании тока представляет интерес рассмотрение перераспределения тока в проводнике в условиях импульсного воздействия.

Ключевые слова: проводник, магнитное поле, плотность электрического тока, импульс, скин-эффект, пинч-эффект, эффект близости, вибрация, деформация.

Исследование физических процессов в проводниках при пропускании через них импульсов электрического тока требует учета распределения плотности тока в проводниках. От такого распределения зависит оценка вклада различных механизмов формирования тепловых и вибро-акустических процессов, связанных с прохождением тока [1-3]. Распределение тока определяет величину сил Лоренца, которые позволяют оценить пинч-эффект, эффект Холла и эффект близости для проводников. Процесс изменения тока связан с необходимостью учета явлений индуктивности и взаимной индуктивности, тепловые явления, влияние пинч-эффекта и скин-эффекта. Скин-эффект проявляется в неравномерном распределении плотности тока по сечению проводников и зависит от частоты электрического тока или времени воздействия на коротких временных интервалах (малой длительности действия импульса). Также обычно предполагают, что удельное сопротивление металлического проводника является постоянной величиной, которое не зависит от величины тока. При большой плотности тока, это предположение, возможно, не является точным, как следует из некоторых экспериментальных данных [4]. Другое широко распространенное мнение состоит в предположении о равномерности распределения постоянного тока по сечению проводников. Анализ распределения тока по сечению и экспериментальные данные показывают, что такое распределение плотности тока может существенно отличаться от равномерного [5, 6].

Для одиночного проводника круглого сечения на постоянном токе плотность тока с учетом влияния пинч-эффекта является функцией расстояния  $r$  от центра [5]:

$$J(\bar{r}) = \frac{8 \cdot I}{\pi^2 \cdot R^2} \exp\left(-\frac{8 \cdot \bar{r}^2}{\pi \cdot R^2}\right). \quad (1)$$

Оценка сопротивления образца для постоянного тока с неравномерным распределением плотности тока по сечению:

$$Rp = \frac{8l}{\sigma(T) \cdot 3\pi^2 D^2}, \quad (2)$$

где  $l$  – длина проводника,  $D = 2R$  – диаметр проводника,  $\sigma(T)$  – удельная проводимость, зависящая от температуры.

Зависимости плотности тока для образцов из меди и железа, полученные в предположениях о равномерном и неравномерном распределении, приведены на рис. 1.

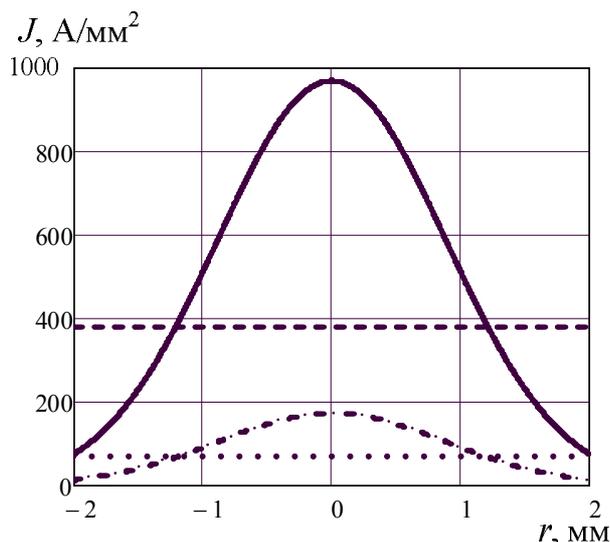


Рис. 1. Распределение плотности тока в проводнике круглого сечения из меди с учетом пинч-сжатия (сплошная) или равномерного распределения плотности тока (штриховая) и для железа – соответственно штрих-пунктирная и пунктирная линии. Диаметр образца 4 мм

Зависимости сопротивления и индуктивности от частоты обычно учитывают использованием различных соотношений отдельно для низких ( $LF$ ) и высоких ( $HF$ ):

$$R_{LF} = \rho \frac{l}{S} = \frac{4l}{\sigma \pi D^2}, \quad (3)$$

где  $\rho$  – удельное сопротивление материала,  $S$  – площадь поперечного сечения.

$$R_{HF} = \frac{l}{\sigma \pi D \delta} = \frac{R_S l}{\pi D}, \quad (4)$$

где  $\delta$  – толщина скин-слоя,  $R_S$  – сопротивление проводника с учетом скин-эффекта.

$$R_S = \frac{1}{c} \sqrt{\frac{\mu}{\sigma}} \cdot \sqrt{f}, \quad (5)$$

где  $c$  – скорость света,  $f$  – частота,  $\mu$  – магнитная проницаемость материала образца.

Низкочастотная  $L_{LF}$  и высокочастотная  $L_{HF}$  индуктивности проводника:

$$L_{HF} = \frac{\mu_0 l}{2\pi} \left( \ln \frac{l}{d} - 1 \right), \quad (6)$$

$$L_{LF} = \frac{\mu_0 l}{2\pi} \left( \ln \frac{l}{D} - 1 \right) + \frac{\mu l}{8\pi} \quad \text{при } \mu \neq 1, \quad (7)$$

где  $\mu_0$  – магнитная постоянная ( $\mu_0 = 1.25663706 \cdot 10^{-6}$  м кг с<sup>-2</sup> А<sup>-2</sup>),  $\mu = \mu_0 \cdot \mu_{\text{отн}}$ .

Приведенные соотношения позволяют оценить величину активных сопротивлений и индуктивностей проводника при его представлении в виде эквивалентной схемы.

На рис. 2 представлены зависимости оценок компонент сопротивления от частоты и диаметра проводника.

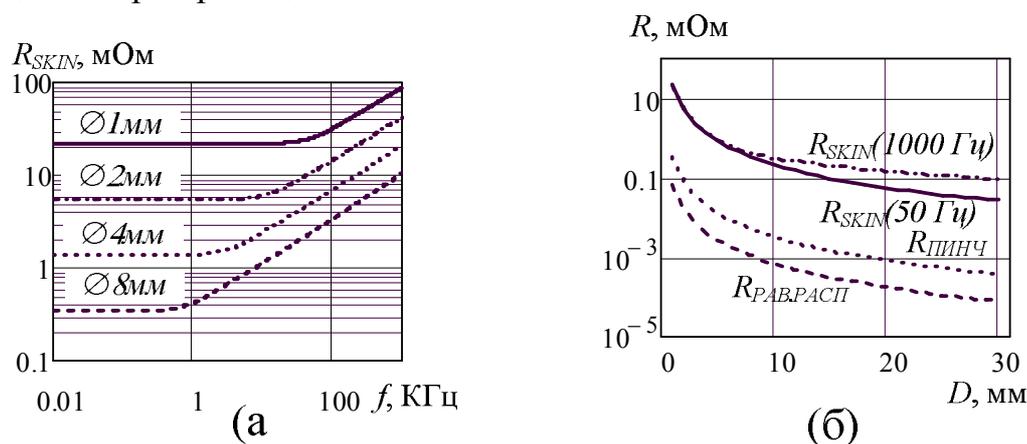


Рис. 2. Зависимость сопротивления образцов с учетом скин-эффекта в зависимости от частоты (а) и сравнение зависимости сопротивлений от диаметра образцов (б) с учетом скин-эффекта на частоте 1000 Гц (сплошная линия) и 50 Гц (штрих-пунктирная линия), а также сопротивление на постоянном токе при равномерном распределении тока (штриховая линия) или с учетом влияния пинч-эффекта (пунктирная линия)

Распределение плотности тока, как функция радиуса проводника и частоты, приведена на рис. 3. Поскольку в проводнике одновременно действуют как пинч-эффект, так и скин-эффект, причем влияние скин-эффекта сильнее сказывается в начальный момент времени, а пинч-эффект действует постоянно, представляет интерес результат их совместного действия. Процесс происходящего при этом перераспределения плотности тока иллюстрируется рис. 4.

Выполняемое с использованием кусочно-элементного моделирования [7] исследование протекания тока через проводник представляет действие скин-эффекта последовательным соединением эквивалентных схем элемента проводника. Для проводника из меди длиной 150 мм и диаметром 4 мм типичны электрические характеристики указанные ниже. Индуктивность проводника слабо зависит от частоты (для типичного образца от 420 до 390 нГн в диапазоне частот от 0 до 10 МГц). Более значительны изменения сопротивления (от 0,005 до 0,065 Ом). Сталь имеет глубину скин-слоя приблизительно в десять раз меньше, чем медь. При этом механический отклик для образцов из меди и стали

не показывают заметного количественного различия [8-14]. Существенно, что сколько-нибудь заметных значений тока в моменты соответствующие началу переднего и заднего фронтов не наблюдается.

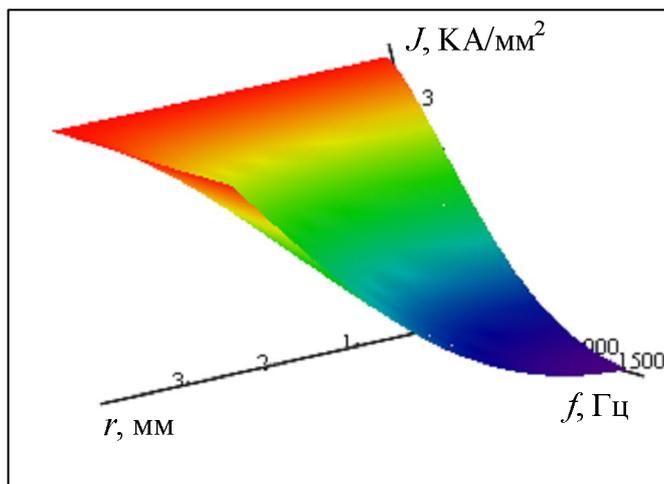


Рис. 3. Зависимость плотности тока от частоты и расстояния  $r$  от оси проводника

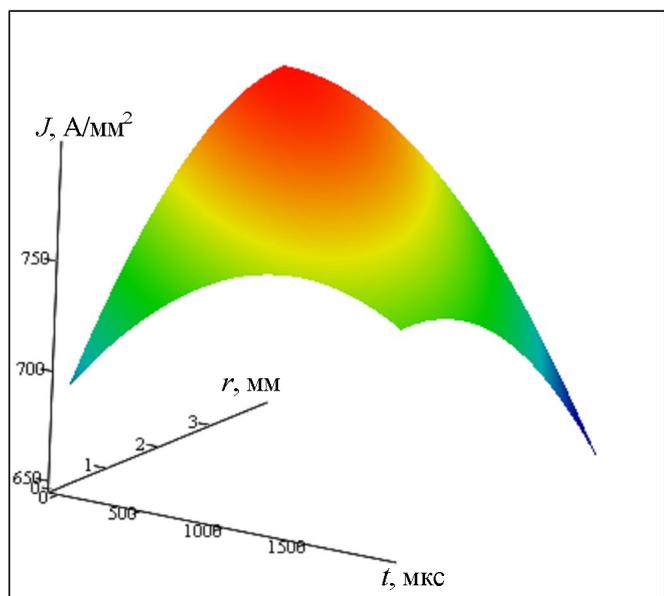


Рис. 4. Зависимость распределение плотности тока от длительности воздействия и удаления  $r$  от оси проводника с учетом пинч- и скин-эффектов

Экспериментальные оценки зависимостей магнитной индукции, измерялись датчиками Холла для контроля тока через медные образцы. Характерным является наличие скачкообразных изменений в моменты начала переднего и задних фронтов приложенного импульса напряжения. В эти моменты происходит возбуждение механических колебаний образца в виде одиночного прямого проводника.

Данные результаты удовлетворительно описывают процесс проникновения магнитного поля в проводник. Такое проникновение можно оценить величиной

скин-времени [4]. Это время характеризует заполнение током сечения проводника диаметром  $D$ :

$$T_s = \frac{\mu\sigma D^2}{2}. \quad (8)$$

В [4] отмечено, что погонное комплексное сопротивление проводника в виде стальной полосы при больших токах зависит от величины тока и увеличивается как с ростом величины тока, так и с увеличением частоты, причем эта зависимость имеет нелинейный характер. При выполнении измерений вместо измерения тока по напряжению на шунте часто используют бесконтактные измерения тока с помощью датчика Холла.

Если ток распространяется по направлению оси проводника  $x$ , для электрического поля в этом направлении из уравнений Максвелла может быть получено выражение [15]:

$$E_x = A e^{-\frac{z}{\delta}} \cdot e^{-i\left(\frac{z}{\delta} - \omega t\right)}, \quad (9)$$

где  $A$  – нормирующий множитель, а  $\delta$  – глубина скин-слоя:

$$\delta = \frac{c}{\sqrt{2\pi\mu\sigma\omega}}, \quad (10)$$

где  $c$  – скорость света.

Результаты сравнения различных оценок сопротивлений образцов из меди и железа представлены в таблице.

материал	$T_s$ , мс	$\delta$ , мкм	$R_{ВЧ}/R_{НЧ}$	$R_{ВЧ}/R_P$	$R_{НЧ}/R_P$	$Avr(J_{НЧ})/Avr(J_P)$
медь	0,57	210	4,75	22,38	4,71	1,38
железо	103	15,8	63,5	299,1	4,71	1,38

Примечание: оценка толщины скин-слоя для частоты 100 КГц.

Эквивалентная схема, включающая формирование скачкообразных изменений тока в начальные моменты фронтов импульсов, может быть реализована подключением дополнительного дифференцирующего элемента к цепи моделирующей поверхностный слой проводника, связанный со скин-эффектом.

#### Литература

1. Батаронов И. Л. Механизмы электропластичности // Соросовский образовательный журнал. № 10. 1999. – С.93-99.
2. Сидоренков В. В. Развитие физических представлений о процессе электрической проводимости в металле // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки». 2. 2005. С.35-45.
3. Troickij O. A., Skvorcov O. B., Stashenko V. I. Ultrasonic vibroacoustic processes, excited by heating by impulse currents of metals // In 15th International School-Conference “New materials – Materials of innovative energy: development, characterization methods and application”, KnE Materials Science. 2017. - P.621–628.
4. Терентьев Д. Е. Высокочастотные свойства заземляющих проводников // Электро-связь, 11, 2004, с.24-25.
5. Харисов А. А. Исследования реального статистического распределения плотности постоянного электрического тока в уединенных прямых цилиндрических проводниках при

установившихся токовых и температурных режимах // Научно-технический сборник «Коммунальное хозяйство городов». 51. 2003. - С.154-161.

6. Демченко В. Ф., Бой У., Кривцун И. В., Шуба И. В. Действующие значения электродинамических характеристик процесса сварки неплавящимся электродом с импульсной модуляцией тока дуги // Автоматическая сварка, № 8 (766). 2017. - С.3-14.

7. Исаев Ю. Н., Старцева Е. В. Расчет параметров распределенной схемы замещения обмоток трансформатора с учетом влияния скин-эффекта. Известия ТПУ. Т.326. № 9. 2015. - С.47-55.

8. Терентьев Д. Е. Высокочастотные свойства заземляющих проводников // Электро-связь, 11, 2004, с.24-25.

9. Troickij O. A., Skvorcov O. B., Pravotorova E. A., Stashenko V. I. Analysis of the relationships for the vibrational response to the excitation of vibro-acoustic processes in conductors from the action of a pulsed current // In 15th International School-Conference "New materials – Materials of innovative energy: development, characterization methods and application", KnE Materials Science. 2017. - P.611–620.

10. Скворцов О. Б., Сташенко В. И., Троицкий О. А. Упругие деформации проводников при действии импульсов тока // Машиностроение и инженерное образование. № 1. 2018. С.33-42.

11. Троицкий О. А., Сташенко В. И., Скворцов О. Б. Методика оценки распределения тока в электропроводящих элементах // Инженерно-физические проблемы новой техники. Сб. материалов XIII Всероссийского семинара-совещания. М.: НИИ ИУ МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2018, с.165-166.

12. Троицкий О. А., Скворцов О. Б., Сташенко В. И. Возбуждение виброакустических колебаний в проводниках импульсными токами // Колебания и волны в механических системах. Материалы международной научной конференции. М.: ИМАШ. 2017. - С.131-132.

13. Сташенко В. И., Скворцов О. Б. Методы контроля тока в экспериментах генерации механических колебаний импульсными токами // Состояние и проблемы измерений. Сб. материалов XIV Всероссийской научно-технической конференции. НУК ИУ МГТУ им. Н.Э. Баумана, М.: 2017. – С.106-109.

14. Троицкий О. А., Сташенко В. И., Правоторова Е. А., Скворцов О. Б. Магнито-механическое действие импульсного тока в проводнике // Международная конференция «Живучесть и конструкционное материаловедение» (ЖивКоМ - 2016): Труды конференции (Москва, 26-28 октября 2016 года). М.: Изд-во ИМАШ. 2016. - С.145-148.

15. Максимычев А. В. Физические методы исследования // Конспект лекций. 2. Сигналы в длинных линиях. М.: МФТИ. 2006. 42 с.

## MODELING OF THE PROCESS OF REDISTRIBUTION OF CURRENT DENSITY ON THE SECTION OF THE CONDUCTORS UNDER PASSING THE PULSES

E. A. Pravotorova<sup>1</sup>, O. B. Skvortsov<sup>1,2</sup>, O. A. Troitsky<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Sciences

<sup>2</sup>Scientific and Technical Center "Zavod Balansirovochnykh mashin" Limited Leability Company

The processes of elastic and plastic deformation of conductors under the influence of the current passing through them depend on the distribution of this current in the conductor. Such a current distribution over the conductor cross section, even in the case of uniformity of the material, is significantly different from the uniform one. Such distribution is influenced by the pinch effect, proximity effect, surface effect, heat release. To understand the features of the processes in conductors when current is passed, it is of interest to consider the current redistribution in a conductor under pulsed conditions.

Keywords: conductor, magnetic field, electric current density, pulse, skin effect, pinch effect, proximity effect, vibration, deformation.

## ЭКВИВАЛЕНТНЫЕ СХЕМЫ ПРОВОДНИКОВ В УСЛОВИЯХ ДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ

В. И. Стащенко<sup>1</sup>, О. Б. Скворцов<sup>1,2</sup>, О. А. Троицкий<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт машиноведения им. А.А. Благонравова Российской академии наук

<sup>2</sup>Научно-технический центр «Завод балансировочных машин»

[ootroitsky@mail.ru](mailto:ootroitsky@mail.ru)

Математические модели и эквивалентные схемы проводников находят широкое применение при анализе работы электромеханического оборудования. Существующие модели и эквивалентные схемы удовлетворительно описывают большую часть особенностей поведения проводников в условиях воздействия на них электрических импульсов. Экспериментальные исследования позволяют выделить эффекты от некоторых известных механизмов действия электричества на проводник, а также показывают наличие процессов такого взаимодействия, требующих дополнительного анализа причин их проявления.

Ключевые слова: математическая модель, эквивалентная схема, поверхностный эффект, динамические деформации, электрический ток, металлический проводник, пондеромоторный эффект.

При исследовании электрических цепей и проектировании электрического и электронного оборудования широкое распространение получили программные пакеты САПР для моделирования электрических схем. В основу многих из них положены принципы, использованные для моделирования в системе PSpice [1-4]. Такие программы позволяют для заданной структуры электрической схемы и номиналов используемых элементов провести анализ во временной и/или частотной области с минимальными затратами времени, причем для схем, сложность которых практически исключает возможность аналитического составления систем уравнений, описывающих работу схемы. Адекватность используемой и составляемой модели ограничивается при этом выбором конфигурации схемы и набора элементов отражающих физические процессы в реальном устройстве. Более детальный анализ возможен в случае использования систем конечно-элементного моделирования физических процессов в элементах оборудования, как это реализовано, например, в системах ANSYS Maxwell или COMSOL Multiphysics. Однако и в этом случае адекватность результатов моделирования для реального объекта ограничивается описанием тех физических процессов закладываемых в модель. Если однозначного понимания природы происходящих в объекте моделирования процессов нет, разработанные модели могут быть использованы для анализа возможного вклада известных по гипотезам описания процессов в исследуемые явления или для поиска новых гипотез, более полно характеризующих реальные явления. Моделирование с использованием PSpice обеспечивает удовлетворительную точность анализа самых разных электрических цепей, позволяет легко учесть влияние различных паразитных элементов обычно имеющихся в реальных объектах и фактически стало стандартом для анализа различных схем.

Исследование физических процессов, происходящих в проводниках при пропускании через них электрического тока и возникающие при этом физические явления теплового и механического характера проводятся в течении более чем полутора веков [5-11]. Были предложены различные гипотезы, описывающие возникающие физические явления, но полного общепризнанного непротиворечивого описания происходящих в проводниках процессов пока не получено. Это следует отнести как к качественному, так и к количественному описанию электрических, тепловых и механических процессов, происходящих в реальных электропроводящих элементах.

Примеры типовых электропроводящих элементов в виде прямого изолированного проводника и простой катушки индуктивности приведены на рис. 1.

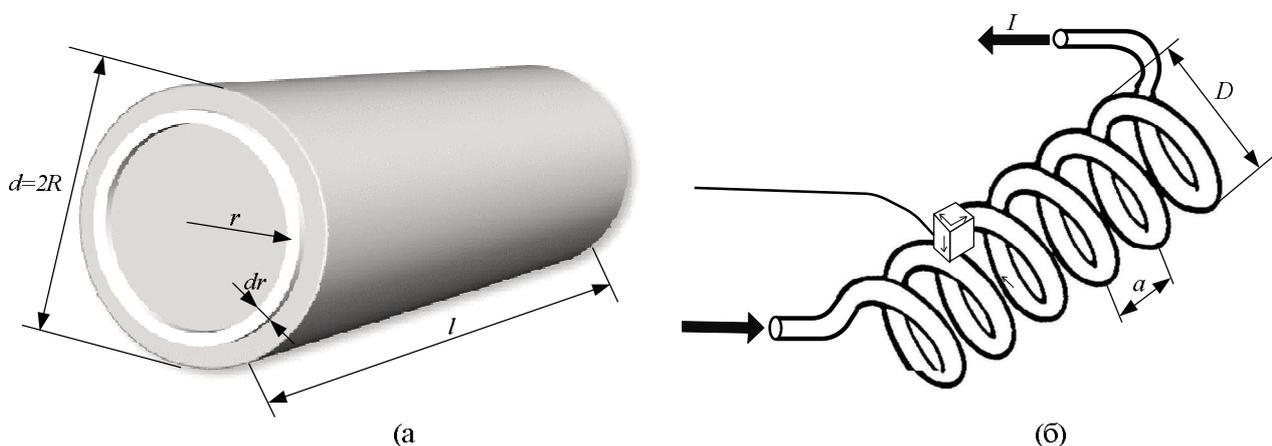


Рис. 1. Примеры типовых электропроводящих элементов: (а) – прямой одиночный проводник круглого сечения из металла диаметром  $d$  и длиной  $l$  ( $l \gg d$ ), выделен слой проводника толщиной  $dr$ , расположенный на расстоянии  $r$  от оси проводника; (б) – катушка индуктивности из  $N$  витков с межвитковым расстоянием  $a$  и диаметром витков  $D$

Поведение как одиночного проводника, так и простой катушка индуктивности при приложении к ним внешнего напряжения может быть смоделировано в системе PСspice заменой реального объекта на его эквивалентную схему состоящую из элементарных моделей таких элементов, как индуктивность, конденсатор и активное сопротивление. Пример результата моделирования эквивалентной схемы проводящего элемента, содержащего такие элементы, представлен на рис. 2. Такая эквивалентная схема позволяет учесть собственную индуктивность, паразитные емкости, активное сопротивление проводника и вполне удовлетворительно описывает, например, влияние поверхностного эффекта (скин-эффекта).

Адекватность такого представления проводящего элемента эквивалентной схемой подтверждается сравнением результатов моделирования для заданных параметров элементов эквивалентной схемы и измерений для реальной схемы. Значения параметров элементов эквивалентной схемы могут быть получены, как по расчетным значениям, так и по результатам их прямых измерений для моделируемого проводника. Измерение напряжений и токов может быть

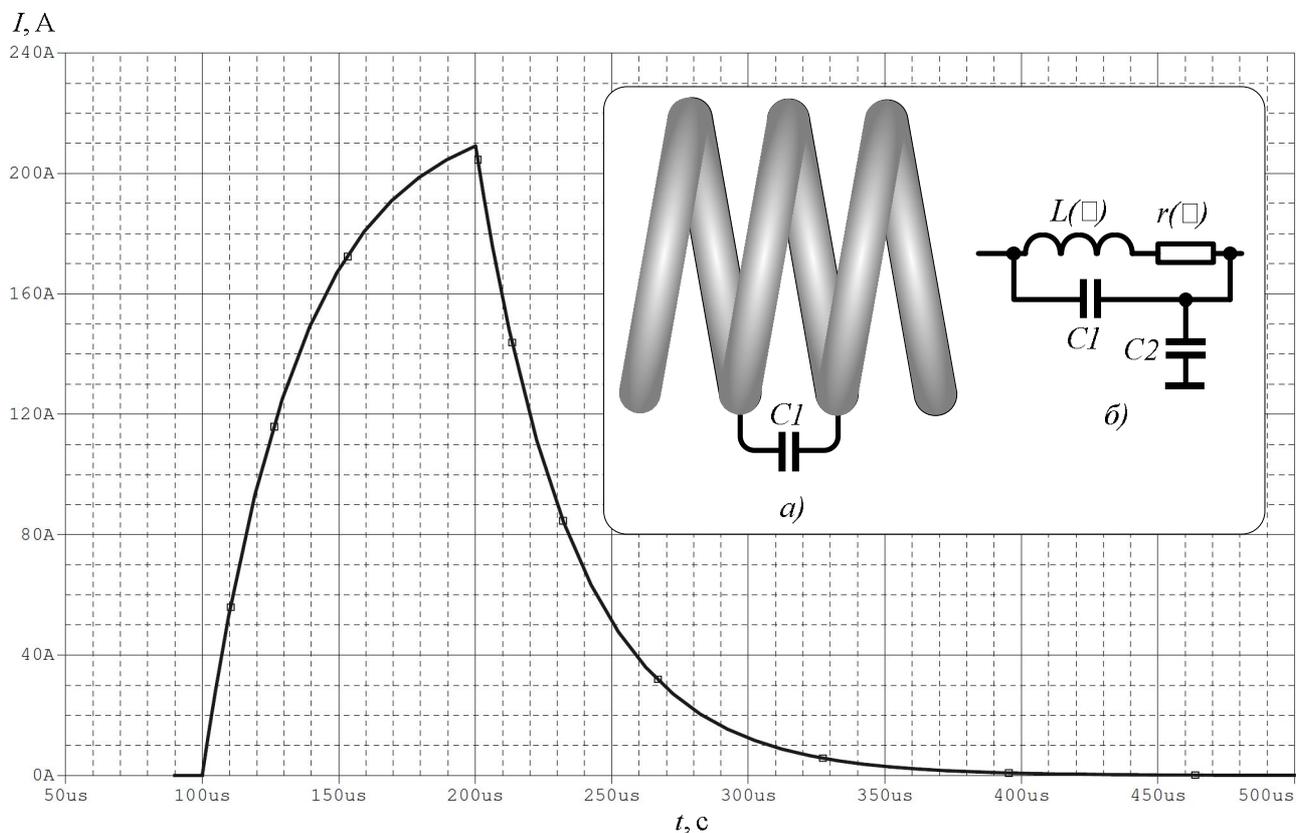


Рис. 2. Проводник в виде катушки (а) и эквивалентная схема витка (б) и результаты расчета формы импульса тока для схемы образца из восьми ячеек эквивалентной схемы с учетом модели скин-эффекта

выполнено с использованием электронных измерительных приборов, например с применением модуля сбора данных и компьютера. Преимуществом моделирования с применением эквивалентной схемы является возможность получения оценок токов и напряжений для всей схемы, включая внутренние цепи и узлы, физические измерения для которых затруднительны или невозможны. Это позволяет оценить влияние им вклад процессов, связанных с каждым из элементов эквивалентной схемы. Физические измерения токов и напряжений могут выполняться как прямым измерением, так и по косвенным измерениям. Например, ток в проводнике может контролироваться по создаваемому этим током магнитному полю вокруг проводника с применением датчиков магнитной индукции. Применение модуля сбора данных позволяет синхронно выполнить измерение и запись электрических, тепловых и механических процессов.

Как тепловые, так и механические процессы сопровождают электрические процессы в проводнике. Нагрев проводника за счет выделения тепла при прохождении тока может существенно повлиять на сопротивление проводника и изменить происходящие в нем электрические процессы, а механическое действие тока может вызывать пластическую деформацию проводника [7] или вызывать его разрушение [6, 9].

При пропускании одиночных коротких импульсов и относительно небольших приложенных к проводнику напряжениях тепловым действием тока и воз-

возможными пластическими деформациями часто можно пренебречь, что позволяет упростить анализ происходящих процессов, поскольку температурные воздействия незначительны, а механические перемещения ограничиваются упругими деформациями. Возможность обратного влияния изменения температуры и деформаций, возникающих под влиянием приложенного напряжения к металлическому образцу, на электрические свойства материала этого образца весьма ограничены. Если коэффициент преобразования электрической энергии, приложенной к образцу, в энергию магнитного поля или тепловую энергию измеряется в процентах, то перехода энергии электрической энергии в энергию механических деформаций (вибрацию образца) существенно меньше долей процента [12].

Эквивалентные схемы проводника для более детального учета происходящих процессов могут быть расширены за счет включения дополнительных элементов. Например, постепенное распространение тока внутрь проводника от поверхности при скин-эффекте может быть представлено схемой, показанной на рис. 3 [13, 14]. На этом рисунке приведены результаты моделирования воздействия приложенного импульса напряжения.

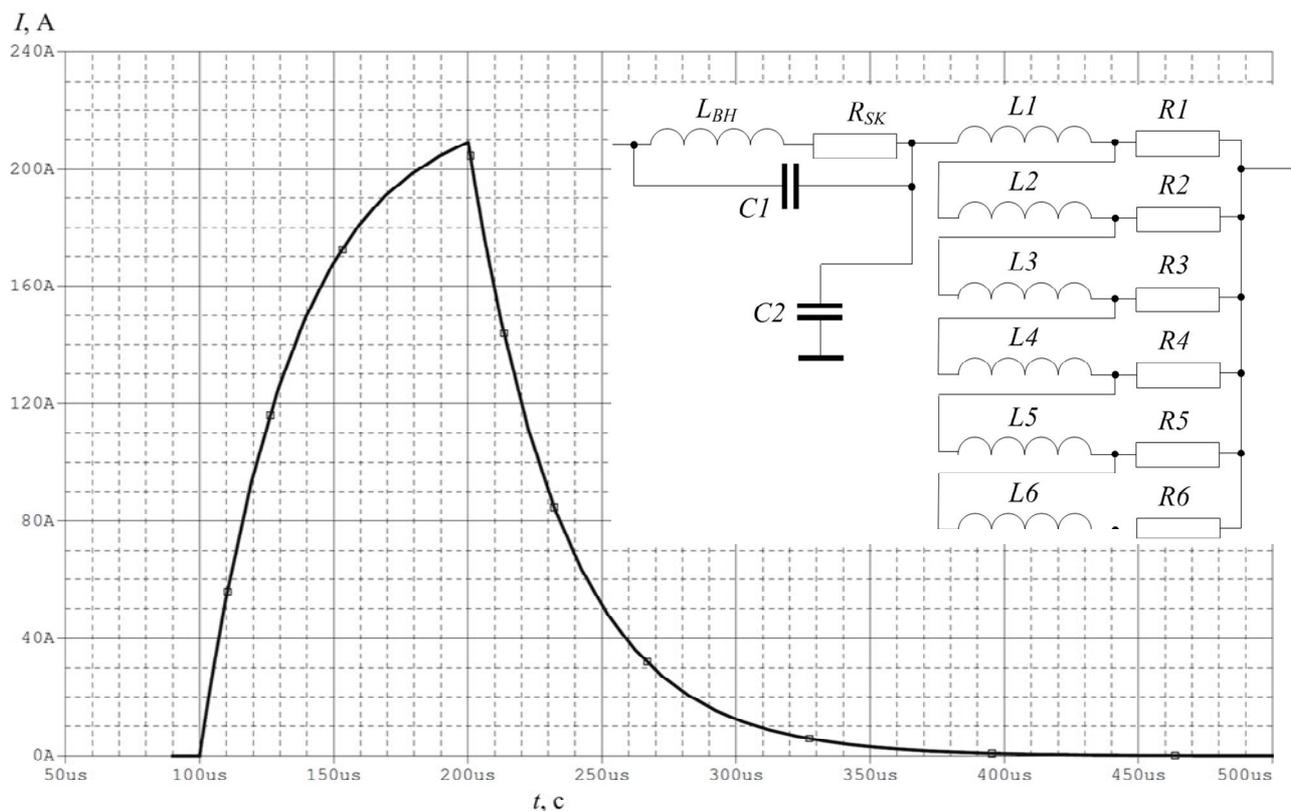


Рис. 3. Эквивалентная схема моделирования скин-эффекта с постепенным распространением пропускающего ток слоя в глубину проводника и результат моделирования зависимости тока через проводник от времени

Существенно, что качественно полученные результаты не отличаются от представленных на рис. 2 для более простой эквивалентной схемы.

Для сравнения на рис. 4 приведены результаты измерения трех пространственных компонент магнитной индукции вблизи с прямым одиночным провод-

ником при приложении к нему электрического импульса. В отличие от ранее проведенных расчетов для эквивалентных схем, учитывающих индуктивные и емкостные характеристики проводника, а также его активное сопротивление магнитная индукция, также как и вызывающие ее токи характеризуются наличием в моменты начала переднего (и заднего) фронтов приложенного напряжения скачкообразного быстрого увеличения (уменьшения) магнитной индукции и тока. Величина таких скачкообразных изменений равная для переднего и заднего фронтов импульсов.

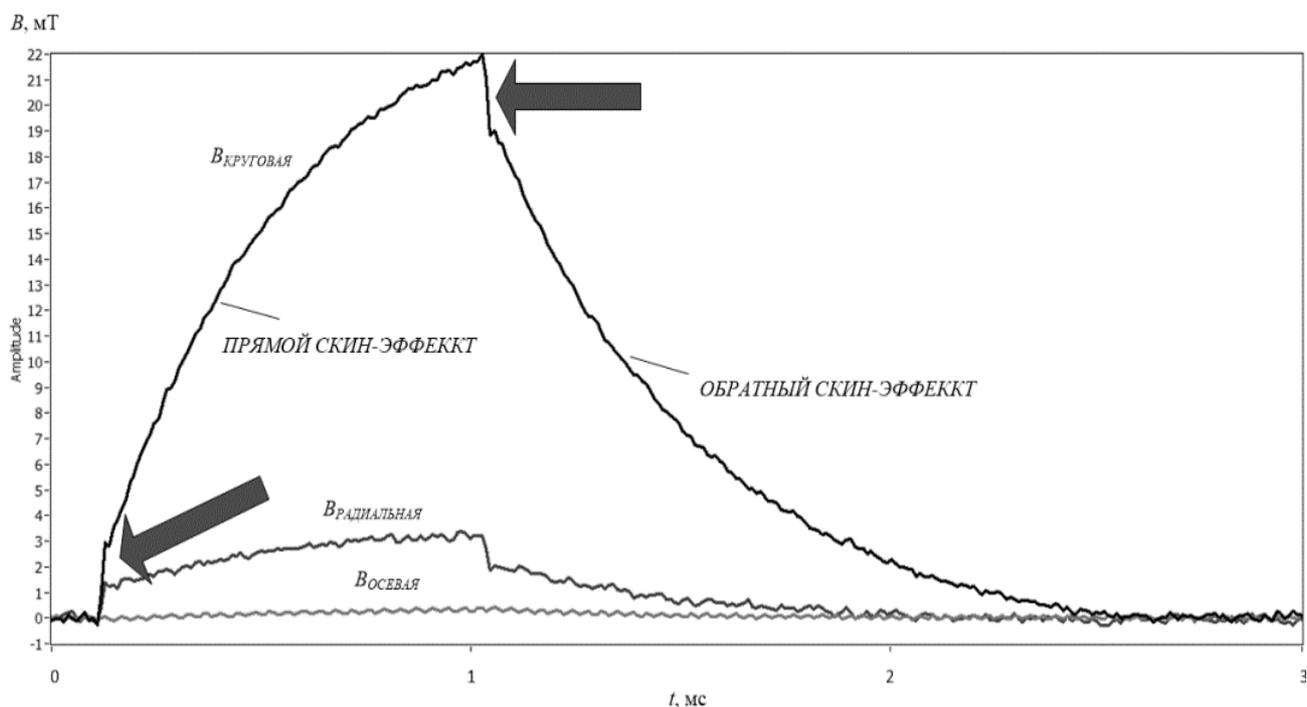


Рис. 4. Зависимость магнитной индукции вбили от проводника, измеренная трехкомпонентным датчиком Холла. Стрелками показаны скачкообразные изменения магнитной индукции в моменты начала и переднего и заднего фронтов приложенного напряжения

Наиболее значительное механическое действие электрического тока проявляется именно в моменты начала переднего и заднего фронта импульсного тока. Абсолютная величина тока в момент начала переднего фронта мала и представляет интерес провести анализ динамических процессов перераспределения тока в металлическом образце в виде цилиндрического проводника во время переходного процесса. Такие процессы в соответствии с классической теорией с проявлением поверхностного эффекта. В начальный момент времени ток распространяется только в поверхностном слое проводника, который имеет сравнительно высокое сопротивление. В соответствии с теорией ток проводнике из-за влияния поверхностного эффекта постепенно увеличивается и происходит распространение магнитного поля вглубь проводника.

В момент начала импульса внешнего напряжения сопротивление проводника значительно (в десятки раз) превосходит сопротивление этого проводника

для постоянного тока с учетом неравномерности распределения плотности тока под действием пинч-эффекта. Для ферромагнитных материалов это отношение может достигать нескольких сотен.

В условиях, когда пинч-эффект не проявляется (например при малых плотностях тока) распределение плотности тока может быть близким к равномерному, причем в этом случае общее сопротивление может быть более высоким. При повышенных плотностях тока, наблюдаемое при экспериментах увеличение с ростом тока сопротивления, может быть связано с повышением температуры образцов. Эквивалентные схемы, учитывающие действие скин-эффекта, описанные в литературе, показывают хорошее согласование с результатами контроля процессов нарастания тока в проводниках, особенно для материалов с сильным проявлением скин-эффекта (медь, серебро). Такие схемы не позволяют выявить заметного преобразования электромагнитной энергии в механические колебания в моменты начала и окончания действия импульсов внешнего приложенного напряжения, что объяснило бы наиболее сильное механическое действие электрического тока, во времени совпадающие с этими моментами.

#### Литература

1. Mayergoyz I., Lawson W. Basic Electric Circuit Theory // 1st Edition. Elsevier. 2012. – 449 p.
2. Alexander C. K., Sadiku M. N. O. Fundamental of electric circuits // Fifth edition. McGraw-Hill. 2013. - 996 p.
3. Iqbal S., Sher H. A. PSpice in Undergraduate and Graduate Electrical Engineering Courses // 2007. – 6 p.
4. Tuinenga P.W. Spice. A guide to circuit simulation and analysis using PSpice // Prentice hall. 1992. - 217 p.
5. Wertheim G. Untersuchungen über die elasticität // Ann. Phys. und Chem. Bd. 11/11. - 1848, P.1–114.
6. Nasilovski J. Exploding wires // Ed. W. G. Chase and H. K. Moore, New York: Plenum. V. 3. 1964. – P. 295.
7. Батаронов И. Л. Механизмы электропластичности // Соросовский образовательный журнал. № 10. 1999. – С. 93-99.
8. Сидоренков В. В. Развитие физических представлений о процессе электрической проводимости в металле // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки». 2. 2005. С. 35-45.
9. Surkaev A. L. Magnetohydrodynamic perturbations arising in metallic conductors under the action of the discharge current // Technical physics. V. 60. 7. 2015. P. 981-984.
10. Баранов М. И. Трансформация электронных полувольт в электрической цепи с разнородными металлическими проводниками и импульсным током большой плотности // Вісник НТУ «ХП». Серія: Техніка та електрофізика високих напруг. – Х.: НТУ «ХП», 2014. – № 21 (1064). – С. 3-11.
11. Скворцов О. Б., Стащенко В. И., Троицкий О. А. Упругие деформации проводников при действии импульсов тока // Машиностроение и инженерное образование. № 1. 2018. – С. 33-42.
12. Troickij O. A., Skvorcov O. B., Pravotorova E. A., Stashenko V. I. Analysis of the relationships for the vibrational response to the excitation of vibro-acoustic processes in conductors from the action of a pulsed current // In 15th International School-Conference “New materials –

Materials of innovative energy: development, characterization methods and application”, KnE Materials Science. 2017. - P.611–620.

13. Исаев Ю. Н., Старцева Е. В. Расчет параметров распределенной схемы замещения обмоток трансформатора с учетом влияния скин-эффекта // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. 2015. Т. 326. № 9, С.47-55.

14. Антоненко Г. В. Оптимизация цепочечной модели для учета скин-эффекта в пазах роторов асинхронных двигателей на основе расчета картины поля рассеяния // Наукові праці Донецького національного технічного університету. № 9(158), 2009. – с.7-14.

## EQUIVALENT SCHEMES FOR CONDUCTORS IN THE CONDITIONS OF ELECTRICAL PULSE ACTION

V. I. Stashenko<sup>1</sup>, O. B. Skvortsov<sup>1,2</sup>, O. A. Troitsky<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Mechanical Engineering Research Institute of the Russian Academy of Sciences

<sup>2</sup>Scientific and Technical Center "Zavod Balansirovochnykh Mashin" Limited Liability Company

Mathematical models and equivalent circuits of conductors are widely used in the analysis of the work of electromechanical equipment. Existing models and equivalent circuits satisfactorily describe most of the features of the behavior of conductors under the influence of electrical impulses on them. Experimental studies allow to isolate the effects of some of the known mechanisms of action of electricity on a conductor, and also show the presence of processes of such interaction, which require additional analysis of the reasons for their.

Keywords: mathematical model, equivalent circuit, surface effect, dynamic deformations, electric current, metallic conductor, ponderomotive effect.

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛАХ С ИМПЛАНТИРОВАННЫМИ ПРИМЕСЯМИ

В. В. Филиппов<sup>1,2</sup>, С. Е. Лузянин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Липецкий государственный педагогический университет им. П.П. Семенова-Тян-Шанского

<sup>2</sup>Липецкий государственный технический университет

[wwfilippow@mail.ru](mailto:wwfilippow@mail.ru)

В работе предложена теоретическая модель, позволяющая определять распределение электрического потенциала в неоднородных полупроводниковых пленках, полученных после ионного внедрения примеси. Представлены пространственные распределения потенциала электрического поля при зондовых измерениях в полупроводниковых пластинах неоднородных по глубине.

Ключевые слова: полупроводник, ионное внедрение примеси.

При практическом исследовании электрофизических свойств неоднородных полупроводниковых материалов и получении на их основе различных приборов возникает необходимость измерения удельной проводимости образцов и проверки их на однородность [1].

Внедрение разнообразных примесей в полупроводниковый кристалл делает возможным разрабатывать электронные схемы, обладающие незначительными размерами и новыми свойствами. Основные технологии введения примесей – это диффузия и ионное внедрение.

При внесении примеси с использованием ионного внедрения концентрация внедренных ионов может быть вычислена по формуле Гаусса [2-5]

$$N(z) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z - R_p}{\Delta R_p}\right)^2\right], \quad (1)$$

где  $A$  – задается ионной дозой (величиной потока ионов),  $R_p$  – проекция пробега (глубина максимума концентрации залегания примеси),  $\Delta R_p$  – разброс ионов,  $z$  – глубина внедрения иона в материал.

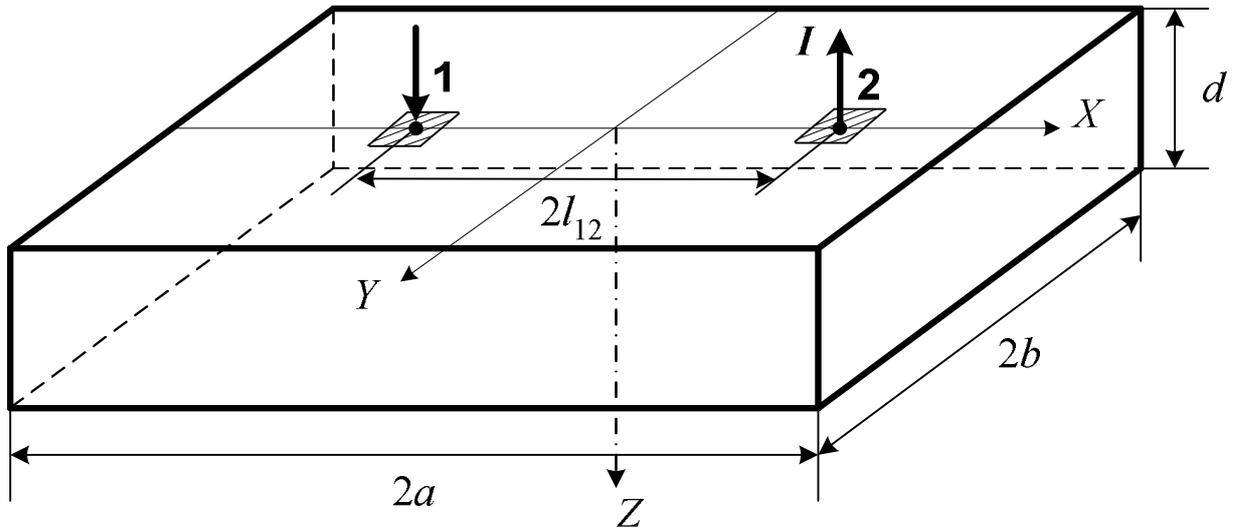
Концентрация носителей тока в полупроводниковых материалах определяется, в первую очередь, концентрацией примесных носителей тока, поэтому электропроводимость материала с глубиной изменяется по формуле, подобной (1):

$$\sigma(z) = \sigma_0 \cdot \exp\left[-2\beta(z - a_0)^2\right], \quad (2)$$

где  $\sigma_0$  – поверхностная электропроводимость,  $a_0$  – глубина с максимальной концентрацией примеси,  $\beta$  – технологический параметр, определяемый способом получения неоднородного слоя в полупроводнике.

Проанализируем распределение стационарного электрического потенциала в неоднородной по глубине пластине полупроводника прямоугольной фор-

мы с геометрическими размерами  $2a$ ,  $2b$  и  $d$ . Токовые контакты к пластине имеют квадратную форму со стороной  $2\varepsilon$ . Они расположены на взаимном расстоянии  $2l_{12}$  симметрично на поверхности образца (см. рисунок).



В рассматриваемом случае удельная электропроводность полупроводниковой пластины изменяется с глубиной по закону (2). Для постоянных электрических токов при отсутствии источников и стоков зарядов выполняются следующие уравнения [6, 7]:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad \mathbf{j} = -\sigma \operatorname{grad} \varphi. \quad (3)$$

Соответственно, потенциал стационарного электрического поля  $\varphi$  в изотропном образце удовлетворяет дифференциальному уравнению:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \frac{1}{\sigma(z)} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{d\sigma(z)}{dz} = 0. \quad (4)$$

Для решения поставленной выше задачи необходимы граничные условия, которые следуют из требования равенства нулю нормальной составляющей плотности электрического тока всюду на поверхности полупроводника, кроме области токовых зондов:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0} = \begin{cases} \pm \frac{I}{4\varepsilon^2 \sigma_0}, & \text{при } (l_{12} - \varepsilon) \leq |x| \leq (l_{12} + \varepsilon) \text{ и } |y| \leq \varepsilon; \\ 0, & \text{в остальной области;} \end{cases} \quad (5)$$

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right|_{x=\pm a} = 0; \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right|_{y=\pm b} = 0; \quad \left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=d} = 0. \quad (6)$$

Опуская громоздкое решение уравнения (4) с граничными условиями (5), (6) методом разделения переменных, нами было получено следующее выражение распределения электрического потенциала  $\varphi$  в образце:

$$\varphi(x, y, z) = \sum_{\substack{k=1,3,\dots \\ n=0,2,\dots}} \left[ C_1 \cdot \Phi\left(q; \frac{1}{2}; 2\beta(z-a_0)^2\right) + C_2 \cdot \sqrt{2\beta}|z-a_0| \cdot \Phi\left(q + \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; 2\beta(z-a_0)^2\right) \right] \times \\ \times \cos \alpha_k(x+a) \cos \alpha_n(y+b), \quad (7)$$

где  $\Phi(a, c, z)$  – вырожденная гипергеометрическая функция Куммера, полученная при решении конфлюэнтного дифференциального уравнения [8],

$$\alpha_k = \frac{\pi k}{2a}, \quad \alpha_n = \frac{\pi n}{2b}, \quad q = \frac{\alpha_k^2 + \alpha_n^2}{8\beta}, \quad (8)$$

$$C_2 = -\frac{I}{2\sigma_0 ab \varepsilon^2} (-1)^{(n+k-1)/2} \cdot \frac{\sin \alpha_n \varepsilon \sin \alpha_k \varepsilon}{\alpha_n \alpha_k} \cdot \frac{\sin \alpha_k l_{12} \cdot \Theta_{kn}}{\beta a_0} \cdot \frac{1}{D}, \quad (9)$$

$$\Theta_{kn} = \begin{cases} 0.5, & \text{при } n = 0; \\ 1, & \text{при } n \neq 0; \end{cases} \quad (10)$$

$$D = -\left( \frac{\Phi\left(q + \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; 2\beta(d-a_0)^2\right)}{|d-a_0|\sqrt{8\beta}} + \frac{|d-a_0|\sqrt{8\beta}}{3} \left[ q + \frac{1}{2} \right] \cdot \Phi\left(q + \frac{3}{2}; \frac{5}{2}; 2\beta(d-a_0)^2\right) \right) \times \\ \times \frac{\Phi\left(q+1; \frac{3}{2}; 2\beta a_0^2\right)}{\Phi\left(q+1; \frac{3}{2}; 2\beta(d-a_0)^2\right)} + \frac{\Phi\left(q + \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; 2\beta a_0^2\right)}{a_0 \sqrt{8\beta}} + \frac{a_0 \sqrt{8\beta}}{3} \left[ q + \frac{1}{2} \right] \cdot \Phi\left(q + \frac{3}{2}; \frac{5}{2}; 2\beta a_0^2\right); \quad (11)$$

$$C_1 = -C_2 \times \left( \frac{\Phi\left(q + 1/2; 3/2; 2\beta(d-a_0)^2\right)}{2q|d-a_0|\sqrt{8\beta} \cdot \Phi\left(q+1; 3/2; 2\beta(d-a_0)^2\right)} + \right. \\ \left. + \frac{|d-a_0|\sqrt{2\beta} \left[ q + 1/2 \right] \cdot \Phi\left(q + 3/2; 5/2; 2\beta(d-a_0)^2\right)}{3q \cdot \Phi\left(q+1; 3/2; 2\beta(d-a_0)^2\right)} \right). \quad (12)$$

Полученные выражения для потенциала (7)-(12) позволяют проанализировать распределение потенциала и плотности тока в неоднородном по глубине образце. Также данные выражения позволяют разработать теоретически обоснованный метод измерения электрических параметров неоднородной полупроводниковой пластины.

#### Литература

1. Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Основы наноэлектроники. – М.: Физматкнига, 2006. – 496 с.
2. Рабаи Ж. М., Чандракасан А., Николич Б. Цифровые интегральные схемы. Методология проектирования. – М.: Вильямс, 2007. – 912 с.
3. Таиров Ю. М., Цветков В. Ф. Технология полупроводниковых и диэлектрических материалов. СПб.: Лань, 2002. 424 с.
4. Тилл, У. Интегральные схемы: Материалы, приборы, изготовление / У. Тилл, Дж. Лаксон. – М.: Мир, 1985. – 501 с.
5. Соколов, И. А. Расчеты процессов полупроводниковой технологии / И. А. Соколов. – М.: Металлургия, 1994. – 176 с.

6. Ландау, Л. Д. Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2003. – 656 с.
7. Бредов, М. М. Классическая электродинамика / М. М. Бредов, В. В. Румянцев, И. Н. Топтыгин. – М.: Наука. Главная редакция физ.-мат. лит., 1985. – 400 с.
8. Янке, Е. Специальные функции / Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. – М.: Наука, 1968. – 344 с.

## DISTRIBUTION OF ELECTRIC FIELDS IN SEMICONDUCTOR CRYSTALS WITH IMPLANTED IMPLICATIONS

V. V. Filippov<sup>1,2</sup>, S. E. Luzyanin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Lipetsk State Pedagogical P. Semenov-Tyan-Shansky University

<sup>2</sup>Lipetsk State Technical University

A theoretical model of the distribution of the electric field potential in inhomogeneous semiconductor films obtained after ionic implantation of an impurity is presented. Three-dimensional distributions of the electric field potential in inhomogeneous semiconductor wafers are obtained by probe measurements.

Keywords: semiconductor, ion impurity injection.

## ВЛИЯНИЕ СКОРОСТИ ВРАЩЕНИЯ НА СОБСТВЕННЫЕ ЧАСТОТЫ РЕЗОНАТОРА ВОЛНОВОГО ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ГИРОСКОПА

И. Л. Батаронов, Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков,  
В. В. Пешков, С. В. Писарев

Воронежский государственный технический университет  
[vmfmm@mail.ru](mailto:vmfmm@mail.ru)

Методом конечных элементов решена краевая задача на собственные значения уравнения колебаний цилиндрического резонатора вращающегося волнового твердотельного гироскопа. Определены формы и частоты собственных колебаний резонатора.

Ключевые слова: математическая модель, волновой твердотельный гироскоп, вращение, собственные частоты, резонатор.

### Введение

Эффект инертности стоячей упругой волны во вращающейся полусферической оболочке был установлен Брайаном в 1890 г. [1]. На его основе Линчем в 1965 г. была предложена конструкция датчика угловой скорости, названного им полусферическим резонаторным гироскопом (волновой твердотельный гироскоп – ВТГ) [2]. Впервые реально работающие высокоточные ВТГ появились в 80-х годах XX века (см. обзор [3]). Их точность определяется оптимальным выбором конструкции чувствительного элемента, возможностями технологии его изготовления и электроникой. Оптимизация осуществляется путём натурального и математического моделирования. Важно отметить, что эффективность математического моделирования зависит от полноты математической модели ВТГ, выбранного численного метода и возможностей вычислительной техники. Математические модели ВТГ, построенные в работах [4-5] на основе теории упругости тонких оболочек, достаточно хорошо описывают поведение полусферического ВТГ и позволяют аналитическими методами исследовать влияние дефектов массы и формы на его параметры и характеристики, а также разработать алгоритмы его балансировки. Однако в случае ВТГ с более сложной формой подвеса резонатора, использующего пьезоэлементы, аналитические методы теряют свою эффективность. Необходимо использовать численные методы анализа математических моделей, описывающих процессы в чувствительных элементах ВТГ. Так, в работе [6] методом конечных элементов были рассчитаны формы и частоты собственных колебаний цилиндрических резонаторов ВТГ, влияние дефектов формы и вариаций плотности материала на расщепление рабочей собственной частоты резонатора, а также термоупругие потери в них.

Целью данной работы является конечно-элементное моделирование влияния частоты равномерного вращения одноосного ВТГ на собственные частоты его резонатора.

## Математическая модель

Физико-механические процессы в ВТГ можно описать в рамках общей теории электротермоупругости сплошных сред [7], введя объёмные инерционные силы, обусловленные вращением и вибрациями объекта, на котором установлен ВТГ.

Система связанных ДУЧП, описывающая эти процессы с учётом только сил Кориолиса, имеет вид:

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} + \alpha \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + 2\rho \boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0,$$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) + T_0 \boldsymbol{\alpha} : \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} = 0,$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0,$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0.$$

Используются линейные материальные соотношения

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c} : (\mathbf{s} + \beta \dot{\mathbf{s}}) - \mathbf{e}^* \cdot \mathbf{E},$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{e} : \mathbf{s} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{E},$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_0 \boldsymbol{\varepsilon}_r.$$

Электрическое поле выражается через скалярный потенциал  $\varphi$ :

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi.$$

Здесь  $\rho$  – плотность материала,  $c_p$  – удельная теплоёмкость,  $T_0$  – заданная температура,  $T$  – скалярное температурное поле,  $\boldsymbol{\Omega}$  – угловая скорость,  $\mathbf{u}$  – вектор смещений,  $\mathbf{E}$  – напряжённость электрического поля,  $\mathbf{D}$  – индукция электрического поля,  $\boldsymbol{\sigma}$  – тензор напряжений второго ранга,  $\mathbf{k}$  – тензор коэффициентов теплопроводности второго ранга,  $\boldsymbol{\alpha}$  – тензор коэффициентов теплового расширения второго ранга,  $\mathbf{c}$  – тензор модулей упругости 4-го ранга,  $\mathbf{s} = (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^*)/2$  – тензорное поле деформаций 2-го ранга,  $\mathbf{e}$  – тензор пьезоэлектрических модулей 3-го ранга,  $\varepsilon_0$  – абсолютная диэлектрическая проницаемость,  $\boldsymbol{\varepsilon}_r$  – тензор относительной диэлектрической проницаемости 2-го ранга,  $\alpha, \beta$  – коэффициенты демпфирования в модели вязкости Рэлея,  $*$  – операция перестановки двух индексов в тензоре.

Для нахождения собственных частоты и форм колебаний решается краевая задача для уравнения

$$-\rho \omega^2 \mathbf{u} + i\rho \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0,$$

с граничными условиями

$$\mathbf{u} = 0,$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0.$$

Здесь  $\omega = 2\pi f$ ,  $f$  – собственная частота,  $\mathbf{n}$  – единичный вектор нормали к границе области решения задачи.

Для определения отклика ВТГ на моногармоническое электромеханическое возбуждение и расчёта термоупругих потерь решается краевая задача для системы уравнений при разных значениях параметра  $\omega$ :

$$\begin{aligned} -\rho\omega^2\mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= 0, \\ i\omega\rho c_p T - \nabla \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) + i\omega T_0 \boldsymbol{\alpha} : \boldsymbol{\sigma} &= 0 \end{aligned}$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= 0, \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= 0, \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= P, \\ -\mathbf{n} \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) &= 0, \end{aligned}$$

Здесь  $P$  – амплитуда гармонической нагрузки, действующей на границу.

Временная зависимость отклика ВТГ на электромеханическое возбуждение даётся решением смешанной краевой задачи для системы уравнений

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{D} &= 0, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= 0 \end{aligned}$$

с начальными условиями

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_0 &= 0, \\ \dot{\mathbf{u}} &= 0, \end{aligned}$$

и граничными условиями

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= 0, \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= 0, \\ \varphi &= 0, \\ \varphi &= \varphi_{\sim}, \\ \int_{\partial S} \rho_s dS &= 0, \end{aligned}$$

где  $\varphi_{\sim}$  – заданная функция времени,  $\partial S$  – часть границы области решения задачи  $V$ .

Для решения рассмотренных краевых задач используется интегрированная система компьютерного моделирования физических процессов в гравиинерциальных датчиках [8, 9].

В состав системы входит электронная база данных, содержащая информацию о существующих разработках и исследованиях гравиинерциальных дат-

чиков, а также о физико-математических моделях и комплексах программ которые могут использоваться для компьютерного моделирования физических процессов в конструктивных элементах датчиков.

### Вычислительный эксперимент и обсуждение результатов

В качестве прототипа для вычислительных экспериментов была взята конструктивная схема одного из вариантов ВТГ, выпускаемых фирмой Innalabs (Ireland) [21].

Численное решение краевой задачи на собственные частоты проводилось методом конечных элементов в базовом модуле Comsol Multiphysics 4.2.

Предполагалось, что металлические детали ВТГ изготовлены из стали марки 12Х18Н10Т, а пьезоэлементы из керамики PIC-181.

В табл. 1 приведены параметры используемых материалов. На рис. 1, 2 показана геометрическая модель датчика ВТГ.

Таблица 1

Параметры материалов

Материал	сталь	пьезокерамика
Модуль Юнга	$198 \cdot 10^9$ Па	$166 \cdot 10^9$ Па
Коэффициент Пуассона	0.3	0.34
Плотность	$7900 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$	$7800 \text{ кг} \cdot \text{м}^{-3}$
Модель материала	Изотропная	Изотропная

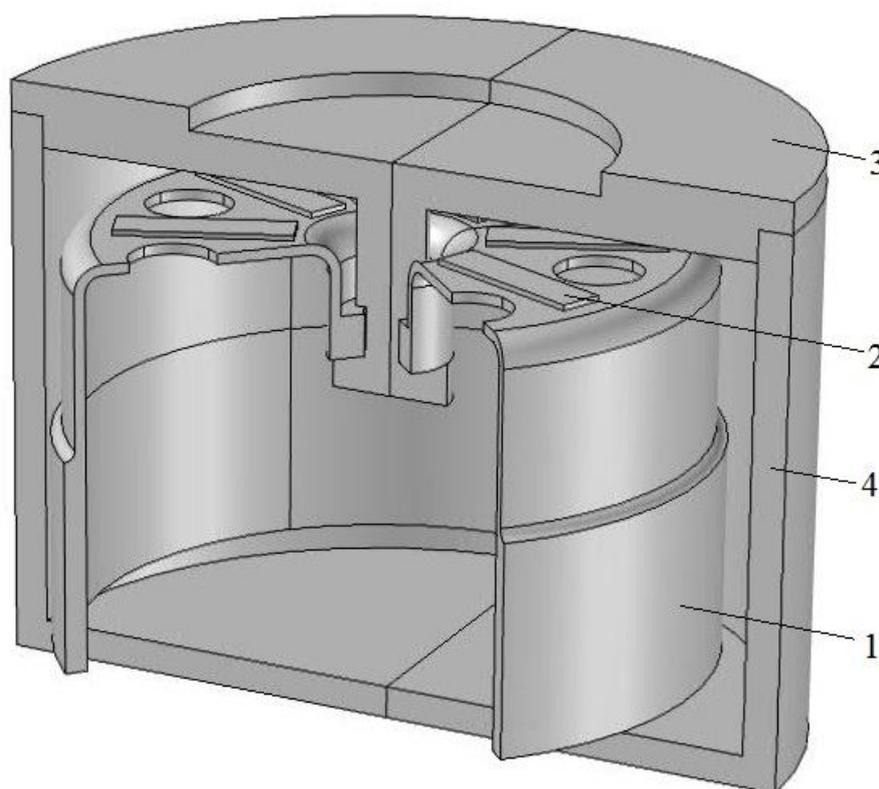


Рис. 1. Геометрическая модель датчика ВТГ с отверстиями в дне резонатора (в разрезе): 1 – резонатор, 2 – пьезоэлемент, 3 – основание, 4 – крышка

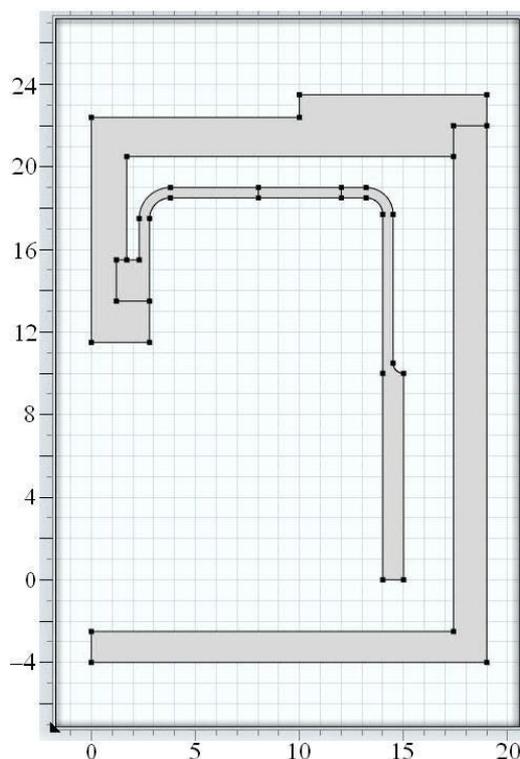


Рис. 2. Геометрия модели датчика ВТГ в сечении, проходящем через ось симметрии и центр одного из отверстий в донной части резонатора (размеры в мм)

На поверхности донной части основания датчика ВТГ задавалось граничное условие жёсткого закрепления  $\mathbf{u} = 0$ , а остальные поверхности считались свободными с граничным условием  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = 0$ .

Резонатор, основание и крышка разбивались на тетраэдральные лагранжевы элементы 2-го порядка, а пьезоэлементы на призматические лагранжевы элементы. Общее число конечных элементов – 297619, число степеней свободы – 1443732, среднее качество элементов – 0,75.

В табл. 2 приводятся результаты расчётов первых 10 собственных частот резонатора при  $\Omega = 0$ .

Таблица 2  
Собственные частоты резонатора при  $\Omega = 0$

№ моды	Частота	№ моды	Частота
1	552,105	6	3416,859
2	552,159	7	7045,389
3	1234,302	8	7045,834
4	1420,835	9	8962,503
5	3416,852	10	8962,507

Как видно из табл. 2, относительное расщепление вырожденных собственных частот резонатора при  $\Omega = 0$ , обусловленное качеством сетки в целом и другими погрешностями метода конечных элементов, не превышает 0,0001. Так

как теоретически в идеально осесимметричной конструкции ВТГ расщепление вырожденных собственных частот должно быть нулевым, то величина расщепления может служить критерием точности численного решения краевой задачи.

На рис. 3 – 8 представлен вид первых десяти основных форм колебаний резонатора. Для вырожденных собственных колебаний резонатора (моды 1 и 2, 5 и 6, 7 и 8, 9 и 10) показан вид форм мод 1, 5, 7 и 9. Парные к ним моды 2, 6, 8 и 10 имеют такой же вид, но плоскости их колебаний повернуты относительно оси симметрии на углы, равные  $90^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $90^\circ$  и  $30^\circ$  соответственно. Мода 3 (рис. 4) представляет собой крутильные колебания резонатора относительно оси симметрии, а мода 4 (рис. 5) соответствует продольным колебаниям резонатора относительно оси симметрии.



Рис. 3. Мода 1

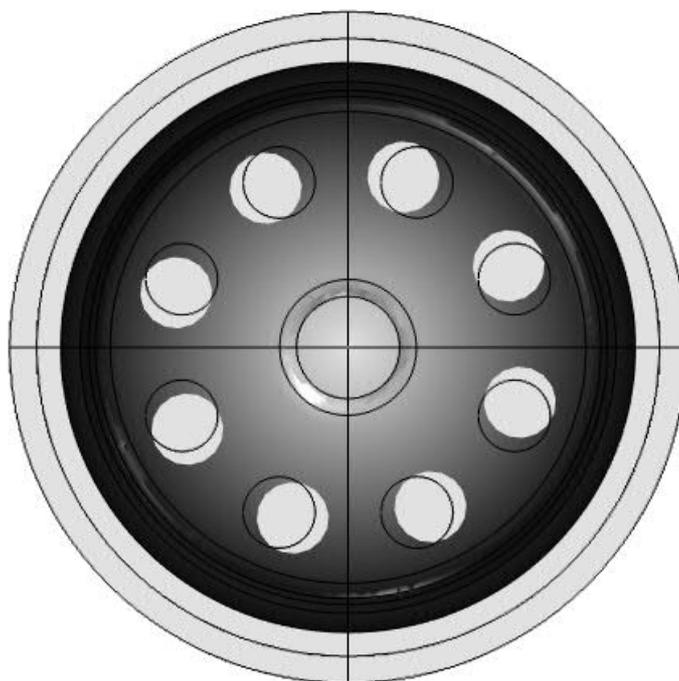


Рис. 4. Мода 3

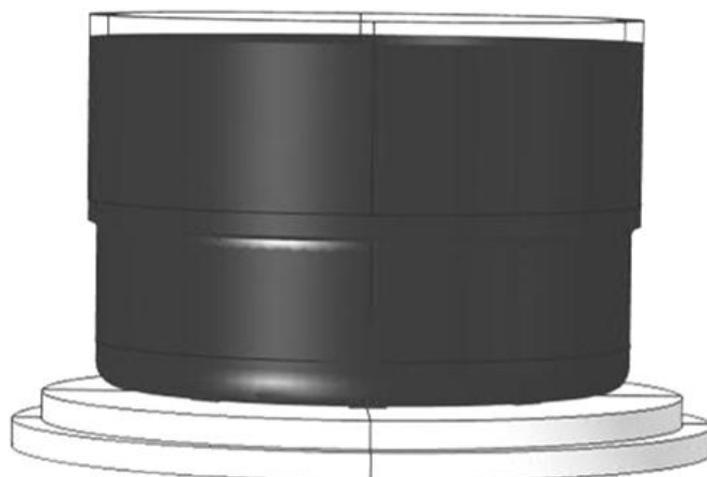


Рис. 5. Мода 4

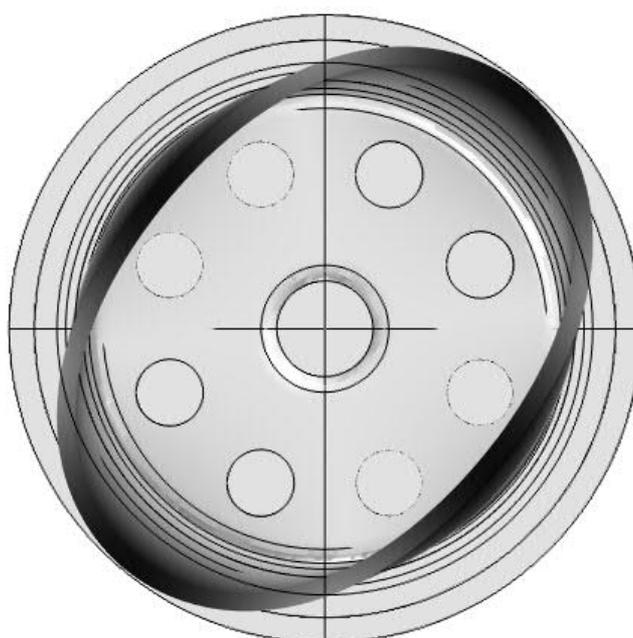


Рис. 6. Мода 5



Рис. 7. Мода 7

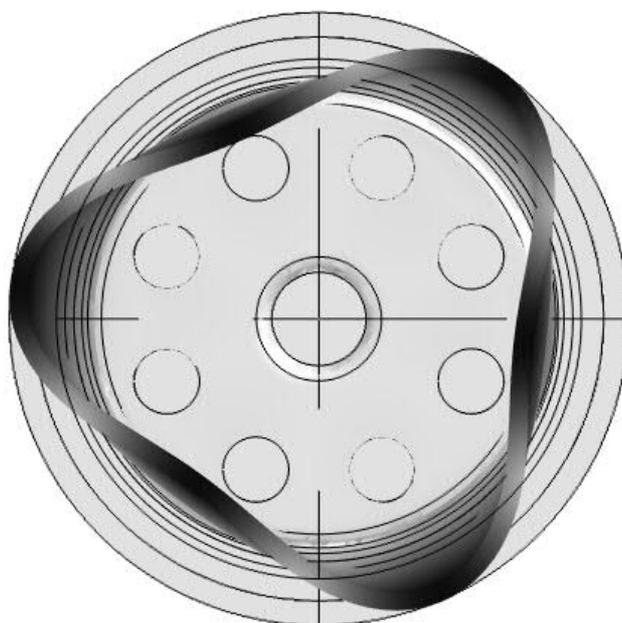


Рис. 8. Мода 9

В табл. 3 – 4 и на рис. 9 – 12 представлены результаты расчёта вырожденных собственных частот резонатора ВТГ, равномерно вращающегося вокруг оси симметрии при разных частотах вращения. Невырожденные собственные частоты (моды 3, 4) в пределах точности вычислительного эксперимента не меняются.

Таблица 3

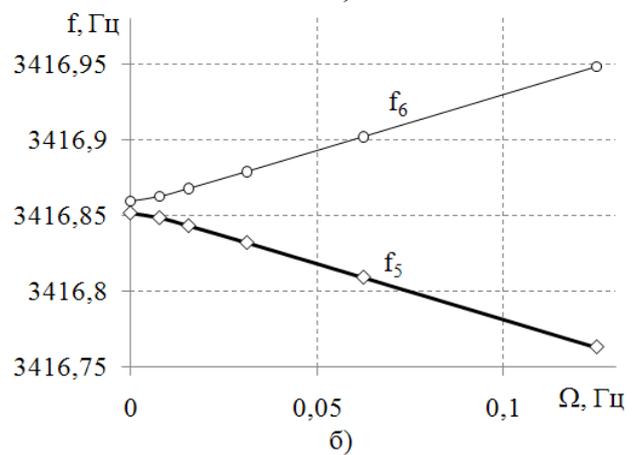
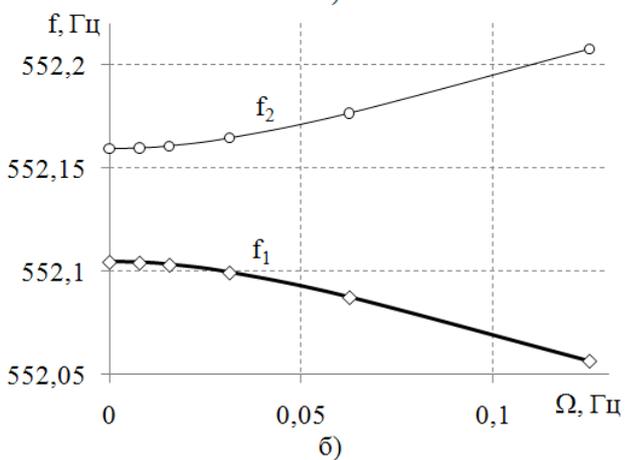
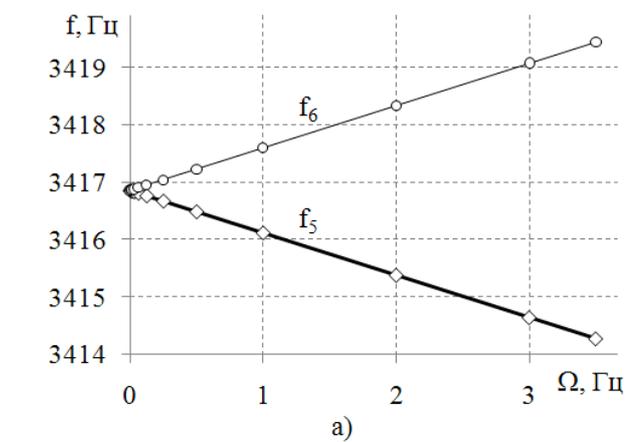
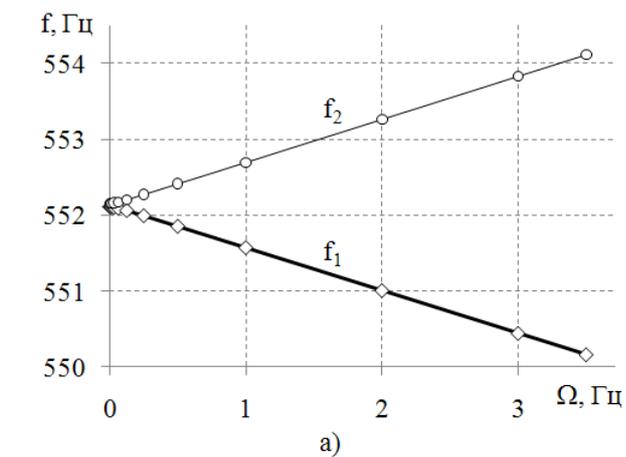
Влияние частоты вращения на собственные частоты резонатора

$\Omega$ , Гц	$f_1$ , Гц	$f_2$ , Гц	$f_5$ , Гц	$f_6$ , Гц
0	552,105	552,159	3416,852	3416,859
1/64	552,104	552,160	3416,849	3416,862
1/32	552,103	552,161	3416,843	3416,868
1/16	552,099	552,165	3416,832	3416,879
1/8	552,087	552,177	3416,809	3416,902
1/4	552,056	552,208	3416,763	3416,948
1/2	551,988	552,276	3416,671	3417,040
1	551,849	552,415	3416,486	3417,225
2	551,567	552,697	3416,116	3417,595
4	551,004	553,262	3415,377	3418,335
6	550,442	553,828	3414,638	3419,075
7	550,160	554,111	3414,268	3419,445

Таблица 4

Влияние частоты вращения на собственные частоты резонатора

$\Omega$ , Гц	$f_7$ , Гц	$f_8$ , Гц	$f_9$ , Гц	$f_{10}$ , Гц
0	7045,388	7045,834	8962,503	8962,507
1/64	7045,388	7045,835	8962,500	8962,510
1/32	7045,388	7045,835	8962,495	8962,514
1/16	7045,387	7045,836	8962,486	8962,523
1/8	7045,384	7045,839	8962,468	8962,542
1/4	7045,372	7045,851	8962,431	8962,579
1/2	7045,329	7045,894	8962,358	8962,652
1	7045,199	7046,024	8962,211	8962,799
2	7044,882	7046,341	8961,916	8963,094
4	7044,205	7047,018	8961,328	8963,682
6	7043,517	7047,706	8960,739	8964,271
7	7043,172	7048,052	8960,445	8964,565

Рис. 9. Зависимости собственных частот  $f_1$  и  $f_2$  резонатора от частоты вращения ВТГРис. 10. Зависимости собственных частот  $f_5$  и  $f_6$  резонатора от частоты вращения ВТГ

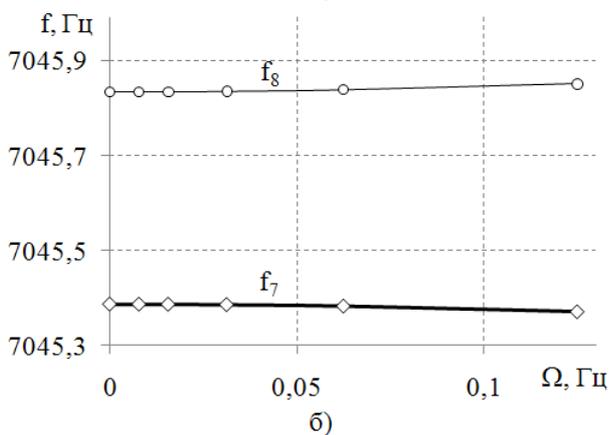
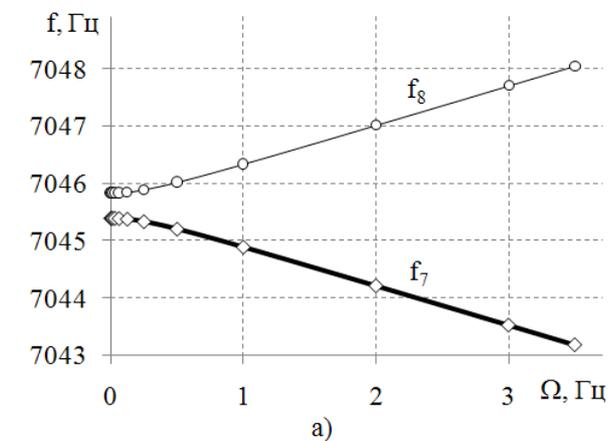


Рис. 11. Зависимости собственных частот  $f_7$  и  $f_8$  резонатора от частоты вращения ВТГ

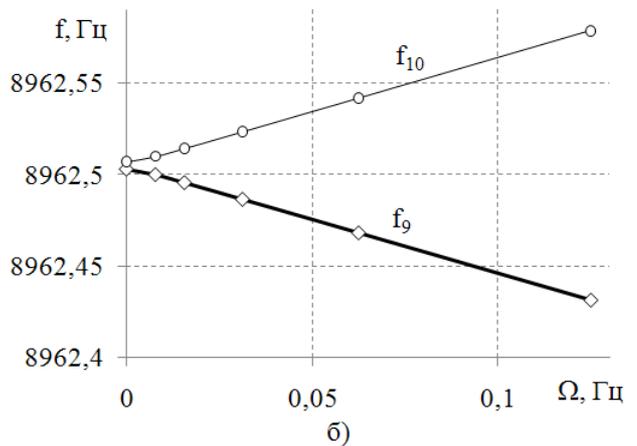
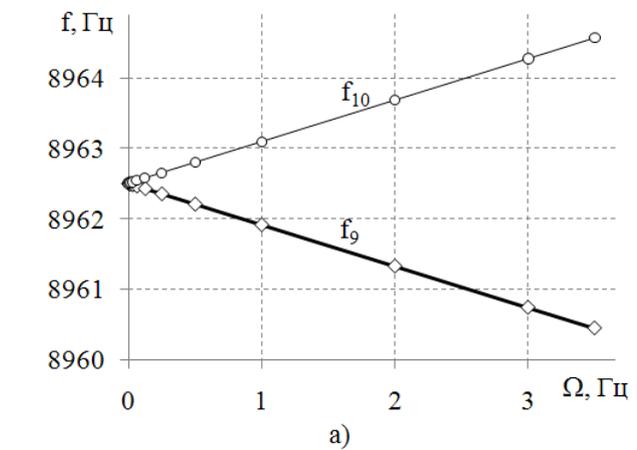


Рис. 12. Зависимости собственных частот  $f_9$  и  $f_{10}$  резонатора от частоты вращения ВТГ

Из рис. 9-12 видно, что расщепление вырожденных собственных частот резонатора растёт нелинейным образом при малых частотах вращения (менее 0.05 – 0,1 Гц), тогда как при больших частотах вращения рост расщепления вырожденных собственных частот становится линейным. Следует отметить, что нелинейность связана с начальным расщеплением вырожденных собственных частот. В реальных конструкциях ВТГ к расщеплению вырожденных собственных частот приводят дефекты геометрической формы и массы резонатора. Нелинейный характер зависимости расщепления вырожденной рабочей собственной частоты резонатора является одним из источников ошибок измерения ВТГ малых угловых скоростей.

#### Литература

1. Bryan G. H. On the Beats in the Vibrations of a Revolving Cylinder or Bell // Proc. Camb. Phil. Soc. Math. Phys. Sci. 1890. Vol. 7. P. 101-111.
2. Lynch D. D., Rogan R. R. Hemispherical resonator gyro // IEEE Trans. Aerosp. Electron. System. 1984. № 4. P. 432-433.
3. Лунин, Б. С. Волновой твердотельный гироскоп / Б. С. Лунин, В. А. Матвеев, М. А. Басараб. – Теория и технология. М.: Радиотехника, 2014. 176 с.
4. Журавлев, В. Ф. Волновой твердотельный гироскоп / В. Ф. Журавлев, Д. М. Климов. – М.: Наука, 1985. 125 с.

5. Басараб, М. А. Математическое моделирование физических процессов в гироскопии / М. А. Басараб, В. Ф. Кравченко, В. А. Матвеев. – М: Радиотехника, 2005. 176 с.
6. Миниатюрные волновые твердотельные гироскопы для малых космических аппаратов / В. А. Матвеев, Б. С. Лунин, М. А. Басараб и др. // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. «Приборостроение». 2014. №4. С. 80-96.
7. Наседкин, А. В. Конечно-элементное моделирование связанных задач / А. В. Наседкин, А. А. Наседкина. – Ростов-на-Дону: ЮФУ. 2015. 178 с.
8. Развитие системы компьютерного моделирования сверхпроводящих подвесов / Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков, В. В. Пешков, М. И. Ислентьева // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2014. Т. 10. № 1. С. 49-52.
9. Система компьютерного моделирования физико-механических процессов в волновом твердотельном гироскопе / И. Л. Батаронов, Г. Е. Шунин, С. А. Кострюков и др. // Физико-математическое моделирование систем: материалы XIX междунар. семинара. Воронеж: ВГТУ. 2018. С. 162-166.

## EFFECT OF ROTATIONAL SPEED ON THE NATURAL FREQUENCIES OF THE RESONATOR OF WAVE SOLID-STATE GYROSCOPE

I. L. Bataronov, G. E. Shunin, S. A. Kostryukov,  
V. V. Peshkov, S. V. Pisarev

Voronezh State Technical University

The finite-element method is used to solve a boundary value problem for the eigenvalues of the oscillation equation of a cylindrical resonator of a rotating wave solid-state gyroscope. The forms and frequencies of natural oscillations of the resonator are determined.

Keywords: mathematical model, wave solid-state gyroscope, rotation, natural frequencies, resonator.

## СОДЕРЖАНИЕ

Абрамова О. П., Абрамов С. В. Поле деформации связанной фрактальной структуры с элементами цилиндрического типа.....	3
Абрамов В. С. Взаимосвязи параметров модельного нанообъекта и фрактальных космологических объектов.....	9
Абдрахманов В. Л., Завьялов Д. В., Крючков С. В. Спонтанное возникновение поперечной ЭДС в двумерной сверхрешетке с модифицированным электронным спектром.....	15
Абдурагимов Г. Э. Численное построение положительного решения краевой задачи для одного нелинейного интегро-дифференциального уравнения второго порядка.....	20
Будкин И. В., Климин С. А., Маврин Б. Н. Первопринципные вычисления фононного спектра нелинейного кристалла $\text{BaGaGe}_2\text{S}_6$ .....	22
Бунаев А. А., Долганов И. М., Долганова И. О., Иванчина Э. Д., Пасюкова М. А., Гиль Т. А. Моделирование процессов алкилирования и сульфирования при производстве АБСК.....	25
Васильев П. В., Сеничев А. В., Ступина М. В., Головинов А. О., Христич О. С. Модель технического зрения для идентификации дефектов на изображениях асфальта.....	29
Гетманова Е. Е. Восстановление спектра ансамблей волн в цепочке несвязанных линейных осцилляторов.....	35
Зюбин А. С., Зюбина Т. С., Сангинов Е. А., Каюмов Р. Р., Добровольский Ю. А. Квантово-химическое моделирование влияния количества растворителя на энергию взаимодействия ионов в нафион-подобных мембранах.....	40
Зюбина Т. С., Зюбин А. С., Добровольский Ю. А. Моделирование переноса заряда в $\text{XNafion} * 12\text{DMSO}$ , $\text{X} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$ .....	46
Кирпиченкова Н. В., Кирпиченкова В. Я., Крыжановский К. В. Конечно-разностная схема для стохастически возмущенного стационарного уравнения $\sin$ -Gordon вблизи перенормированного квантовыми закоротками односолитонного решения.....	50
Кирпиченкова Н. В., Кирпиченкова В. Я., Крыжановский К. В. Исследование усредненной конечно-разностной схемы для стохастически возмущенного стационарного уравнения $\sin$ -Gordon.....	59
Mamedova Y. V. Electromagnetic form factor of light mesons with next-to-leading order accuracy of running coupling constant method and the new renormalization scale.....	70
Медакин П. О., Шеин А. Г., Потапов А. М. Численное моделирование движения ионного пучка в лазерном масс-спектрометре ЭМАЛ-2.....	76

Новикова О. Г. Методика расчёта тепловых полей термоблока в производстве промышленных смазок.....	81
Благовещенский В. В., Панин И. Г. Акустическая эмиссия при образовании и срыве дислокационного скопления.....	87
Рапаков Г. Г., Горбунов В. А., Абдалов К. А. Компьютерное моделирование пространственных закономерностей на основе статистики глобального индекса Морана.....	92
Романова К. А., Галяметдинов Ю. Г. Теоретическое моделирование строения и электронных свойств квантовых точек «ядро/оболочка».....	96
Семина И. А., Кожмендина И. С. Расчет тока, напряжения, мощности и частоты сетевого насоса WIL0 BL 80/170-30/2 с частотным преобразователем Emotron с помощью программного комплекса Machine Edition.....	99
Серкова В. И. Многослойная геологическая модель – адаптивная концепция.....	104
Смирнов Ю. Г., Баткин И. С. Моделирование влияния омагничивания нефти на ее реологические свойства.....	108
Лютоев А. А., Смирнов Ю. Г. Моделирование режима работы кассеты магнитного сепаратора.....	112
Солопова А. А., Пасюкова М. А., Долганова И. О., Долганов И. М., Бунаев А. А. Математическое моделирование процесса переработки продуктов алкилирования для исследования продолжительности межпромывочных циклов.....	119
Правоторова Е. А., Скворцов О. Б., Троицкий О. А. Моделирование процессов перераспределения плотности тока по сечению проводников при пропускании импульсов.....	123
Сташенко В. И., Скворцов О. Б., Троицкий О. А. Эквивалентные схемы проводников в условиях действия электрических импульсов.....	129
Филиппов В. В., Лузянин С. Е. Распределение электрических полей в полупроводниковых кристаллах с имплантированными примесями.....	136
Батаронов И. Л., Шунин Г. Е., Кострюков С. А., Пешков В. В., Писарев С. В. Влияние скорости вращения на собственные частоты резонатора волнового твердотельного гироскопа.....	140

Научное издание

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ

Материалы XX Международного семинара  
(г. Воронеж, 1 декабря 2018 г.)

Часть 1

В авторской редакции

Подписано в печать \_\_\_\_ . \_\_\_\_ . 2019.

Формат 60×84/16. Бумага писчая.

Усл. печ. л. 9,5. Тираж 350 экз.

Заказ № \_\_\_\_.

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»

394026 Воронеж, Московский проспект, 14

Участок оперативной полиграфии издательства ВГТУ

394026 Воронеж, Московский проспект, 14